



HAL
open science

Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi-orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement

Benoît Cosson

► To cite this version:

Benoît Cosson. Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi-orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement. Autre [cond-mat.other]. Université Paris-Est, 2008. Français. NNT : 2008PEST0235 . tel-00470534

HAL Id: tel-00470534

<https://theses.hal.science/tel-00470534v1>

Submitted on 6 Apr 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Laboratoire MSME FRE3160 CNRS
École doctorale MODES (ED 430)

THESE

pour l'obtention du titre de

DOCTEUR

de

L'UNIVERSITE PARIS-EST

Spécialité : Mécanique

présentée par

Benoît COSSON

**Modélisation et simulation numérique du procédé de
soufflage par bi-orientation des bouteilles en PET :
évolution de microstructure,
évolution de comportement**

soutenue le 25 novembre 2008

devant le jury composé de

Noëlle BILLON	Professeur, ENSMP, <i>Président</i>
Fabrice SCHMIDT	Professeur, EMAC, <i>Rapporteur</i>
Francisco CHINESTA	Professeur, ECN, <i>Rapporteur</i>
Julien YVONNET	Maître de conférence, UPEMLV, <i>Examineur</i>
Luc CHEVALIER	Professeur, UPEMLV, <i>Directeur de thèse</i>
Gilles RÉGNIER	Professeur, ENSAM, <i>Codirecteur de thèse</i>
Bernard PLANTAMURA	Service R&D, SIDEL, <i>Invité</i>

*À Anne,
À Capucine.*

Remerciements

À 30 ans, je finis déjà mes études. Mon père doit être un peu soulagé!

Je suis très heureux d'avoir pu faire cette thèse dans de très bonnes conditions matérielles et humaines. Du point de vue personnel, je remercie Anne qui m'a encouragé à reprendre mes études et à les suivre jusqu'au bout.

Durant ces trois dernières années, j'ai pu profiter des conseils et expertises de Luc Chevalier, Gilles Régnier et Julien Yvonnet qui étaient toujours présent quand j'en avais besoin. Merci pour l'aide des membres des équipes des laboratoires MSME à Marne la Vallée et LIM à Paris, plus particulièrement à Paulo Ferreira et Benoît Proust qui ont participé activement à la réalisation des essais mécaniques. Je tiens à féliciter Quoc Bao Nguyen, mon collègue et ami, pour m'avoir supporté pendant tout ce temps.

Enfin, je remercie ma famille et mes amis pour leur soutien qui a été très important pour moi.

Maintenant, il ne me reste plus qu'à trouver un boulot...

Table des matières

Table des figures	11
Introduction générale	17
Chapitre I Méthode numérique pour les grandes transformations	21
I.1 Introduction	22
I.2 Méthode des éléments naturels	23
I.2.1 Diagramme de Voronoï et voisins naturels	23
I.2.2 Construction des fonctions de forme NEM et propriétés	24
I.3 Comparaison de différentes formulations pour les fluides incompressibles . .	27
I.3.1 Formulation du lagrangien augmenté	28
I.3.2 Discrétisation de la formule du lagrangien augmenté	30
I.3.3 Deux cas particuliers : la formulation mixte et la méthode de pénalisation	31
I.4 Exemple : expansion d'un cylindre creux	32
I.4.1 Simulation en déformation plane	34
I.4.2 Formulation axisymétrique	38
I.5 Approximation b-NEM	43
I.5.1 Bases théoriques	43
I.5.2 Exemple : tube sous pression	45
I.6 Soufflage libre d'une préforme	47
I.6.1 Évolution temporelle du rayon	48
I.6.2 Simulation du soufflage libre	48
I.7 Conclusion partielle	50
Chapitre II Identification du comportement par un modèle viscoplastique et application à l'optimisation des procédés	53

II.1	Introduction	54
II.2	Essais de traction interrompus	55
II.2.1	Protocole expérimental	55
II.2.2	Résultats expérimentaux	59
II.3	Modélisation viscoplastique	61
II.3.1	Essai de traction 1D	62
II.4	Simulation des essais de traction	64
II.4.1	Validation du modèle	64
II.5	Simulation du soufflage libre	72
II.5.1	Soufflage de préformes : modèle visqueux	72
II.6	Simulation complète du procédé	82
II.6.1	Résultat : bouteille de 2 L et 0.33 L	83
II.7	Conclusion partielle	85

Chapitre III Détermination des propriétés induites par homogénéisation

micromécanique 87

III.1	Introduction	88
III.2	Modélisation micromécanique	88
III.2.1	Étape de représentation	89
III.2.2	Étape de localisation	89
III.2.3	Étape d’homogénéisation	90
III.3	Homogénéisation en élasticité linéaire isotrope	90
III.3.1	Passage du micro au macro et inversement	90
III.3.2	Lemme de Hill ou condition de Hill-Mandel	92
III.3.3	Théorie des modules effectifs	93
III.3.4	Homogénéisation des milieux aléatoires	94
III.4	Résultats	108
III.4.1	Données expérimentales	109
III.4.2	Calcul des bornes	110
III.4.3	Modèle auto-cohérent (agrégat)	111
III.4.4	Hypothèse sur l’évolution de la microstructure	112
III.4.5	Modèles avec microstructure en lamelle cristalline	113
III.4.6	Modèles avec microstructure multicouche biphasée	114
III.4.7	Problème de dispersion sur les valeurs expérimentales	115
III.5	Modèle isotrope transverse	119

III.5.1	Densité de répartition	122
III.5.2	Influence du facteur de forme	124
III.6	Application à la conception de bouteilles	125
III.7	Conclusion partielle	127
Chapitre IV Conclusions et Perspectives		131
IV.1	Conclusions	132
IV.2	Perspectives	133
IV.2.1	Vers une modélisation plus fine (viscoélastique)	133
IV.2.2	Homogénéisation de la viscosité	138
IV.2.3	Vers un design 3D	139
Bibliographie		141

Table des figures

1	Illustration du procédé de mise en forme des bouteilles en PET [DEL 06]. . .	18
2	Schéma globale de la simulation du procédé avec apport des différents chapitres (I, II, III).	19
I.1	Comparaison entre supports des fonctions de forme NEM et C-NEM. . . .	23
I.2	(a) Diagramme de Voronoï et triangulation de Delaunay, (b) fonction de forme NEM associée au nœud 1.	25
I.3	Cylindre soumis à une pression interne : hypothèse des déformations planes.	33
I.4	Évolution de la vitesse quand le coefficient de pénalisation α augmente dans le cas de la pseudo-pénalisation.	35
I.5	L'erreur globale en fonction du coefficient de pénalisation : (a) même intégration pour les termes de vitesse et de divergence; (b) le terme de divergence est sous intégré.	36
I.6	Erreur globale en fonction de la discrétisation.	37
I.7	Distribution de la pression aux nœuds : (a) fonction de forme C-NEM; (b) fonction de forme constante pour la pression.	37
I.8	Formulation du lagrangien augmenté : (a) fonction de forme C-NEM pour la pression et la vitesse, intégration réduite pour le terme de pénalisation; (b) fonction de forme constante pour la pression et intégration réduite pour le terme de pénalisation.	38
I.9	Tube soumis à une pression interne : hypothèse d'axisymétrie.	39
I.10	Discrétisation régulière suivant la direction radiale (h_r) et la direction longitudinale (h_z).	39

I.11	Influence du coefficient de pénalisation sur la qualité de la solution : (a) quand $h_z < h_r$ l'erreur résiduelle reste élevée sur le plateau; (b) quand $h_z > h_r$ la qualité de la solution numérique est très bonne même avec peu de nœuds.	40
I.12	Utilisation d'une distribution de nœud irrégulière dans la direction circonférentielle.	42
I.13	Formulation mixte : influence de la discrétisation nodale sur l'erreur. L'interpolation de la pression est faite par les fonctions de forme C-NEM et par les fonctions de forme constantes.	42
I.14	Supports des fonctions de forme bulle associés au k -simplexe de Delaunay : (a) support pour un triangle de Delaunay; (b) support pour une arête de Delaunay.	43
I.15	Influence du coefficient de pénalisation sur la qualité de la solution utilisant les fonctions de forme b-NEM : (a) quand $h_z < h_r$ l'erreur résiduelle reste élevée sur le plateau; (b) quand $h_z > h_r$ la qualité de la solution numérique est très bonne même avec peu de nœuds.	46
I.16	Influence de la discrétisation sur l'erreur globale : comparaison entre les formulations C-NEM et b-NEM.	47
I.17	Évolution du rayon en fonction du temps.	49
I.18	Distributions initiale et finale de nœuds pour une simulation de soufflage libre avec la méthode de pénalisation.	50
I.19	Évolution de la préforme pendant le soufflage. Un triangle est suivi du début à la fin.	51
II.1	Essai de traction uniaxiale sur des éprouvettes en PET [CHE 06].	55
II.2	Machine de traction MTS avec four et bombone d'azote liquide.	56
II.3	Marquage d'une eprouvette (a) avant et (b) après déformation.	57
II.4	Marquage des éprouvettes pour la vidéo-extensométrie.	58
II.5	Module d'Young en fonction du taux de cristallinité.	59
II.6	Essais de traction uniaxiale pour (a) $V=10 \text{ mm}^{-1}$, (b) $V=33 \text{ mm}^{-1}$, (c) $V=66 \text{ mm}^{-1}$	60
II.7	Coefficient (a) K_0 et (b) A en fonction de la température.	63
II.8	Simulations de l'essai de traction uniaxiale avec le modèle visqueux.	64
II.9	Simulation d'un essai de traction sur un fluide visqueux.	67

II.10 Points d'intégration servant au calcul des dérivées des fonctions de forme au nœud n	69
II.11 Simulation de l'essai de traction uniaxiale ($V = 15\text{mm.s}^{-1}$).	71
II.12 Simulation C-NEM d'essais de traction uniaxiale $V=15\text{ mm.s}^{-1}$ et $V=100$ mm.s^{-1} et comparaison avec l'hypothèse de traction uniforme.	72
II.13 (a) plan de la préforme utilisé pour l'optimisation du paramètre β , (b) machine de soufflage libre.	75
II.14 (a) Soufflage libre de bouteille pour $\beta = 3$, (b) soufflage libre de la préforme (pression interne = 0.6 MPa, température = 96°C).	76
II.15 Distribution de température industrielle [MEN 07].	77
II.16 Distribution de température le long de la préforme.	77
II.17 Évolution du soufflage pour (a) $\Delta T = 2^\circ\text{C}$, $\Delta L = 20\text{ mm}$ et (b) $\Delta T = 10^\circ\text{C}$, $\Delta L = 20\text{ mm}$	78
II.18 Ecart type de l'épaisseur en fonction des paramètres ΔT et ΔL	79
II.19 Épaisseur de la bouteille en fonction de ξ	79
II.20 Conditions opératoires simulées (a) vitesse de tige et pression, (b) Profil de température le long de la préforme.	80
II.21 Écart type ($\sigma^{1/2}$) de l'épaisseur de la bouteille.	80
II.22 Évolution des bouteille (a) $t_p = 80\text{ mm}$ et $V_r = 500\text{ mm.s}^{-1}$ (b) $t_p = 130$ mm et $V_r = 1625\text{ mm.s}^{-1}$	81
II.23 Épaisseur des bouteilles pour $t_p = 80\text{ mm}$ et $V_r = 500\text{ mm.s}^{-1}$ et $t_p = 130$ mm et $V_r = 1625\text{ mm.s}^{-1}$	81
II.24 Recherche de contact entre un nœud et le moule.	83
II.25 Recherche de l'instant de contact entre un nœud et le moule.	84
II.26 Évolution de la préforme dans un moule de 2 L.	84
II.27 Évolution de la préforme dans un moule de 0,33 L.	85
II.28 Mesure de la cristallinité pour (a) la préforme de 40 g, (b) la préforme de 25 g.	86
III.1 Passage micro-macro.	91
III.2 Conditions homogènes en contrainte.	92
III.3 Condition homogène en déformation.	92
III.4 Inclusion shéroïdale.	101
III.5 Représentation schématique d'un sphérolite.	102
III.6 Morphologie du PET [KUL 99].	105

III.7 Principe du schéma différentiel.	106
III.8 Principe du schéma auto-cohérent agrégat.	108
III.9 Bornes de Voigt, Reuss, Hashin, Shtrikman du module d'Young du PET.	110
III.10 Bornes inférieures et valeurs expérimentales [BED 05] du module d'Young du PET.	111
III.11 Module d'Young du PET obtenu par le schéma auto-cohérent (agrégat) et valeurs expérimentales [BED 05].	112
III.12 Facteur de forme des lamelles cristallines.	113
III.13 Module d'Young du PET estimé par le schéma différentiel pour une microstructure en lamelle.	114
III.14 Module d'Young du PET estimé par le schéma auto-cohérent pour une microstructure en lamelle.	115
III.15 Module d'Young du PET estimé par le schéma différentiel pour une microstructure multicouche biphasé.	116
III.16 Module d'Young du PET estimé par le schéma auto-cohérent pour une microstructure multicouche biphasé.	116
III.17 Densité de probabilité et fonction de répartition de la variable aléatoire E.	118
III.18 Estimation du module d'Young par le modèle auto-cohérent (a) E_{moyen} ; (b) E_{min} ($F_E = 5\%$); (c) E_{max} ($F_E = 95\%$); (d) coupe des surfaces a, b, c.	120
III.19 Différents facteurs de forme.	121
III.20 $\psi(\theta)$ pour différentes valeurs de χ_e	123
III.21 Estimation du module d'Young pour différentes valeurs du facteur de forme des inclusions.	124
III.22 Estimation du module d'Young (a) en fonction de la cristallinité, (b) en fonction de l'orientation.	125
III.23 Représentation des modules d'Young suivant les directions principales 1 et 2 dans (a) la bouteille de 2 L, (b) la bouteille de 0,33 L.	126
III.24 Conception de bouteilles.	128
III.25 Résistance à une pression interne pour (a) la bouteille de 2 L, (b) la bouteille de 0,33 L.	129
III.26 Mésophase et phase amorphe en fonction du taux de cristallinité Androsch <i>et al.</i>	130
IV.1 Module de cisaillement et contrainte en fonction de la déformation logarithmique.	135

IV.2 Simulations de l'essai de traction uniaxiale avec le modèle viscoélastique.	136
IV.3 Algorithme pour la simulation d'un essai de traction sur un fluide visco- élastique.	137
IV.4 Simulation viscoélastique (a) $V = 100 \text{ mms}^{-1}$ et $T = 80^\circ\text{C}$, (b) $V = 100 \text{ mms}^{-1}$ et $T = 100^\circ\text{C}$	138
IV.5 Comparaison entre la simulation 1D et l'hypothèse des contraintes planes (2D).	139
IV.6 Estimation de la viscosité du PET.	140
IV.7 Reconstitution d'un fond de bouteille par stéréo-corrélation d'images.	140

Introduction générale

Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans le cadre des thématiques du laboratoire MSME, la modélisation et la simulation multi-échelle. L'activité du laboratoire est orientée vers la prise en compte du comportement et de la structure à l'échelle micro ou mésoscopique pour la modélisation et la simulation du comportement des structures macroscopique. Dans le cadre de la mise en forme des polymères et plus particulièrement pour l'étirage-soufflage des bouteilles en Poly Ethylène Téréphtalate (PET), la modélisation de l'évolution de la microstructure et son impact sur les propriétés des bouteilles soufflées sont pleinement inscrites dans ces thématiques.

La figure 1 représente les différentes étapes de fabrication d'une bouteille. Entre les granules de PET brut et la bouteille soufflée, la microstructure aura évolué considérablement, pour un peu lors de l'injection des préformes puis lors du soufflage par bi-orientation de la bouteille. La forte orientation macromoléculaire et la cristallisation induite impactent fortement la rigidité du matériau. Le but de cette thèse est de modéliser le comportement mécanique du PET afin de prévoir les caractéristiques finales des bouteilles issues du procédé d'étirage-soufflage.

Le PET est un polymère semi-cristallin possédant des propriétés mécaniques fortement liées à l'état de sa microstructure. Cette dernière évolue en fonction de la température du matériau et de l'histoire de son chargement. On parle de cristallisation thermique, dans le cas où la cristallisation est due à la température du PET, et de cristallisation induite lorsque la cristallisation est due aux déformations de la matière. Par exemple, durant le procédé d'injection, le polymère est soumis à une grande pression afin de remplir tout le moule. Le matériau est alors soumis à un fort taux de cisaillement, ce qui cause de grandes déformations, mais peu de changement microstructuraux du fait de la haute température du procédé. Dans le cas de l'étirage-soufflage de bouteille, une préforme (réalisée par injection) est chauffée, à une température proche de la température de transition vitreuse, et soumise à une pression interne. Le matériau subi une traction

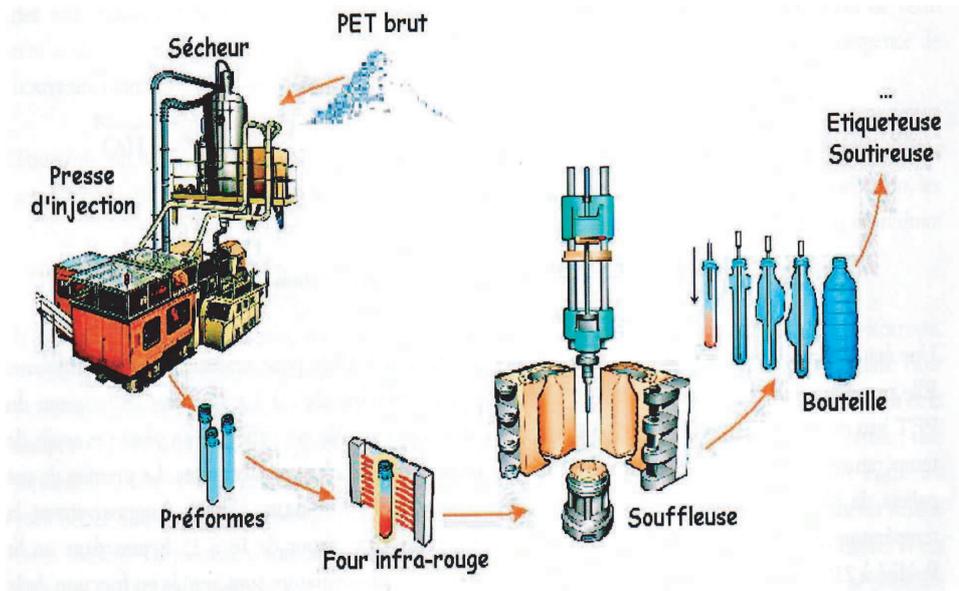


FIGURE 1 – Illustration du procédé de mise en forme des bouteilles en PET [DEL 06].

biaxiale. Les déformations finales sont de l'ordre de 300% dans les directions radiale et axiale. Les grandes déformations entraînées par les procédés de mise en forme induisent des changements microstructuraux. Pendant toute la durée du procédé, les changements de microstructure entraînent des changements de comportement. Les modèles mécaniques utilisés pour la simulation du procédé doivent prendre en compte toutes ces modifications.

Les procédés d'injection ou d'étirage-soufflage sont souvent réalisés après une étape de chauffage où le polymère est dans un état quasi liquide qui peut être modélisé par un comportement visqueux. Dans le cas particulier de l'étirage-soufflage de préformes en PET, la température du matériau, qui est d'environ 100°C, est légèrement supérieure à la température de transition vitreuse. A cette température le matériau n'est plus solide et présente une viscosité très élevée (environ 10^5 Pa.s). La viscosité dépend fortement de la température et de la vitesse de sollicitation du matériau. Pendant le processus de mise en forme, la viscosité augmente de façon drastique à cause du changement de morphologie (cristallisation induite, orientation moléculaire...).

La connaissance de la microstructure (cristallinité, orientation) et de l'évolution des propriétés associées est nécessaire pour prévoir les propriétés de service des bouteilles en PET. Pour rendre cette prédiction possible, nous devons mettre au point des outils de

conception performants : logiciel de simulation numérique et modèle de comportement mécanique.

Par la suite, nous présentons ces outils et la façon de les obtenir (Fig.2).

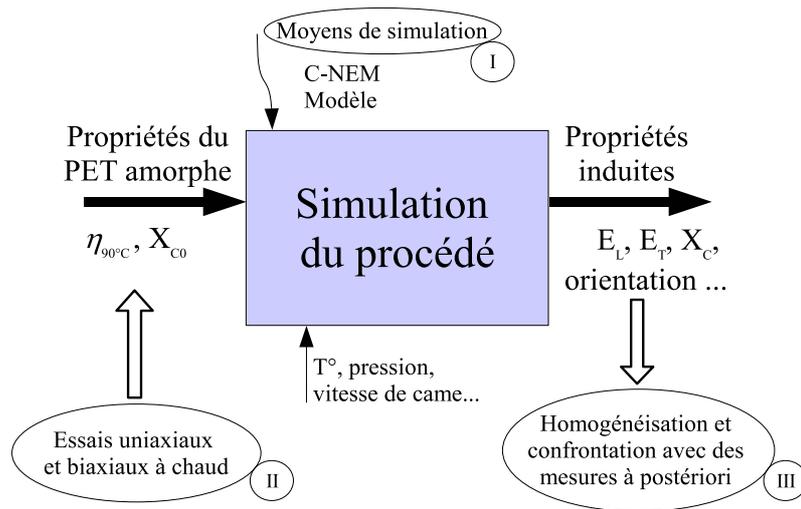


FIGURE 2 – Schéma globale de la simulation du procédé avec apport des différents chapitres (I, II, III).

Dans une première partie nous développons un outil numérique capable de réaliser des simulations de procédé de mise en forme en grande transformation pour des milieux incompressibles. Cet outil est basé sur les méthodes numériques de résolution des équations aux dérivées partielles. C'est une technique, dite "meshless" ou "sans maillage", appelée Méthode des Éléments Naturels Contraints (C-NEM). Elle permet d'éviter un grand nombre de problèmes rencontrés par la Méthode des Éléments Finis (FEM) dans la simulation de problèmes en grande transformation.

Par la suite, la deuxième partie aborde le côté expérimental de ce travail. Dans cette partie nous présentons les essais réalisés qui permettent de modéliser les évolutions de la microstructure et du comportement mécanique du PET en fonction des paramètres de température et de vitesse de déformation. Nous présentons une application de la C-NEM dans le cadre de l'optimisation du procédé d'étirage-soufflage, où nous montrons l'importance de la mise au point des machines de fabrication sur la qualité des bouteilles finales.

La Troisième partie de ce manuscrit traite de la micro-mécanique dans le cadre de l'élasticité en petite déformation, cadre qui décrit le comportement mécanique des bouteilles en service. Des modèles sont appliqués afin de prendre en compte l'anisotropie de la microstructure du PET. Enfin en perspectives, nous proposons les pistes pour une modélisation viscoélastique du comportement du PET.

Chapitre I

Méthode numérique pour les grandes transformations

I.1 Introduction

L'étirage-soufflage comme beaucoup de procédés de mise en forme génère des grandes déformations dans le matériau. Lors de la simulation de ces procédés par la méthode des éléments finis (FEM), le maillage de la pièce subit des distorsions. Ces distorsions ne permettent plus de quantifier la précision de la solution. Il est néanmoins possible de palier à ce défaut en pratiquant un remaillage de la pièce. Les codes commerciaux pratiquent couramment ce type d'opération dans le cas bi-dimensionnel, mais cela reste très complexe et coûteux dans le cas tri-dimensionnel. De plus, de nombreux remaillages dégradent la solution par la nécessité de projeter les différentes informations matérielles (cristallinité, orientation, etc.) stockées dans les points d'intégrations de l'ancien maillage sur les points d'intégration du nouveau maillage [PER 99].

Depuis la fin du siècle dernier de nouvelles méthodes sont apparues afin de résoudre les problèmes liés aux grandes déformations. Ces méthodes tentent de s'affranchir des difficultés liées au maillage en le supprimant et en utilisant d'autres approches de discrétisation de l'espace. Dans ces méthodes dites "sans maillage", contrairement à la FEM où l'approximation est liée aux éléments, l'approximation est calculée exclusivement à l'aide des données nodales. L'utilisation des méthodes sans maillage commence par l'introduction de la SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) [LUC 77] qui a été développée pour des problèmes d'astrophysique non bornés : explosions d'étoiles, mouvement dans les nuages de poussière... Dans les années 1990 d'autres méthodes, basées sur les moindres carrés mobiles, émergent : la méthode des éléments diffus ([NAY 92]), la technique "Element Free Galerkin" ([BEL 94]). Les avantages et les inconvénients de ces méthodes sont discutés et comparés par Belytschko *et al.* ([BEL 96, BEL 95]) et Liu *et al.* ([LIU 95, LIU 96]). Plus récemment, une méthode basée sur des constructions géométriques (diagramme de Voronoï et triangulation de Delaunay) appelée Méthode des Éléments Naturels (NEM, [SUK 98, SAM 95, CUE 03]) est apparue. Cette technique regroupe les avantages des méthodes sans maillage et de la FEM. C'est une extension de cette dernière, appelée Méthode des Éléments Naturels Contrains (C-NEM), que nous avons choisie pour simuler le procédé d'étirage-soufflage. Ses principes de base et son application aux milieux incompressibles sont décrits dans ce chapitre.

I.2 Méthode des éléments naturels

Nous présentons la NEM dans ce chapitre, même si celle-ci est limitée dans les applications aux domaines convexes. Son extension à des domaines quelconques est la C-NEM, elle est présentée en détail dans [YVO 04]. Dans la C-NEM, un diagramme de Voronoï contraint (dual de la triangulation de Delaunay contrainte) permet de traiter les domaines de géométries quelconques, ce qui était une difficulté de la méthode d'origine. Les fonctions de forme NEM, construites sur le diagramme de Voronoï de l'ensemble de nœuds, sont strictement interpolantes [SIB 80] et de plus, linéaires sur les bords (bords des domaines convexes) permettant d'imposer directement des conditions aux limites comme dans la méthode des éléments finis. La consistance linéaire est garantie par construction [SIB 80]. Le support de ces fonctions de forme (domaine d'influence), s'adapte automatiquement au voisinage grâce aux propriétés du diagramme de Voronoï. Pour étendre la linéarité des fonctions de formes sur tous les domaines (convexes ou non convexes), tout en supprimant l'influence parasite entre les nœuds des bords non convexes il faut utiliser la C-NEM. Dans un domaine non convexe un nœud, qui est proche de la frontière, peut voir l'influence de nœuds qui sont de l'autre côté de la frontière. Dans la notion de contrainte on ne tient pas compte de l'influence parasitaire des nœuds qui sont de l'autre côté de la frontière (voir Fig.I.1)

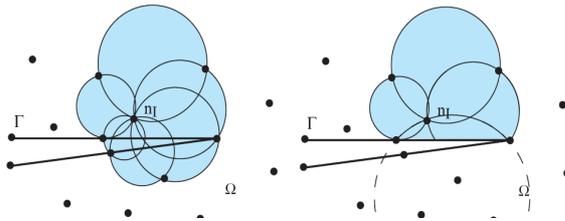


FIGURE I.1 – *Comparaison entre supports des fonctions de forme NEM et C-NEM.*

I.2.1 Diagramme de Voronoï et voisins naturels

Les notions de voisins naturels et d'interpolation naturelle furent introduites par Sibson [SIB 80] pour construire des interpolations à partir de nuages de nœuds très irréguliers (déstructurés). Cet interpolant est basé sur les constructions géométriques connues sous le nom de diagramme de Voronoï et de son dual, la triangulation de Delaunay. En 2D,

le diagramme de Voronoï, associé à un ensemble de nœuds, est une partition du plan en cellules T_i , chacune associée à un nœud n_i , telle que tout point contenu à l'intérieur d'une cellule est plus proche de son nœud associé que de n'importe quel autre nœud (Fig.I.2)

$$T_i = \{ \underline{x} \in \mathbb{R}^m : d(\underline{x}, \underline{x}_i) < d(\underline{x}, \underline{x}_j), \forall j \neq i \}, \forall i \quad (\text{I.1})$$

Où T_i est une cellule de Voronoï (du premier ordre) associée à un nœud n_i , \underline{x} est la position d'un point quelconque x , \underline{x}_i définit les coordonnées du nœud n_i et $d(\underline{x}, \underline{x}_i)$ est la distance entre le nœud n_i et un point x . En liant les nœuds partageants une face de cellule de Voronoï commune, on obtient la triangulation de Delaunay (introduite par Voronoï (1908) [VOR 08] et étendue par Delaunay (1934) [DEL 34]). Les voisins naturels d'un nœud sont les nœuds qui sont connectés au nœud central par une arête d'un triangle de Delaunay. On peut définir une cellule de Voronoï du second ordre T_{ij} de la façon suivante :

$$T_{ij} = \{ \underline{x} \in \mathbb{R}^m : d(\underline{x}, \underline{x}_i) < d(\underline{x}, \underline{x}_j) < d(\underline{x}, \underline{x}_k), \forall k \neq j, \forall k \neq i \}, \forall i \neq j \quad (\text{I.2})$$

Un point quelconque se trouvant dans T_{ij} a comme voisin le plus proche n_i et comme second voisin le plus proche n_j .

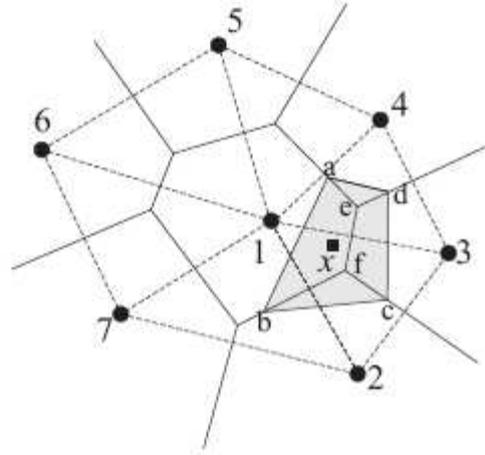
I.2.2 Construction des fonctions de forme NEM et propriétés

Si l'on considère le cas bidimensionnel de la figure I.2, la fonction de forme calculée en \underline{x} et associée au nœud n_i est donnée par le rapport entre les aires de la cellule de second ordre définie par n_i et \underline{x} et la cellule de premier ordre définie par :

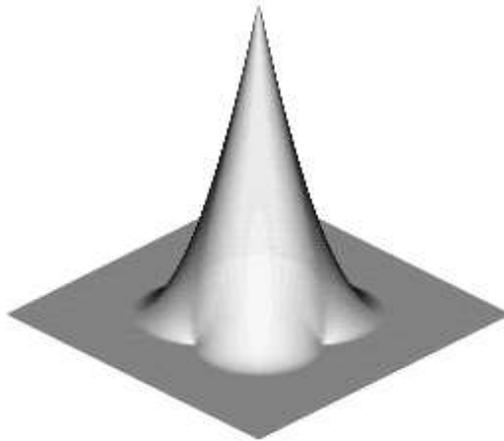
$$\phi_i^{sib}(\underline{x}) = \frac{\text{Area}(T_{xi})}{\text{Area}(T_x)} = \frac{\text{Area}(abfe)}{\text{Area}(abcd)} = \frac{\kappa_{xi}}{\kappa_x}, \quad \kappa_x = \sum_{i=1}^n \kappa_{xi} \quad (\text{I.3})$$

κ_x est la mesure de Lebesgue (une longueur en 1D, une surface en 2D et un volume en 3D) de la cellule de premier ordre T_x , κ_{xi} est la mesure de Lebesgue de la cellule de second ordre T_{xi} . La dérivée de la fonction de forme de Sibson $\phi_i^{sib}(\underline{x})$ est donnée exactement par Piper [PIP 93]. Si l'on écrit l'expression des fonctions de forme de la manière suivante :

$$\phi_i^{sib}(\underline{x}) = \frac{w_i}{\sum_{j=1}^n w_j} \quad (\text{I.4})$$



(a)



(b)

FIGURE I.2 – (a) Diagramme de Voronoï et triangulation de Delaunay,
(b) fonction de forme NEM associée au nœud 1.

n et w_i sont respectivement le nombre de voisins naturels et le poids défini dans l'équation I.3, le gradient du poids ∇w_i est donné par :

$$\nabla w_i = \frac{f_i}{d_i} (c_i - \underline{x}) \quad (\text{I.5})$$

Où, dans le cas 2D, f_i est la longueur de l'arrête de la cellule de Voronoï entre \underline{x} et n_i , d_i est la distance entre \underline{x} et n_i et c_i est le milieu de l'arrête de la cellule de Voronoï entre \underline{x} et n_i . Le gradient de la fonction de forme $\nabla \phi_i^{sib}(\underline{x})$ de Sibson est donné par :

$$\nabla \phi_i^{sib}(\underline{x}) = \frac{\nabla w_i \left(\sum_{j=1}^n w_j \right) - w_i \left(\sum_{j=1}^n \nabla w_j \right)}{\left(\sum_{j=1}^n w_j \right)^2} \quad (\text{I.6})$$

La figure I.2 montre l'allure d'une fonction de forme NEM. Le schéma d'interpolation pour un champ u , scalaire, vectoriel ou tensoriel est de la forme :

$$u^h(\underline{x}) = \sum_{i=1}^{i=n} \phi_i(\underline{x}) u_i \quad (\text{I.7})$$

Où u_i ($i \in [1, \dots, n]$) représente $u(\underline{x}_i)$ (\underline{x}_i sont les coordonnées du nœud n_i), n est le nombre de voisins naturels du point x , et $\phi_i(\underline{x})$ est la fonction de forme associée au nœud n_i donnée par l'équation I.3. Si le point x coïncide avec le nœud n_j , c'est-à-dire ($\underline{x} = \underline{x}_j$), alors $\phi_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij}$ (δ_{ij} étant la fonction delta de Kronecker). Les propriétés de positivité, d'interpolation et de partition de l'unité ont été prouvées dans [SUK 98] :

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \phi_i(\underline{x}) \leq 1 \\ \phi_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^{i=n} \phi_i(\underline{x}) = 1 \end{array} \right. \quad (\text{I.8})$$

Les fonctions de forme des éléments naturels vérifient aussi la propriété de consistance linéaire et la linéarité stricte de l'approximation sur les bords des domaines convexes, soit :

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^{i=n} \phi_i(\underline{x}) \underline{x}_i \quad (\text{I.9})$$

En effet, le diagramme de Voronoï n'est défini que pour un ensemble convexe de points et ne tient pas compte d'une éventuelle frontière. La problématique des domaines non convexes est liée aux influences parasites entre ces bords (voir [YVO 04] pour plus de détails). Une nouvelle technique appelée C-NEM a été proposée pour résoudre ce problème. Celle-ci repose sur deux idées : l'élimination de l'influence des nœuds parasites par l'utilisation d'un critère de visibilité et le calcul des fonctions de forme par le biais d'un nouveau diagramme de Voronoï, dit contraint.

I.3 Comparaison de différentes formulations pour les fluides incompressibles

Dans cette partie nous traitons du problème d'écoulement de fluide visqueux incompressible. Le modèle constitutif d'un fluide visqueux newtonien est donné par l'expression suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\eta\underline{\underline{D}} + \mu \operatorname{div}(\underline{v})\underline{\underline{I}} \quad (\text{I.10})$$

Où η est la viscosité de cisaillement et ν est la viscosité de dilatation. \underline{v} représente la vitesse, $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes de Cauchy et $\underline{\underline{D}}$ est le tenseur des taux de déformation défini par :

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} (\underline{\nabla}\underline{v} + (\underline{\nabla}\underline{v})^T) \quad (\text{I.11})$$

Dans le cas où le polymère se trouve à une température légèrement supérieure à la température de transition vitreuse (T_g), la viscosité du matériau est très importante et conduit à de faibles nombres de Reynolds. Les effets d'accélération et de pesanteur sont négligés dans la suite. L'équation d'équilibre s'écrit alors de la façon suivante :

$$\operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (\text{I.12})$$

Ω est le domaine fluide de contour $\partial\Omega$. $\partial\Omega$ est divisé en deux parties disjointes et complémentaires : une associée aux conditions aux limites en contrainte ($\partial\Omega_F$), l'autre aux conditions aux limites en vitesse ($\partial\Omega_V$). Les conditions aux limites du problème sont données par :

$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \underline{F}^d \quad \text{sur } \partial\Omega_F \quad (\text{I.13})$$

$$\underline{v} = \underline{v}^d \quad \text{sur } \partial\Omega_V \quad (\text{I.14})$$

Où \underline{v}^d est la vitesse imposée et \underline{F}^d est la contrainte imposée. Dans le cas particulier des fluides incompressibles, nous devons prendre en compte la condition supplémentaire suivante :

$$\operatorname{div}(\underline{v}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \quad (\text{I.15})$$

Un moyen simple de prendre en compte la condition d'incompressibilité dans l'équation I.10 est de faire une analogie avec la loi de Hooke en élasticité linéaire isotrope : μ correspond au coefficient de Lamé λ et η correspond à G . Ce coefficient peut s'écrire comme une fonction du coefficient de Poisson ν et du module de cisaillement G , qui est analogue à la viscosité de cisaillement η dans le problème visqueux.

$$\lambda = \frac{2\nu G}{1 - 2\nu} = \alpha G \Rightarrow \mu = \alpha \eta \quad (\text{I.16})$$

Pour les matériaux incompressibles, le coefficient de Poisson est égal à 0,5. Cela donne une valeur de α (et conséquemment à μ) qui tend vers l'infini. Dans ce cas le terme de divergence de l'équation I.10 est indéterminé : le tenseur des taux de déformation est réduit à sa partie déviatorique et un terme de pression hydrostatique p doit être ajouté pour obtenir le tenseur des contraintes de Cauchy complet.

Bon nombre d'auteurs ([SCH 96], [EVE 02] ...) choisissent une valeur typique de 0,49 pour le coefficient de Poisson, ce qui correspond à $\alpha = 50$. Ceci donne une solution acceptable au problème de fluide mais ce n'est pas très satisfaisant. Nous allons montrer que cela n'est pas adapté au soufflage. Quand α prend de très grandes valeurs, il y a un problème de blocage numérique et le champ de vitesse devient uniformément nul. Nous appellerons cette approche la méthode de "pseudo-pénalisation". Par la suite nous allons tester les performances de cette méthode et la comparer avec la formulation du lagrangien augmenté général ou particulier (mixte ou pénalisé) sur différents exemples choisis pour leur représentativité du problème de soufflage.

I.3.1 Formulation du lagrangien augmenté

Une façon générale d'écrire la forme faible d'un problème de mécanique est de considérer la minimisation de la formulation du lagrangien augmenté. Nous considérons le problème de minimisation sous contrainte ci-dessous.

Trouver $\underline{u} \in H$ tel que :

$$J(\underline{u}) \leq J(\underline{v}) \quad \forall \underline{v} \in H \quad (\text{I.17})$$

Avec la contrainte :

$$H = \{\mathbf{v} \in \mathcal{S}(\Omega), g(\mathbf{v}) = h\} \quad (\text{I.18})$$

Où $\mathcal{S}(\Omega)$ est un espace de Hilbert et g est une fonction convexe. En utilisant les techniques classiques, nous introduisons un multiplicateur de Lagrange $p \in \mathcal{G}(\Omega)$, où $\mathcal{G}(\Omega)$ est un autre espace de Hilbert, ce qui transforme le problème définie par les équations I.17, I.18 en un problème sans contrainte :

$$\min_{\underline{v} \in \mathcal{S}(\Omega)} \left\{ J(\underline{v}) + \int_{\Omega} p (g(\underline{v}) - h) d\Omega \right\} \quad (\text{I.19})$$

Le multiplicateur de Lagrange p est une inconnue supplémentaire qui peut être obtenue en resolvant un problème de point selle. Nous définissons le lagrangien $\mathcal{L} : \mathcal{S}(\Omega) \times \mathcal{G}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$ par :

$$\mathcal{L}(\underline{v}, p) = J(\underline{v}) + \int_{\Omega} p (g(\underline{v}) - h) d\Omega \quad (\text{I.20})$$

Le lagrangien augmenté \mathcal{L}_{α} pour $\alpha > 0$ est défini par :

$$\mathcal{L}_{\alpha}(\underline{v}, p) = J(\underline{v}) + \int_{\Omega} p (g(\underline{v}) - h) d\Omega + \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} (g(\underline{v}) - h)^2 d\Omega = \mathcal{L}(\underline{v}, p) + \mathcal{P}_{\alpha}(\underline{v}) \quad (\text{I.21})$$

Il peut être montré [GLO 84] que tout point selle de \mathcal{L}_{α} est aussi un point selle de \mathcal{L} et réciproquement. Cela est dû au fait que $\mathcal{P}_{\alpha}(\mathbf{v}) = 0$ quand la contrainte $g(\mathbf{v}) = h$ est satisfaite. Il faut noter que pour $p = 0$ nous avons :

$$\mathcal{L}_{\alpha}(\underline{v}, 0) = J(\underline{v}) + \mathcal{P}_{\alpha}(\underline{v}) \quad (\text{I.22})$$

Ce qui est la classique fonctionnelle pénalisée associée à la contrainte $g(\underline{v}) = h$. L'avantage du lagrangien augmenté est que, du fait du terme $\int_{\Omega} p (g(\underline{v}) - h) d\Omega$, la solution exacte du problème (Eq.I.17) peut être obtenue sans prendre une valeur infinie de α , au contraire de la méthode de pénalisation classique qui conduit à des problème mal conditionnés.

De plus, additionner le terme quadratique $\mathcal{P}_{\alpha}(\underline{v})$ au lagrangien \mathcal{L} améliore la convergence des algorithmes utilisés pour résoudre les problèmes de point selle, comme la méthode d'Uzawa ou la méthode du gradient conjugué (voir [GLO 84] pour plus de détails). Dans notre contexte le lagrangien augmenté est exprimé par :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\alpha(\underline{v}, p) = & \frac{1}{2} \int_{\Omega} 2\eta \underline{D}(\underline{v}) : \underline{D}(\underline{v}) d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{F}_s \cdot \underline{v} d\Gamma \\ & + \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\underline{v}) d\Omega + \frac{\alpha\eta}{2} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\underline{v}) \operatorname{div}(\underline{v}) d\Omega \end{aligned} \quad (\text{I.23})$$

Le point stationnaire de l'équation I.23 est trouvé en résolvant :

$$\begin{cases} D_{\delta v} \mathcal{L}_\alpha(\underline{v}, p) = 0 \\ D_{\delta p} \mathcal{L}_\alpha(\underline{v}, p) = 0 \end{cases} \quad (\text{I.24})$$

Où $D_{\underline{u}} f(\underline{v})$ est la dérivée directionnelle (variation de Gâteaux) de f dans la direction \underline{u} (pour plus de détails sur la dérivée directionnelle, on peut se référer à [MAR 94]). L'équation I.24 revient à :

Trouver $\underline{v} \in \mathcal{D} = \{\underline{v}/\underline{v} = \underline{w} \text{ sur } \partial\Omega_v, \underline{v} \in H^1(\Omega)\}$, $p \in L_2(\Omega)$ tel que :

$$\begin{cases} 2\eta \int_{\Omega} \underline{D}(\underline{v}) : \underline{D}(\underline{v}^*) d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{F}_s \cdot \underline{v}^* d\Gamma \\ + \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\underline{v}^*) d\Omega + \alpha\eta \int_{\Omega} \operatorname{div}(\underline{v}) \cdot \operatorname{div}(\underline{v}^*) d\Omega = 0 \quad \forall \underline{v}^* \in H_0^1(\Omega) \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{v}) d\Omega = 0 \quad \forall p^* \in L_2(\Omega) \end{cases} \quad (\text{I.25})$$

Où $H_0^1(\Omega) = \{\underline{v}/\underline{v} = \underline{0} \text{ on } \partial\Omega_v, \underline{v} \in H^1(\Omega)\}$. La solution de ce problème peut être obtenue numériquement avec la méthode C-NEM [YVO 04].

I.3.2 Discrétisation de la formule du lagrangien augmenté

Dans le cas de la discrétisation des éléments naturels, nous utilisons les mêmes fonctions de forme pour \underline{v} et \underline{v}^* :

$$\underline{v} = \mathbf{N} \cdot [\mathbf{v}] \quad \underline{v}^* = \mathbf{N} \cdot [\mathbf{v}^*] \quad (\text{I.26})$$

Où $[\cdot]$ représente le vecteur des quantités nodales. En suivant cette même notation, le tenseur des taux de déformation et la divergence de la vitesse s'écrivent :

$$\underline{D}(v) = \mathbf{B} \cdot [\mathbf{v}] \quad \underline{D}(v^*) = \mathbf{B} \cdot [\mathbf{v}^*] \quad (\text{I.27})$$

$$\text{div}(v) = \tilde{\mathbf{B}} \cdot [\mathbf{v}] \quad \text{div}(v^*) = \tilde{\mathbf{B}} \cdot [\mathbf{v}^*] \quad (\text{I.28})$$

\mathbf{B} et $\tilde{\mathbf{B}}$ sont composées des dérivées des fonctions de forme. Comme dans la méthode des éléments finis, nous utilisons une interpolation réduite pour p et p^* , afin d'éviter les problèmes de blocage numérique :

$$p = \mathbf{N}_p \cdot [\mathbf{p}] \quad p^* = \mathbf{N}_p \cdot [\mathbf{p}^*] \quad (\text{I.29})$$

En utilisant la forme discrète des équations I.26, I.27, I.28 et I.29, nous obtenons le système d'équations linéaire suivant :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_v + \alpha \mathbf{K}_p & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{I.30})$$

Où les matrices \mathbf{K}_v , \mathbf{K}_p et \mathbf{G} sont définies par les équations suivantes :

$$\mathbf{K}_v = 2\eta \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{B} dV \quad (\text{I.31})$$

$$\mathbf{K}_p = \eta \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{B}}^T \cdot \tilde{\mathbf{B}} dV \quad (\text{I.32})$$

$$\mathbf{G} = - \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{B}}^T \cdot \mathbf{N}_p dV \quad (\text{I.33})$$

et où :

$$\mathbf{F} = \int_{\partial\Omega_F} \mathbf{N}^T \cdot \underline{F}_s dS \quad (\text{I.34})$$

I.3.3 Deux cas particuliers : la formulation mixte et la méthode de pénalisation

Dans cette partie nous concentrons notre intérêt sur deux cas particuliers qui découlent de la formulation du lagrangien augmenté : (i) la formulation mixte où α est pris égal à

0 et (ii) la méthode de pénalisation où le terme de pression hydrostatique p n'est pas considéré. Dans le premier cas (i) le système à résoudre se réduit à :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_v & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (\text{I.35})$$

On peut noter que la viscosité η apparaît dans la matrice \mathbf{K}_v mais pas dans la matrice \mathbf{G} . Ceci peut générer des problèmes numériques quand le fluide présente de très grandes valeurs de viscosité, ce qui est le cas des polymères fondus. Mais à partir de quelle valeur une viscosité est-elle élevée ?

Pour la méthode des éléments finis, il a été montré que les fonctions de forme utilisées pour la vitesse doivent être d'un ordre supérieur à celui des fonctions de forme utilisées pour le terme de pression (condition de LBB [BRE 91]). Nous allons voir si cette condition est nécessaire pour la méthode des éléments naturels par la suite.

Le second cas (ii) entraîne le système suivant :

$$[\mathbf{K}_v + \alpha \mathbf{K}_p] [\mathbf{v}] = [\mathbf{F}] \quad (\text{I.36})$$

Avec cette formulation le nombre de degrés de liberté (ddl) par nœuds passe de 4 à 3 dans le cas 3D. Cette formulation est complètement équivalente à la méthode de pseudo-pénalisation montrée précédemment. Le désavantage de cette méthode est que le coefficient de pénalisation α doit être ajusté : s'il est trop "petit" la condition d'incompressibilité n'est pas vérifiée et s'il est trop "grand" le phénomène de blocage apparaît parce que la partie visqueuse de la formulation n'est plus prise en compte.

Pour les éléments finis, il est bien connu que la méthode de pénalisation est valable pour une grande plage de valeur du coefficient α (généralement de 10^4 à 10^{12}) si le terme d'incompressibilité est sous intégré. Nous allons discuter de ce point dans le contexte de la C-NEM.

I.4 Exemple : expansion d'un cylindre creux

Un exemple est proposé afin de tester l'efficacité des différentes formulations dans le cadre de la C-NEM. Le cas du cylindre creux sous pression est considéré. Nous avons effectué les simulations sous deux hypothèses différentes : l'axisymétrie et les déformations

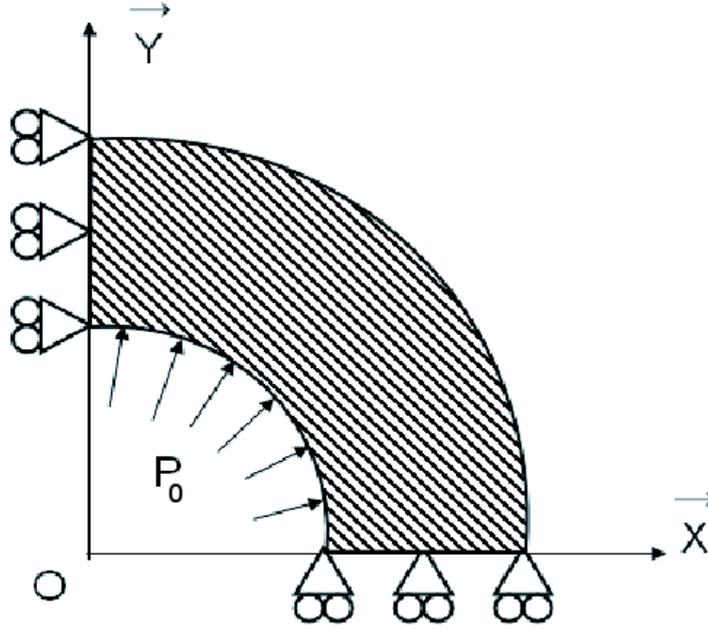


FIGURE I.3 – Cylindre soumis à une pression interne : hypothèse des déformations planes.

planes. La solution de ce problème peut être calculée analytiquement dans le cas de fluide newtonien. Nous pouvons donc estimer l'erreur de nos simulations numériques. La norme L^2 de l'erreur relative est définie par l'équation I.37 à partir du champ de vitesse exact v_{ex} et du champ de vitesse simulé v_{num} .

$$Err\% = 100 \left[\frac{\int_{\Omega} (v_{num} - v_{ex}) \cdot (v_{num} - v_{ex}) dS}{\int_{\Omega} v_{ex} \cdot v_{ex} dS} \right]^{1/2} \quad (I.37)$$

Pour une géométrie donnée R_i et R_e et une pression interne constante P_0 (voir la figure I.3), on peut résoudre le problème et obtenir l'expression analytique de la vitesse radiale en fonction du rayon. La vitesse du bord intérieur et du bord extérieur sont notées respectivement V_i et V_e et données par :

$$V_i = \frac{P_0 R_i(t) R_e(t)^2}{2\eta (R_e(t)^2 - R_i(t))} \quad V_e = \frac{P_0 R_i(t)^2 R_e(t)}{2\eta (R_e(t)^2 - R_i(t))} \quad (I.38)$$

Par la suite, nous nous intéressons au démarrage ($t = 0$) du gonflage. La géométrie est fixée avec 10 mm pour le rayon interne R_i , 15 mm pour le rayon externe R_e . La pression interne est de 1 MPa et la viscosité de η est de 0,1 MPa.s; la solution analytique donne respectivement 90 mm.s^{-1} et 60 mm.s^{-1} pour la vitesse du bord intérieur et du bord extérieur.

I.4.1 Simulation en déformation plane

Nous utilisons une formulation en déformation plane avec la géométrie illustrée par la figure I.3 pour réaliser les simulations numériques.

Premièrement, nous examinons les résultats obtenus quand le terme de divergence (associé à la matrice \mathbf{K}_p dans l'équation I.32) est intégré comme le terme de vitesse (associé à la matrice \mathbf{K}_v dans l'équation I.31) : ceci est équivalent à l'utilisation d'une formulation compressible avec un coefficient de Poisson qui tend vers 0,5 (méthode de pseudo-pénalisation). Sur la figure I.4 sont tracées les vitesses des bords intérieur et extérieur. On peut voir que le calcul donne de très bons résultats sur une faible plage de valeur de α . Les "bonnes" valeurs de α sont proches de 20-30, ce qui donne un coefficient de Poisson proche de 0,48.

Les valeurs faibles du coefficient de pseudo-pénalisation sont associées à une inflation maximum du cylindre, à l'inverse les valeurs élevées correspondent au cas où la forme déformée est superposée au contour initial. C'est une manifestation du terme de divergence de la vitesse pour lequel la solution $\underline{v} = \underline{0}$ partout dans le domaine est licite. Si aucune précaution n'est prise sur le nombre de points d'intégration, le problème de blocage apparaît et la vitesse tend vers une valeur nulle.

I.4.1.1 Discussion sur la méthode de pénalisation

Pour utiliser la méthode de pénalisation il est nécessaire de définir la valeur du coefficient de pénalisation. Il serait avantageux d'avoir une plage de stabilité de la méthode indépendante de la définition du problème (géométrie et conditions aux limites) afin de toujours garder la même valeur de α .

Quand la méthode de pénalisation est utilisée dans des simulations par éléments finis, on utilise une interpolation quadratique pour la vitesse et on augmente le nombre de points d'intégration pour le terme de viscosité mais on sous intègre le terme de pénalisation qui correspond à la pression. En utilisant la même interpolation mais avec seulement un point d'intégration pour le terme de pénalisation et trois pour le terme de viscosité, la

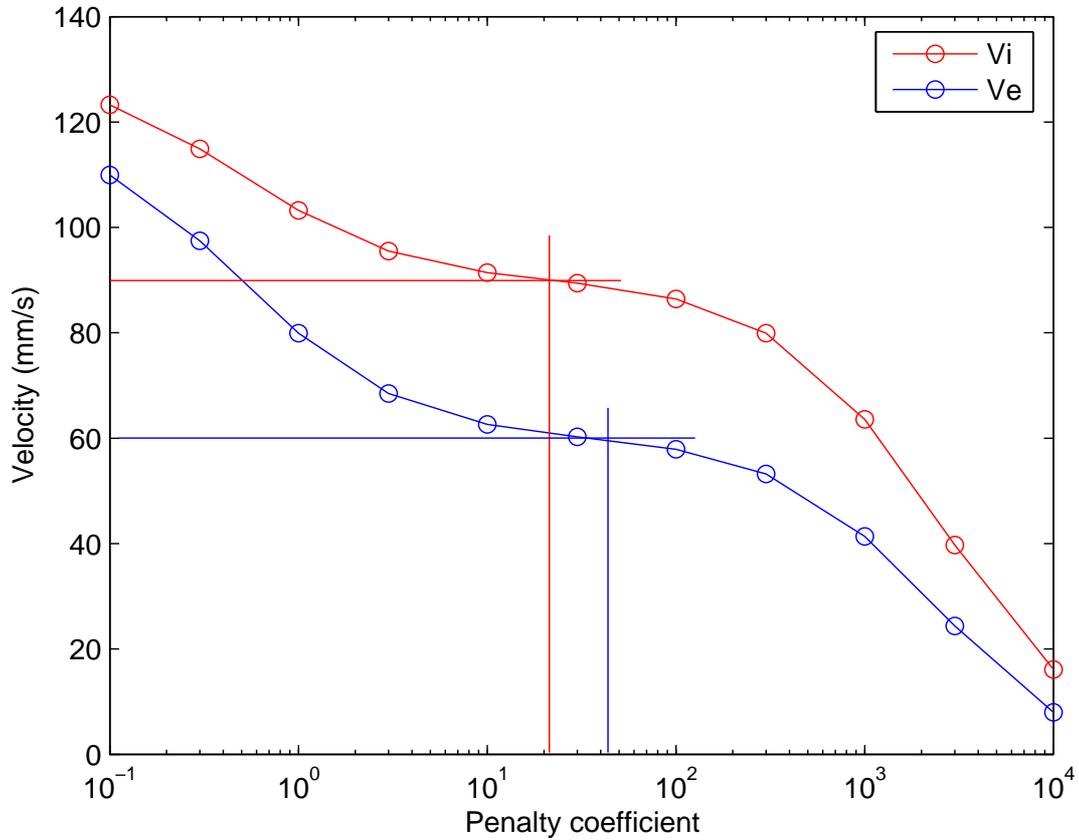


FIGURE I.4 – Évolution de la vitesse quand le coefficient de pénalisation α augmente dans le cas de la pseudo-pénalisation.

comparaison avec la méthode précédente montre un grand gain (voir la figure I.5). Pour les grandes valeurs de α , le phénomène de blocage observé pour la méthode de pseudo-pénalisation est significativement réduit.

Dans cet exemple, 2^n nœuds ont été utilisés pour discrétiser l'épaisseur et le nombre de nœuds dans le quart de cercle est ajusté pour obtenir une distribution de nœuds la plus régulière possible. 2^n nœuds pour 5 mm d'épaisseur et 2^{n+2} nœuds pour un arc de cercle moyen de $12,5\pi/2 \approx 20$ mm soit environ 2^n nœuds pour 5 mm. On peut noter sur la figure I.5.b que l'erreur globale avec une telle discrétisation reste élevée (environ 10% pour $n = 2$) pour les grandes valeurs de α . En utilisant plus de points, on réduit l'erreur et on montre ainsi la convergence de la méthode, mais cela augmente le temps de calcul. Un point reste inexplicable : la valeur optimum de α (minimum de l'erreur) n'est pas obtenue sur la plage des valeurs stables de α (i.e. sur la plage $[10^5, 10^{12}]$).

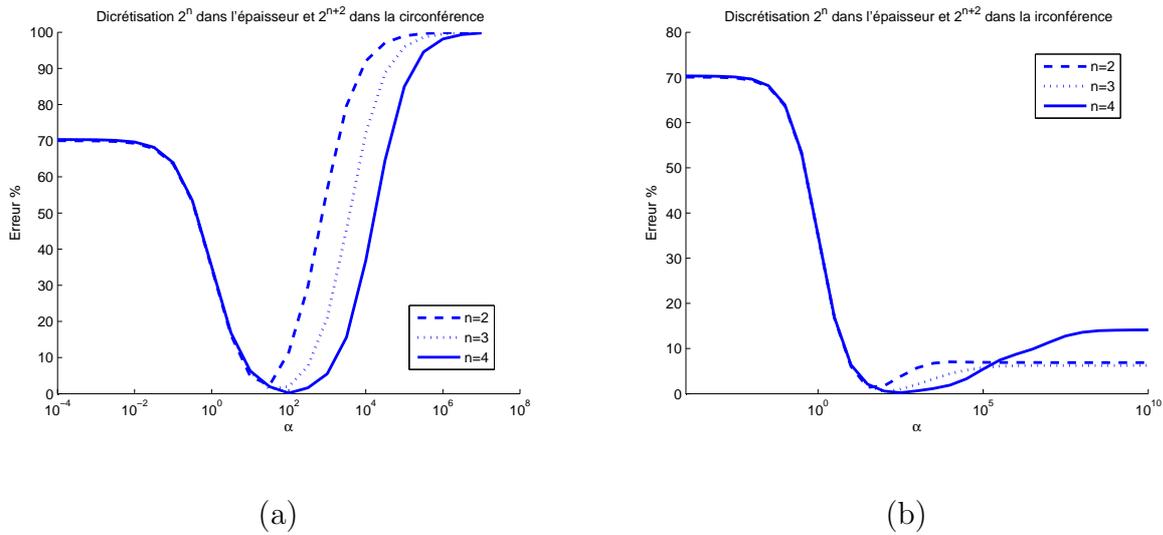


FIGURE I.5 – L'erreur globale en fonction du coefficient de pénalisation : (a) même intégration pour les termes de vitesse et de divergence ; (b) le terme de divergence est sous intégré.

I.4.1.2 Discussion sur la formulation mixte

La formulation mixte donne de meilleurs résultats que la méthode de pénalisation mais avec un coût de calcul plus élevé, à cause d'un d.d.l. supplémentaire : la pression. La figure I.6 montre qu'utiliser les mêmes fonctions de forme pour la pression (associée à la matrice \mathbf{G} dans l'équation I.33) et pour la vitesse (associée à la matrice \mathbf{K}_v dans l'équation I.31) donne de bons résultats. Plus la discrétisation est élevée, plus l'erreur est faible. La pente de la convergence est d'environ -1 en échelle logarithmique.

Nous pouvons aussi essayer une fonction de forme constante pour l'interpolation de la pression (associée à la matrice \mathbf{G} dans l'équation I.33) autour d'un nœud. De cette façon les conditions de simulation sont proches de la condition de LBB. La figure I.6 montre que les résultats sont meilleurs.

Dans notre cas la solution analytique du problème indique que le terme de pression hydrostatique doit être uniforme et égal à -0,8 MPa. Si le champ de vitesse est correctement représenté, la formulation mixte génère des irrégularités dans la distribution de pression. Si l'on trace la distribution de pression (voir la figure I.7 pour le cas $n = 4$) dans les deux cas, on constate que l'erreur la plus faible est associée à la distribution de pression la plus uniforme. Dans le cas présent la formulation mixte donne de meilleur résultats que la méthode de pénalisation, mais le coût de calcul associé est beaucoup plus élevé.

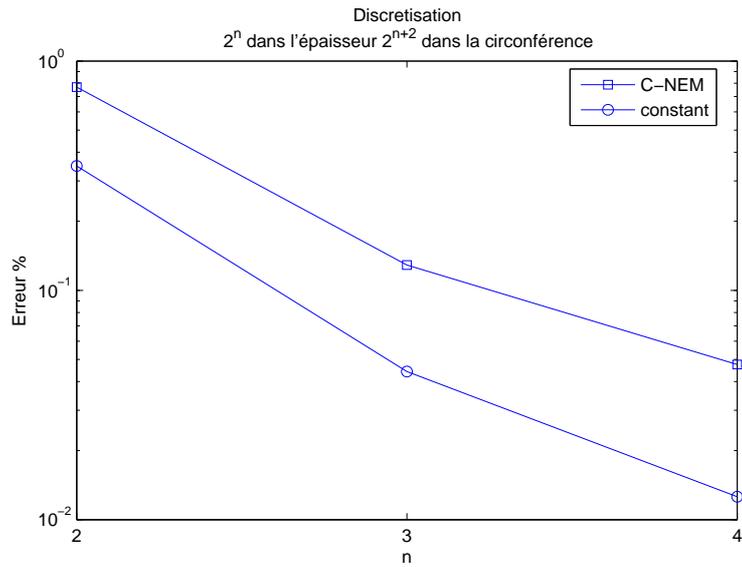


FIGURE I.6 – Erreur globale en fonction de la discrétisation.

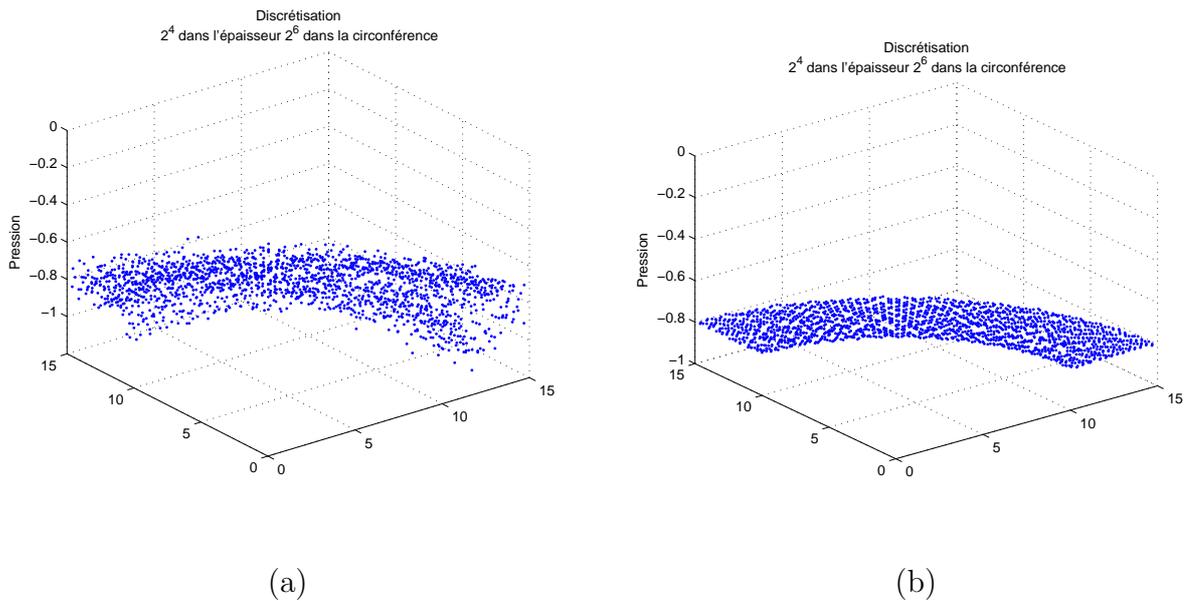


FIGURE I.7 – Distribution de la pression aux nœuds : (a) fonction de forme C-NEM; (b) fonction de forme constante pour la pression.

I.4.1.3 Discussion formulation du lagrangien augmenté

La formulation du lagrangien augmenté présente les mêmes difficultés que la méthode de pénalisation, cela à cause du choix du coefficient de pénalisation. Mais elle ne présente pas de diminution des coûts de calcul car le nombre de d.d.l. est identique à celui de la formulation mixte.

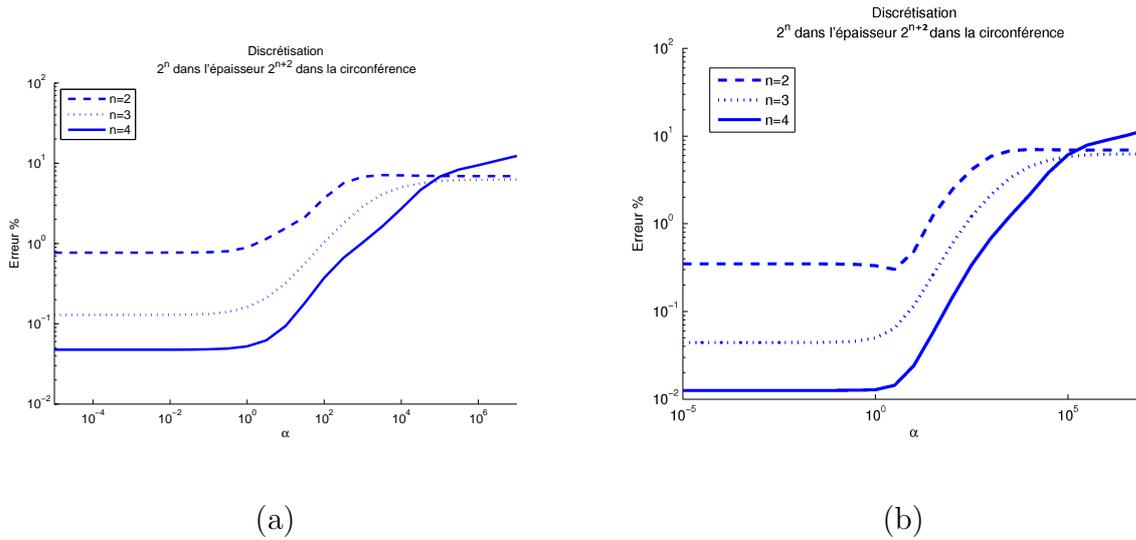


FIGURE I.8 – Formulation du lagrangien augmenté : (a) fonction de forme C-NEM pour la pression et la vitesse, intégration réduite pour le terme de pénalisation ; (b) fonction de forme constante pour la pression et intégration réduite pour le terme de pénalisation.

La figure I.8 montre que les petites valeurs de α entraînent une bonne solution avec une précision qui augmente avec la discrétisation. Quand la valeur du coefficient de pénalisation approche de 1, le gain de la solution est pauvre et l’erreur atteint une valeur ”plateau”. On constate que l’erreur n’est pas une fonction monotone de la discrétisation. Utiliser une fonction de forme pour la pression et une sous intégration du terme de pénalisation donne de meilleurs résultats que d’utiliser les fonctions de forme C - NEM pour les champs de vitesse et de pression. Ces résultats sont en accord avec la condition de LBB.

On ne trouve pas d’autre avantage à cette formulation dans le contexte présent. De plus, le terme de pénalisation dégrade la solution pour les valeurs élevées de α .

I.4.2 Formulation axisymétrique

Ici, nous présentons le même problème mais en utilisant non plus l’hypothèse des contraintes planes mais l’hypothèse d’axisymétrie (voir la figure I.9). Ces nouvelles simulations numériques confirment les conclusions de l’hypothèse de contraintes planes. Mais dans ce cas, il est plus facile de tester l’influence de la distribution nodale.

Le domaine étudié est un rectangle avec des arrêtes parallèles aux axes radial et longitudinal. Comme il est montré sur la figure I.10, la distribution des nœuds dans la direction radiale peut être différente de celle de la direction longitudinale. Nous avons testé différents

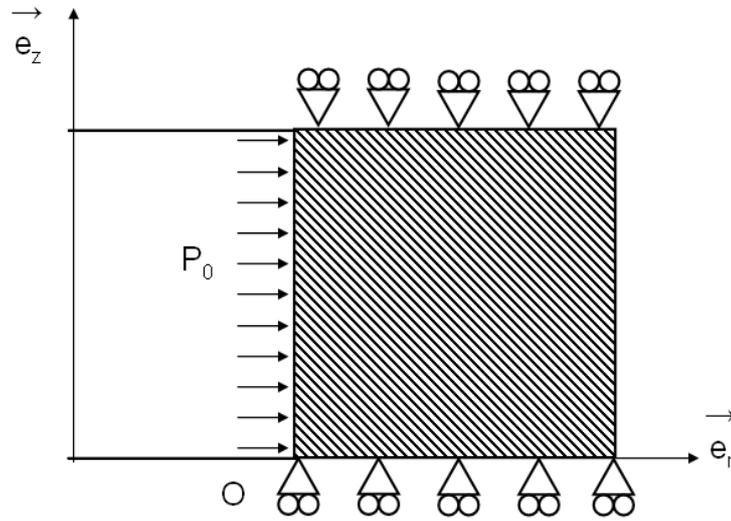


FIGURE I.9 – Tube soumis à une pression interne : hypothèse d'axisymétrie.

cas : $h_r = h_z$, $h_r = 2h_z$ et $h_z = 2h_r$.

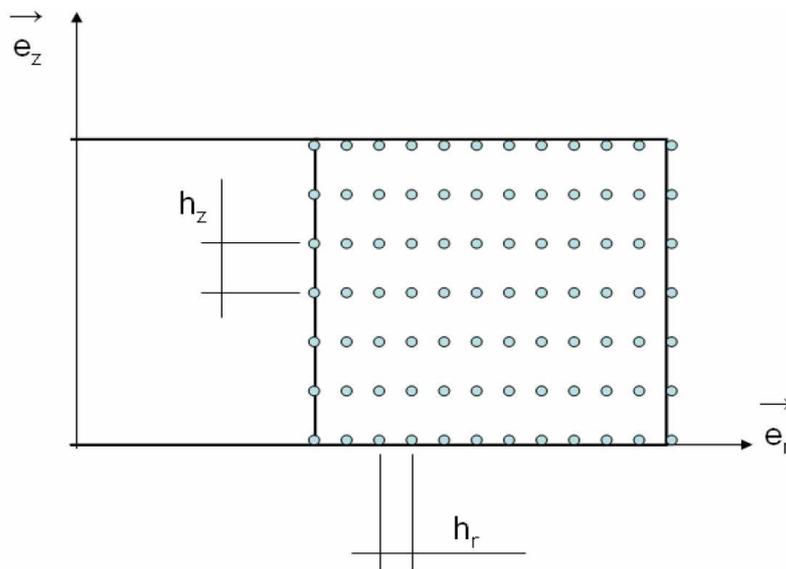


FIGURE I.10 – Discrétisation régulière suivant la direction radiale (h_r) et la direction longitudinale (h_z).

I.4.2.1 Méthode de pénalisation

Sur la figure I.11 nous remarquons que : (i) l'erreur minimale est généralement obtenue pour un coefficient de pénalisation se trouvant en dehors de la "plage stable des valeurs de α " (i.e., $\alpha > 10^5$); (ii) dans la "zone stable", où l'erreur ne dépend pas de la valeur du coefficient de pénalisation, l'erreur résiduelle est plus importante quand $h_z < h_r$ que quand $h_z > h_r$. La différence est très spectaculaire, avec $n = 3$ dans le graphique de gauche (8 nœuds pour la discrétisation radiale) l'erreur résiduelle est d'environ 16%, ce qui est très supérieur au 1% donné sur la graphique de droite (8 nœuds pour la discrétisation radiale) obtenus pour $n = 2$. Dans les deux cas, la discrétisation radiale est la même et la seule différence vient de la longueur h_z .

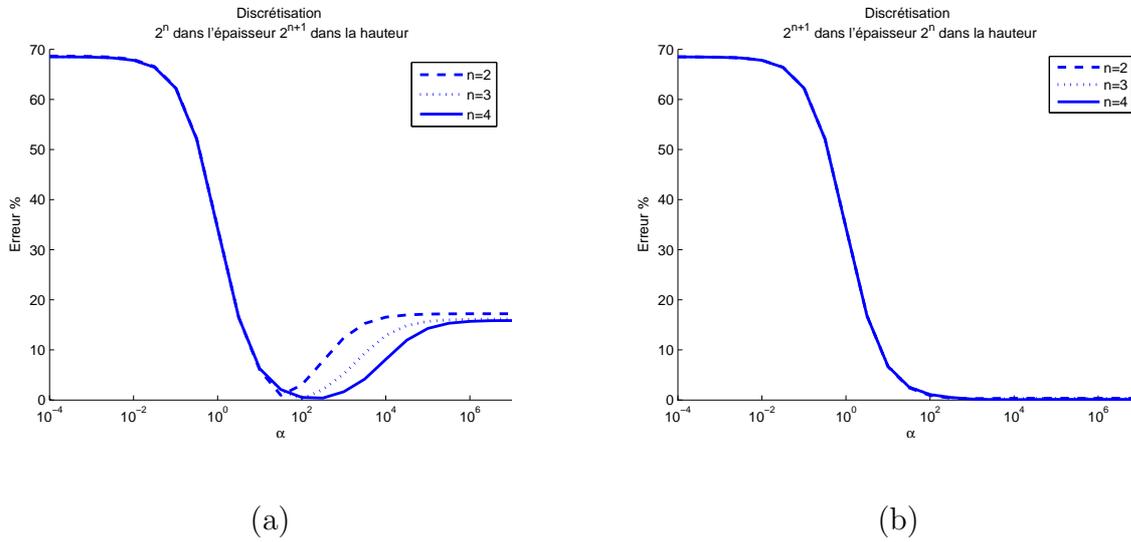


FIGURE I.11 – Influence du coefficient de pénalisation sur la qualité de la solution : (a) quand $h_z < h_r$ l'erreur résiduelle reste élevée sur le plateau ; (b) quand $h_z > h_r$ la qualité de la solution numérique est très bonne même avec peu de nœuds.

Dans tous les cas, une plage large de valeurs du coefficient de pénalisation assure une forme déformée stable. La valeur de l'erreur dépend de la discrétisation (ce qui est naturel), mais aussi du rapport h_r/h_z (ce qui est plus surprenant).

La convergence des simulations C-NEM, utilisant n'importe quel coefficient de pénalisation dans la plage $[10^6, 10^{12}]$, est observée. Pour $h_z < h_r$ il apparaît qu'une erreur asymptotique d'environ 16% existe et qu'une amélioration de la solution n'est pas possible. L'explication de cette influence peut être trouvée dans la forme de la solution analytique du problème. Dans le cas de la formulation axisymétrique, la composante radiale u de

la vitesse décroît de V_i à V_e en fonction de la valeur du rayon et en même temps la composante w reste nulle.

Les simulations C-NEM donnent une approximation de la solution, des perturbations apparaissent dans les résultats numériques. Ces perturbations ont plus de conséquences sur la composante w de la vitesse qui doit être nulle que sur la composante u qui a une valeur finie. Pour de grandes valeurs du coefficient de pénalisation, la solution numérique donne une grande importance à la condition d'incompressibilité qui s'écrit :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{I.39})$$

Si l'amplitude de la perturbation numérique est notée ϵ_z , la variation du second terme de l'équation I.39 est d'environ $\frac{\partial w}{\partial z} \sim \frac{\epsilon_z}{h_z}$. Ce terme affecte la valeur de la composante u via la condition d'incompressibilité et plus h_z est petit, plus l'erreur sur u sera grande.

Dans le cas de l'hypothèse des déformations planes du problème de soufflage, une telle configuration (une composante de la vitesse qui est quasiment nulle) apparaît près des axes X et Y. Il est intéressant de noter que la forme déformée est distordue si l'on se situe proche des axes et non pas sur la direction diagonale où les composantes w et u sont égales. Une meilleure simulation nécessiterait d'avoir une distribution de nœuds non uniforme avec $h_x > h_y$ près de l'axe Y (où u est petit) et avec $h_x < h_y$ près de l'axe X (où v est petit).

Si l'on reprend l'exemple des déformations planes, avec un maillage régulier, dans le cas où $n = 8$ (ici n est le nombre de nœuds dans la direction radiale) et un coefficient de pénalisation important ($\alpha = 10^9$) l'erreur globale est de 8,6%. En utilisant un maillage irrégulier comme montré dans la figure I.12, on peut remarquer que cette erreur décroît jusque 4% et 2,1% avec un rapport de distribution de nœuds h_x/h_y ou h_y/h_x égal à 2 et 4. Ces résultats confirment l'hypothèse précédente.

I.4.2.2 Formulation mixte

Comme dans l'exemple des déformations planes, l'utilisation de la formulation mixte donne de bons résultats. La figure I.13 illustre la convergence de la solution et confirme que l'utilisation de fonction de forme constante pour l'interpolation de la pression donne de meilleurs résultats que d'utiliser les mêmes fonctions de forme pour les champs de vitesse et de pression.

On peut voir que le bénéfice des fonctions de forme constantes est réduit quand la discrétisation augmente. C'est probablement la conséquence de l'utilisation du système

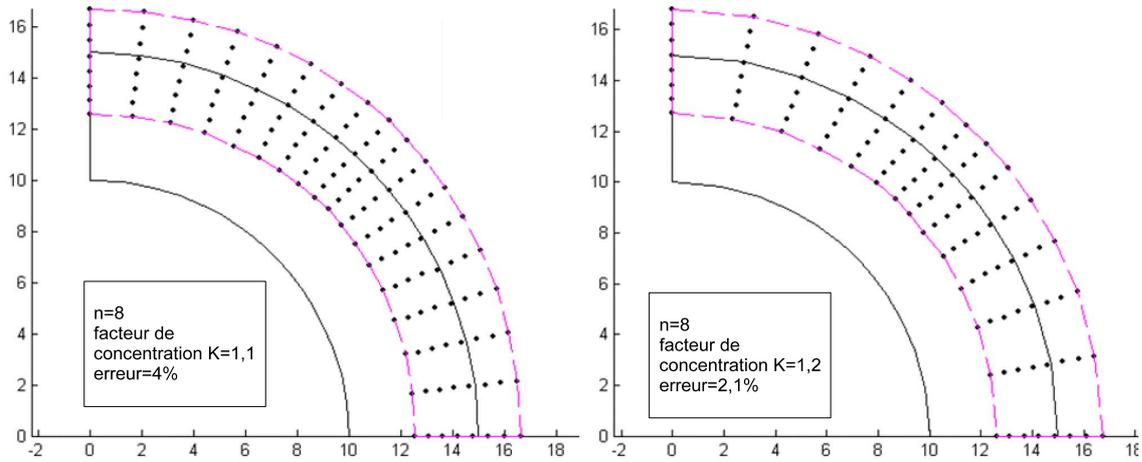


FIGURE I.12 – Utilisation d’une distribution de nœud irrégulière dans la direction circonférentielle.

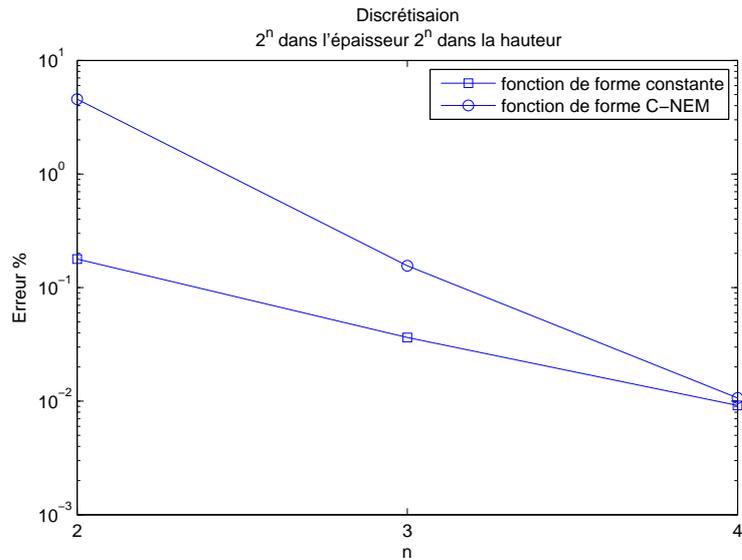


FIGURE I.13 – Formulation mixte : influence de la discrétisation nodale sur l’erreur. L’interpolation de la pression est faite par les fonctions de forme C-NEM et par les fonctions de forme constantes.

de coordonnées cylindriques qui introduit une contribution du rayon dans les termes à intégrer. Une solution plus rigoureuse pour respecter la condition de LBB serait d’utiliser la b-NEM approximation. Cette approximation est présentée dans la partie suivante.

I.5 Approximation b-NEM

Afin de générer une interpolation quadratique pour le champ de vitesse, nous utilisons l'approximation b-NEM comme proposée dans [YVO 06]. Nous rappelons les bases théoriques de cette approximation, puis nous testons le cas du cylindre avec cette approximation.

I.5.1 Bases théoriques

Un k -simplexe (K-S) (sommet, arête, face triangulaire ou tétraèdre) est généré par $K = k + 1$ sommets ($k = 0, 1, 2, 3$ respectivement). La fonction de forme bulle d'une entité χ_j générée par K sommets est calculée ainsi :

$$\phi_j^*(x) = \prod_{p=1}^K \phi_p(x) \quad (\text{I.40})$$

Où $\phi_p(x)$ est la fonction de forme NEM associée aux nœuds n_p calculée au point x .

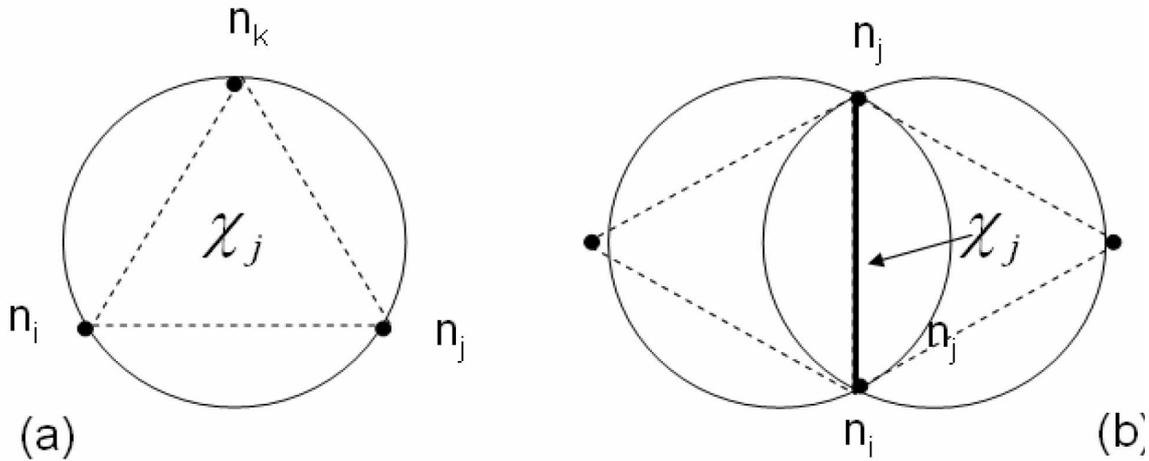


FIGURE I.14 – Supports des fonctions de forme bulle associés au k -simplexe de Delaunay : (a) support pour un triangle de Delaunay ; (b) support pour une arête de Delaunay.

Le support (domaine d'influence) d'un K-S généré par K sommets (nœuds) dans S est l'union des sphères de Delaunay contenant les K nœuds. Il en résulte, en 2D, que :

- si χ_j est un triangle de Delaunay ($\chi \in F(S)$) ($k = 2$), le support de χ_j est composé du cercle circonscrit aux trois nœuds du triangle.
- si χ_j est une arête d'un triangle de Delaunay ($\chi \in E(S)$) ($k = 1$), le support de χ_j est composé de l'union de deux cercles si $\chi_j \notin \Gamma$, ou d'un cercle si $\chi_j \in \Gamma$ (voir figure I.14-b), contenant les deux nœuds générateurs de χ_j .

Nous considérons maintenant le schéma d'approximation suivant :

$$\mathbf{u}^h(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\underline{x}) \mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^m \phi_j^*(\underline{x}) \gamma_j \quad (\text{I.41})$$

Où n est le nombre de voisins naturels au point \underline{x} , $\phi_i(\underline{x})$ est la fonction de forme NEM associée au nœud $n_i \in S$ calculée au point \underline{x} , $\phi_j^*(\underline{x})$ est la fonction de forme bulle définie dans l'équation I.40 associée avec les m K-S influents, et γ_j est un degré de liberté additionnel.

L'enrichissement avec une fonction bulle associée à chaque triangle de Delaunay est similaire du point de vue construction aux éléments MINI [BRE 91], quand on utilise les fonctions de forme NEM à la place des fonctions de forme éléments finis. Bien que le schéma d'approximation défini dans l'équation I.41 soit plus riche que le schéma standard d'approximation NEM et qu'il puisse être utilisé dans la formulation mixte, il peut uniquement reproduire la propriété de consistance linéaire.

I.5.1.1 Interpolation de la vitesse avec la b-NEM

Dans le contexte de la b-NEM, le schéma d'approximation suivant est utilisé pour l'interpolation de la vitesse et le schéma NEM est utilisé pour la pression :

$$\underline{v}_h(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\underline{x}) \underline{v}_i + \sum_{j=1}^m \phi_j^b(\underline{x}) \underline{\gamma}_j, \quad \underline{v}_h^*(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\underline{x}) \underline{v}_i^* + \sum_{j=1}^m \phi_j^b(\underline{x}) \underline{\gamma}_j^* \quad (\text{I.42})$$

$$p_h(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\underline{x}) p_i, \quad p_h^*(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \phi_i(\underline{x}) p_i^* \quad (\text{I.43})$$

Où $\phi_i(\underline{x})$ est la fonction de forme NEM classique relative au nœud n_i calculée au point \underline{x} , $\phi_j^b(\underline{x})$ est la fonction de forme bulle associée au K-S χ_j , $\underline{\gamma}_j$ étant le degré de liberté associé à χ_j , n est le nombre de voisins naturels relatifs au point \underline{x} et m le nombre de K-S influents au point \underline{x} (le nombre de fonctions de forme K-S dont le support contient \underline{x}). Le tenseur des taux de déformation interpolé au point \underline{x} peut s'écrire :

$$\underline{\underline{D}}^h(\underline{x}) = \{\mathbf{B}(\phi); \mathbf{B}(\phi^*)\} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (\text{I.44})$$

Où :

$$\mathbf{B}(\phi) = \begin{bmatrix} \phi_{1,X} & 0 & \phi_{2,X} & 0 & \dots & \phi_{N,X} & 0 \\ 0 & \phi_{1,Y} & 0 & \phi_{2,Y} & \dots & 0 & \phi_{N,Y} \\ \phi_{1,Y} & \phi_{1,X} & \phi_{2,Y} & \phi_{2,X} & \dots & \phi_{N,Y} & \phi_{N,X} \end{bmatrix} \quad (\text{I.45})$$

$$\mathbf{B}(\phi^*) = \begin{bmatrix} \phi_{1,X}^* & 0 & \phi_{2,X}^* & 0 & \dots & \phi_{M,X}^* & 0 \\ 0 & \phi_{1,Y}^* & 0 & \phi_{2,Y}^* & \dots & 0 & \phi_{M,Y}^* \\ \phi_{1,Y}^* & \phi_{1,X}^* & \phi_{2,Y}^* & \phi_{2,X}^* & \dots & \phi_{M,Y}^* & \phi_{M,X}^* \end{bmatrix} \quad (\text{I.46})$$

Où N est le nombre total de nœuds originaux et M est le nombre de fonctions de forme K-S considérées. La divergence de la vitesse interpolée est donnée par :

$$\nabla \cdot \underline{v}^h(\underline{x}) = \{\tilde{\mathbf{B}}(\phi); \tilde{\mathbf{B}}(\phi^*)\} \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (\text{I.47})$$

Où :

$$\tilde{\mathbf{B}}(\phi) = \begin{bmatrix} \phi_{1,X} & \phi_{1,Y} & \phi_{2,X} & \phi_{2,Y} & \dots & \phi_{N,X} & \phi_{N,Y} \end{bmatrix} \quad (\text{I.48})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\phi^*) = \begin{bmatrix} \phi_{1,X}^* & \phi_{1,Y}^* & \phi_{2,X}^* & \phi_{2,Y}^* & \dots & \phi_{M,X}^* & \phi_{M,Y}^* \end{bmatrix} \quad (\text{I.49})$$

I.5.2 Exemple : tube sous pression

Par la suite nous avons réalisé des simulations numériques du tube cylindrique sous pression, nous nous limitons au cas axisymétrique. Nous avons testé la méthode de pénalisation et la formulation mixte. La méthode des b-NEM est comparée avec les résultats

précédents. C'est la seule technique (utilisant l'interpolation NEM) qui satisfasse rigoureusement la condition de LBB.

I.5.2.1 Méthode de pénalisation

La figure I.15 montre les mêmes tendances avec la formulation b-NEM que sans. Le facteur d'aspect de la discrétisation joue une part importante sur la précision de la solution. Si nous comparons les simulations précédentes avec les simulations b-NEM, nous pouvons voir un léger bénéfice dans la "zone stable". En regard de ce petit bénéfice, le coût de calcul des simulations est significativement plus grand en utilisant les b-NEM et l'intérêt n'est plus vraiment évident.

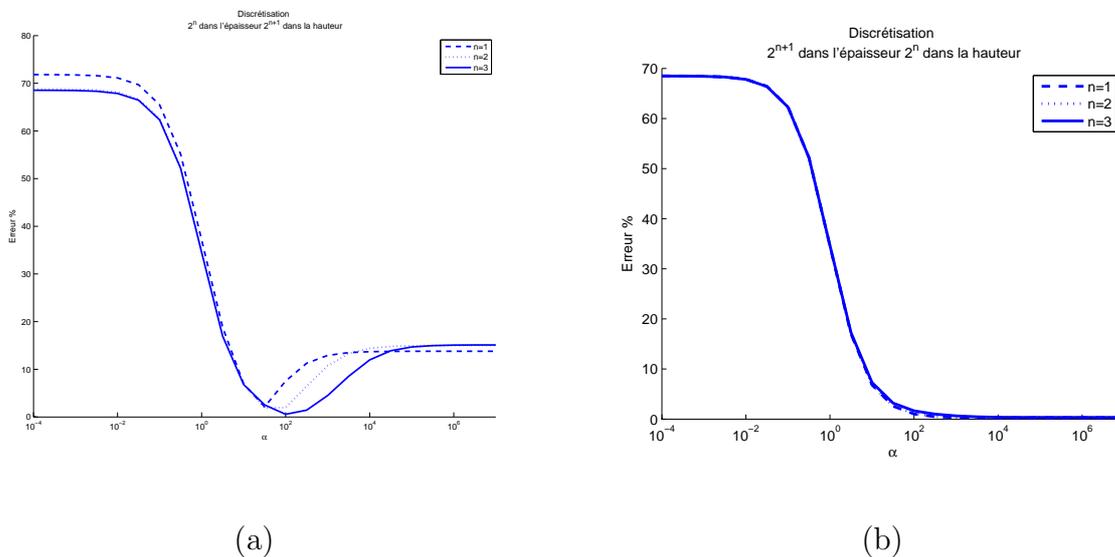


FIGURE I.15 – Influence du coefficient de pénalisation sur la qualité de la solution utilisant les fonctions de forme b-NEM : (a) quand $h_z < h_r$ l'erreur résiduelle reste élevée sur le plateau ; (b) quand $h_z > h_r$ la qualité de la solution numérique est très bonne même avec peu de nœuds.

I.5.2.2 Formulation mixte

La figure I.16 montre le graphique de convergence des simulations pour la formulation mixte avec et sans les fonctions de forme b-NEM. Comme nous avons pu le constater auparavant avec la méthode de pénalisation, l'utilisation de la méthode b-NEM pour la formulation mixte ne montre pas de réels bénéfices.

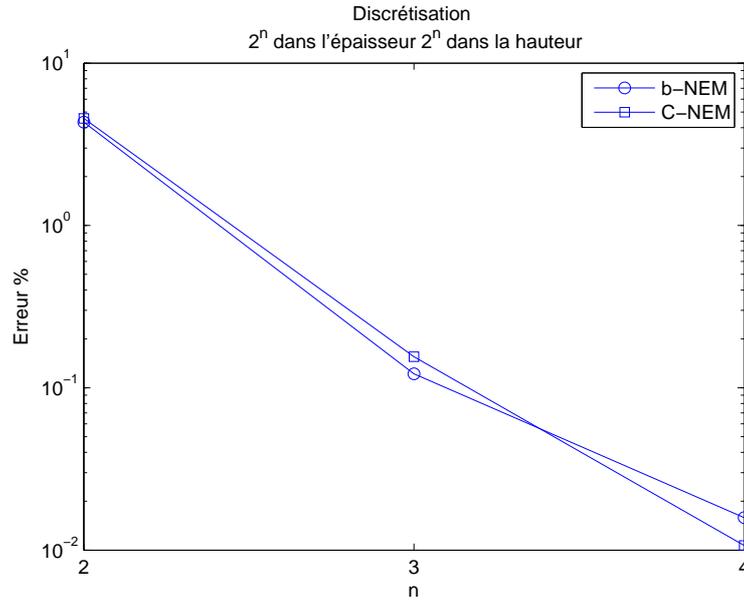


FIGURE I.16 – Influence de la discrétisation sur l'erreur globale : comparaison entre les formulations C-NEM et b-NEM.

I.5.2.3 Conclusion sur la formulation b-NEM

Il apparaît que l'utilisation d'une interpolation quadratique, utilisant l'approximation b-NEM, augmente beaucoup le coût associé au calcul des fonctions de forme pour une faible efficacité.

I.6 Soufflage libre d'une préforme

Au regard des simulations précédentes, il apparaît que la meilleure façon d'imposer la condition d'incompressibilité avec la méthode C-NEM est d'utiliser la formulation mixte avec les fonctions de forme constante pour la pression. Des itérations sont réalisées pour convecter le nuage de nœuds à partir du champ de vitesse calculé afin de simuler l'évolution temporelle du tube sous pression. A chaque pas de temps, la position des nœuds est actualisée en utilisant le schéma d'Euler du premier ordre :

$$\mathbf{M}_{t+\Delta t} = \mathbf{M}_t + \mathbf{v} \cdot \Delta t \quad (\text{I.50})$$

L'incrément de temps Δt influe sur l'évolution du rayon. Pour avoir une évolution temporelle précise de la géométrie, nous devons prendre des "petites" valeurs de Δt .

I.6.1 Évolution temporelle du rayon

Dans l'exemple du tube sous pression, l'évolution du rayon peut être déterminée analytiquement. Si la pression interne P_0 reste constante durant le procédé, on peut résoudre analytiquement l'évolution de la vitesse. Les évolutions des rayons intérieur $R_i(t)$ et extérieur $R_e(t)$ sont données par :

$$R_i(t) = R_{i0} \sqrt{\frac{\frac{R_{e0}^2}{R_{i0}^2} - 1}{\frac{R_{e0}^2}{R_{i0}^2} \exp\left(-\frac{P_0 t}{2\eta}\right) - 1}} \quad (\text{I.51})$$

$$R_e(t) = R_i(t) \frac{R_{e0}}{R_{i0}} \exp\left(-\frac{P_0 t}{2\eta}\right) \quad (\text{I.52})$$

À cause de la diminution de l'épaisseur la surface interne du tube augmente, l'évolution du rayon est exponentielle et on peut voir que l'épaisseur du cylindre (i.e, $R_e - R_i$) décroît jusque 0 dans un temps fini appelé "temps ultime" t_u . L'expression de t_u est donnée par :

$$t_u = \frac{2\eta}{P_0} \ln\left(\frac{R_{e0}}{R_{i0}}\right) \quad (\text{I.53})$$

Pour le schéma numérique, l'incrément de temps est déterminé par l'évolution de la géométrie, c'est à dire par le nœud dont la vitesse est maximum (V_{\max}) et est donnée par :

$$\Delta t = \frac{\Delta R_o}{2^k V_{\max}} \quad \text{avec : } \Delta R_o = 1\text{mm} \quad (\text{I.54})$$

Différentes valeurs de k réduisent ou augmentent l'incrément de temps. La figure I.17 montre l'influence de cette variation. La valeur optimale entre coût de calcul et précision de l'évolution du rayon est obtenue pour $k = 2$.

I.6.2 Simulation du soufflage libre

Pour ce dernier exemple de calcul de soufflage libre de préforme avec un modèle newtonien incompressible, il n'existe pas de solution analytique. Pour illustrer la performance des C-NEM dans le cas de très grandes déformations, nous soufflons une préforme avec une épaisseur initiale uniforme $e = 4$ mm un rayon extérieur $R_e = 14$ mm et une longueur totale de $L = 64$ mm. Le soufflage est réalisé jusqu'à ce que le rayon maximum atteigne $R_{\max} = 75$ mm. A ce stade l'élongation circonférentielle λ_r est d'environ 7,5 pour le rayon

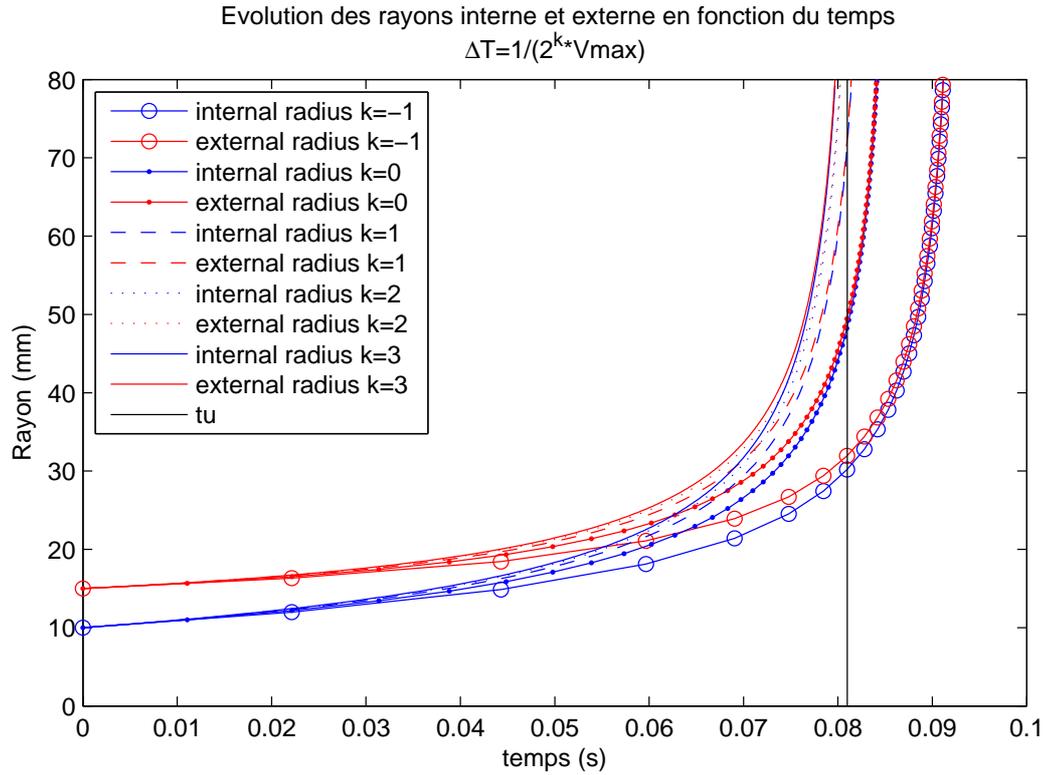


FIGURE I.17 – Évolution du rayon en fonction du temps.

interne et de 5 pour le rayon externe. La valeur moyenne de l'élongation longitudinale λ_z est proche de 2 pour les deux surfaces intérieure et extérieure de la préforme. De grandes déformations biaxiales sont impliquées.

La méthode de pénalisation est utilisée avec $\alpha = 10^3$. Cette valeur du coefficient de pénalisation permet d'éviter les problèmes liés à la distribution de nœuds et permet de rester très proche de la condition d'incompressibilité, la variation du volume du domaine matière est inférieure à 5% durant toute la simulation. La figure I.18 montre la forme de la préforme initiale et la préforme à l'étape finale. Le temps CPU pour cette simulation est de 536 s (Pentium IV 3.4 GHz).

Sur la figure I.19 on peut voir la même simulation effectuée avec la formulation mixte et une fonction de forme constante pour l'interpolation de la pression. Les résultats obtenus sont identiques à ceux obtenus avec la méthode de pénalisation mais ils nécessitent un temps CPU plus important : 899 s contre 536 s pour la méthode de pénalisation, soit 67% plus long.

Un triangle initial, qui représente l'équivalent du maillage élément fini, est tracé sur la distribution de nœuds initiale. Ce triangle est suivi durant l'évolution temporelle et

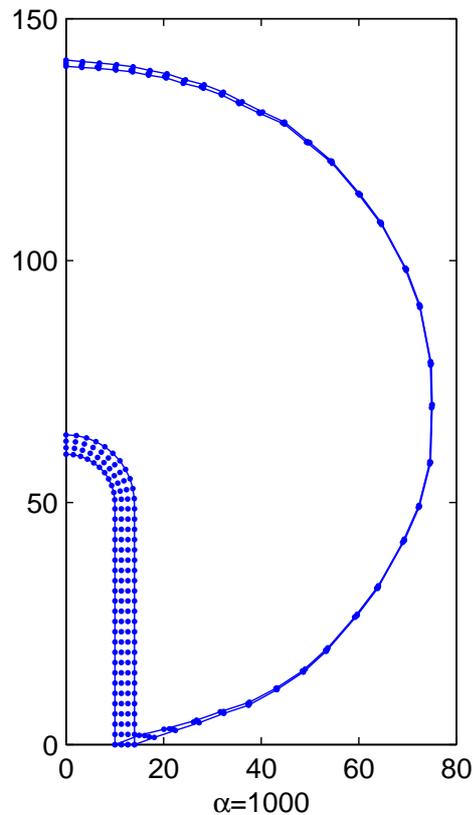


FIGURE I.18 – Distributions initiale et finale de nœuds pour une simulation de soufflage libre avec la méthode de pénalisation.

le zoom final de la figure I.19 montre qu'il a dégénéré en un triangle plat ce qui serait inacceptable dans une simulation élément fini.

I.7 Conclusion partielle

Nous avons fait une revue globale des difficultés numériques et donné quelques réponses sur l'usage de la méthode C-NEM dans le cas de la détermination de l'écoulement de matériaux visqueux incompressibles. Trois formulations ont été présentées : La formulation mixte en vitesse et pression (en utilisant différentes fonctions de forme), la méthode de pénalisation et la formulation du lagrangien augmenté utilisant ou non l'approximation b-NEM pour satisfaire la condition de LBB.

Bien que l'approximation b-NEM satisfasse rigoureusement la condition de LBB, les simulations réalisées montrent une importante augmentation du coût de calcul pour un

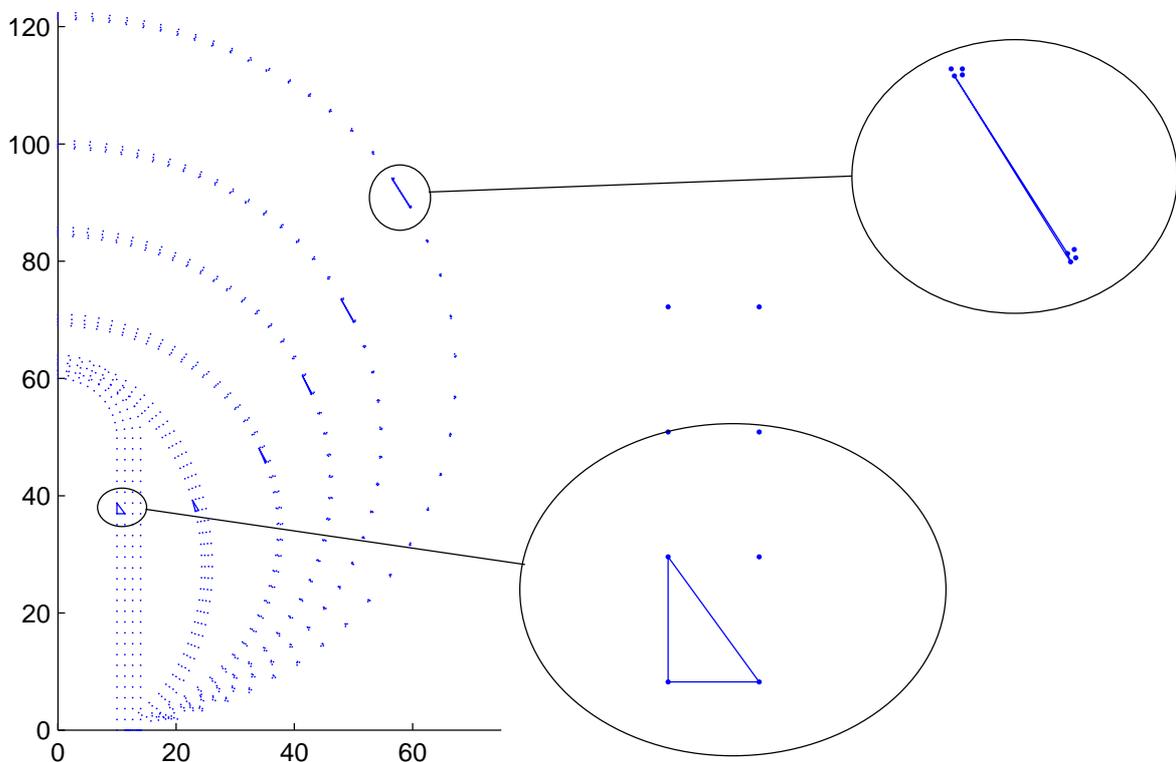


FIGURE I.19 – Évolution de la préforme pendant le soufflage. Un triangle est suivi du début à la fin.

très petit bénéfice sur la solution.

Les deux formulations, mixte et pénalisée, donnent des résultats similaires si nous considérons une fonction de forme constante pour l'interpolation de la pression ou un coefficient de pénalisation proche de 10^3 pour éviter les erreurs importantes de la "zone stable" quand le facteur d'aspect de la distribution de nœud n'est pas optimum.

Nous avons montré, sur un exemple représentatif du procédé de soufflage, que la méthode de pénalisation était stable avec la méthode C-NEM pour une petite plage de valeurs du coefficient de pénalisation α , typiquement pour $10 - 10^3$. Dans cette plage de valeur le calcul n'est pas sensible à la distribution de nœuds, mais il faut vérifier la condition d'incompressibilité. Un moyen simple de vérifier le respect de la condition d'incompressibilité est de contrôler le volume du domaine matière à chaque étape et de comparer avec le volume initial. Pour les grande valeurs de α , la méthode de pénalisation est très sensible au facteur d'aspect de la distribution de nœuds, spécialement dans les régions où une des composantes de la vitesse est nulle ou très petite devant les autres.

Nous avons montré que la méthode C-NEM peut donner de bonnes simulations avec de très grandes déformations sans les difficultés dues à de fréquents remaillages quand on utilise la méthode des éléments finis. Dans la suite de nos travaux, nous avons utilisé cette méthode pour simuler le procédé d'étirage-soufflage en considérant des modèles de comportement plus réalistes et en prenant en compte la tige d'élongation, le moule et les échanges thermiques.

La formulation mixte est donc à utiliser pour des simulations où le nombre de nœuds n'est pas trop important et où le nombre d'itération est réduit. Dans le cas contraire, où la simulation demande un grand nombre d'itération et un grand nombre de ddl il est préférable d'utiliser la méthode de pénalisation ou pseudo-pénalisation tout en calculant le volume du domaine matière pour vérifier la condition d'incompressibilité.

Chapitre II

Identification du comportement par un modèle viscoplastique et application à l'optimisation des procédés

II.1 Introduction

Nous nous intéressons ici à l'optimisation du procédé d'étirage-soufflage. Certains auteurs ([MEN 07, THI 07, SCH 98, MCE 98, YAN 04a, YAN 04b]) ont déjà réalisé des simulations de soufflage dans le but de connaître l'épaisseur des bouteilles, en utilisant la méthode des éléments finis. Mais la taille des bouteilles soufflées reste petite (moins de 0,5 L) ou bien le modèle n'est pas représentatif de l'effet de durcissement dû à l'étirage. Pour reproduire cette effet les modèles utilisés pour les simulations sont souvent basés sur le modèle de Buckley [BUC 95] ou le modèle de Boyce [BOY 00]. Ces modèles représentent très bien le comportement du PET pour différents paramètres de température ou de vitesse de sollicitation. Sur la figure II.1, on peut voir l'effet durcissant dû à l'augmentation de la vitesse ou à la diminution de la température. Mais leur comportement global reste isotrope. De plus l'effet de vitesse est souvent pris en compte artificiellement en changeant les paramètres du modèle. Hors on constate que dans le cas de chargement complexe le PET devient anisotrope [MAR 03].

Dans cette partie nous proposons une identification des propriétés mécaniques du PET par un modèle de comportement visqueux non linéaire orthotrope. Ce modèle permet de prendre en compte la biaxialité des déformations pendant le procédé d'étirage-soufflage. Ces travaux se basent sur les travaux effectués par Chevalier *et al.* [CHE 06] sur la modélisation viscoplastique du PET en grande transformation [SID 82]. Ils permettent de simuler de manière réaliste le comportement du matériau lors du soufflage et d'envisager une optimisation du procédé.

Afin de lier le modèle proposé par Chevalier *et al.* [CHE 06] à la microstructure, nous avons réalisé des essais de traction uniaxiale interrompus. Le but de cette campagne d'essais est de connaître l'état de la microstructure pour un état de déformation donnée. Les essais ont été réalisés à différentes vitesses de sollicitation.

Le modèle présenté dans [CHE 06] ne prend pas en compte explicitement l'état de la microstructure. En effet, le durcissement obtenu est fonction de la déformation et non de variables telles que le taux de cristallinité ou l'orientation. A partir des essais nouvellement réalisés, nous allons modéliser une dépendance explicite du durcissement par rapport à la microstructure. Lors de simulations numériques des procédés de fabrication, tel que l'étirage-soufflage des bouteilles en PET, un modèle macroscopique couplé à l'évolution de la microstructure permet, à l'aide des méthodes d'homogénéisation, de déterminer les

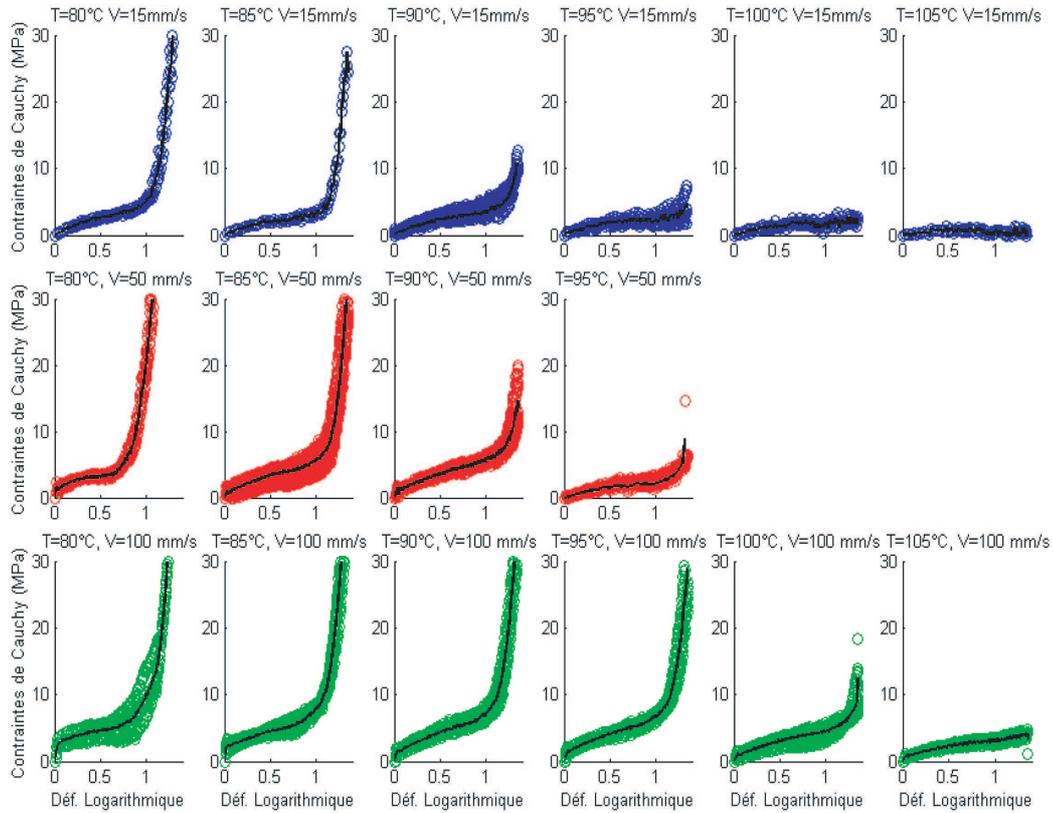


FIGURE II.1 – Essai de traction uniaxiale sur des éprouvettes en PET
[CHE 06].

propriétés élastiques de la bouteille finale. Ce point fait l’objet de la troisième partie. Des essais de soufflage libre ont été réalisés afin de validé les paramètres identifiés pour l’application du modèle à la simulation du procédé d’étirage-soufflage.

II.2 Essais de traction interrompus

Les essais de traction ont été réalisés sur une machine hydraulique MTS équipée d’un four régulé en température. Le PET utilisé est le *PET Arnite D00301* fourni par DSM. L’interruption de l’essai se fait par un jet direct d’azote liquide (Fig.II.2).

II.2.1 Protocole expérimental

Les éprouvettes sont tout d’abord injectées (voir tableau II.1) avec une section de 4 mm par 10 mm après un séchage en étuve. Elles sont ensuite usinées afin d’avoir une épais-



FIGURE II.2 – Machine de traction MTS avec four et bombone d'azote liquide.

seur finale de 1 mm. La longueur utile des éprouvettes est de 30 mm. L'usinage permet d'enlever la partie de la matière qui était en contact avec le moule, celle-ci ayant subi un fort taux de cisaillement. De plus la faible épaisseur des éprouvettes permet un chauffage rapide du matériau. La petite taille des éprouvettes permet d'obtenir des elongations qui atteignent la valeur de 4 en fin d'essai.

Après l'étape de préparation, les éprouvettes sont quasiment amorphes, le taux de cristallinité est inférieur à 5% (mesure par densitométrie). Les essais sont réalisés à l'intérieur d'un four clos, il est impossible de prendre la mesure de la déformation pendant l'essai. Afin de connaître la déformation réelle subie par le matériau, nous avons réalisé un marquage des éprouvettes. Un point (entre 1 et 2 mm de diamètre) est dessiné au centre de l'éprouvette. Il est photographié avant et après l'essai (Fig.II.3), la comparaison des

Température d'injection	290°C
Température de régulation du moule	15°C
Temps d'injection	2s
Pression de maintien	40 MPa pendant 10s

TABLE II.1 – Conditions opératoires de l'injection des éprouvettes PET

deux photos nous donne la déformation locale subie par le matériau.

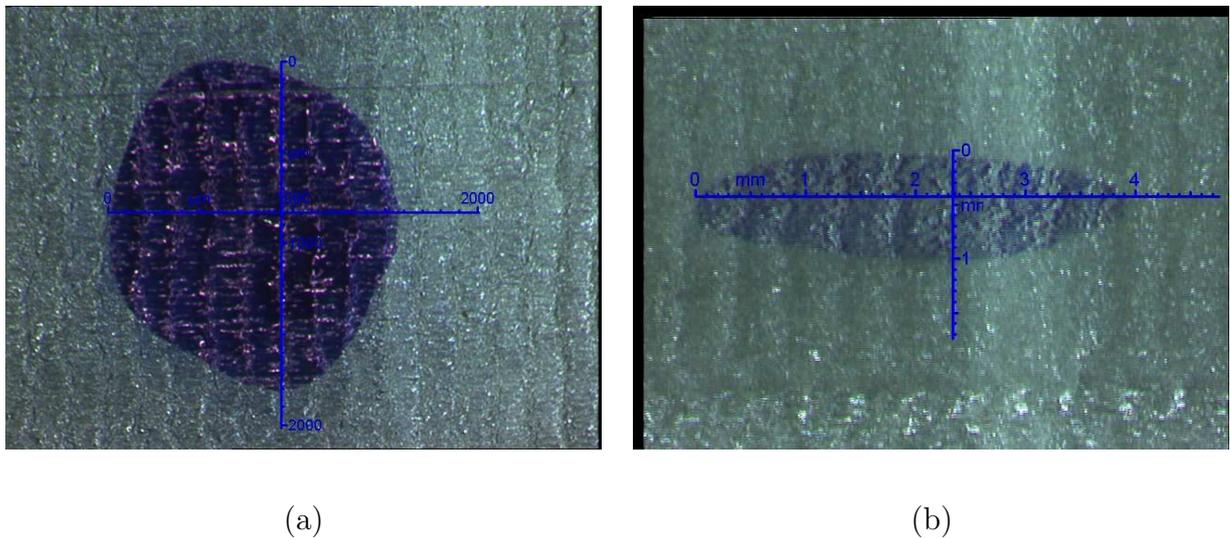


FIGURE II.3 – Marquage d'une éprouvette (a) avant et (b) après déformation.

L'essai commence par la mise en place de l'éprouvette dans la machine. Elle est ensuite chauffée pendant 8 minutes (avec une consigne de chauffe de 90°C). Étant donné la faible épaisseur des éprouvettes ce temps de chauffage permet d'avoir une température uniforme dans l'éprouvette. À la fin de la chauffe, la traction est effectuée à vitesse de traverse constante. Nous avons testé trois vitesses différentes 10 mm.s⁻¹, 33 mm.s⁻¹ et 66 mm.s⁻¹, soit des vitesses de déformation initiales de 0,33 s⁻¹, 1,11 s⁻¹ et 2,22 s⁻¹. Les essais sont interrompus à différentes valeurs d'élongation. Lorsque la traverse est stoppée, l'éprouvette est maintenue en place et refroidie par un jet d'azote liquide, ainsi la microstructure se fige instantanément. La mesure de cristallinité se fait par densitométrie [CHE 99]. Dans notre

étude, nous incluons dans le taux de cristallinité la part de PET effectivement cristallisé mais aussi la part densifiée et orientée du PET (mésophase). Dans la suite, nous supposons le PET comme biphasique : phase amorphe et phase cristalline. Seule la partie centrale de l'éprouvette est utilisée pour la mesure de densité. Le taux de cristallinité se calcule de la façon suivante :

$$\rho = \rho_{eau} \frac{P_1}{P_1 - P_2} \quad (\text{II.1})$$

$$X_c = 100 \frac{\rho - \rho_a}{\rho_c - \rho_a} \quad (\text{II.2})$$

ρ , ρ_a , ρ_c et ρ_{eau} sont respectivement la densité de l'éprouvette, du PET amorphe, du PET cristallin et de l'eau distillée. P_1 est le résultat de la pesée de l'éprouvette et P_2 est le résultat de la pesée de l'éprouvette immergée dans l'eau.

Après avoir effectué les mesures de densité, nous testons le module d'Young des éprouvettes à température ambiante (24°C) par vidéo-extensométrie. Les éprouvettes sont marquées par quatre taches comme décrit par la figure II.4. À l'aide d'une caméra CCD, on suit le déplacement des taches pendant l'essai de traction (image en niveaux de gris).

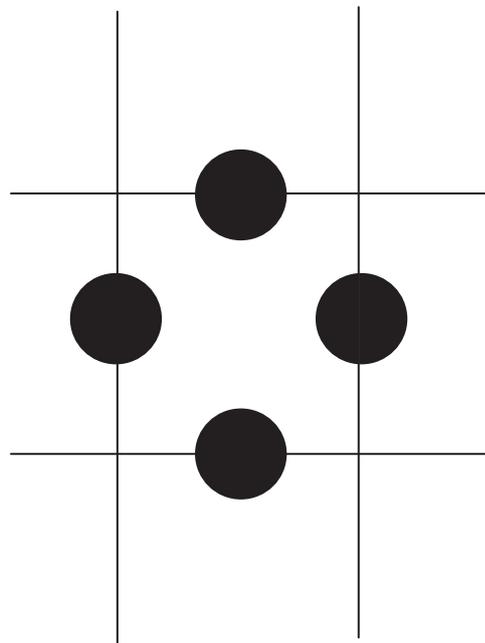


FIGURE II.4 – Marquage des éprouvettes pour la vidéo-extensométrie.

Un logiciel de traitement suit l'image seuillée (noir et blanc) donnée par la caméra et calcule la position des barycentres des quatre taches. On peut alors déterminer la distance

entre les taches dans le sens longitudinal et transverse et ainsi obtenir la déformation logarithmique dans les deux sens. Pour le calcul du module d'Young, nous n'utilisons que la déformation dans le sens longitudinal. Pour mesurer le module d'Young, nous calculons la pente à l'origine sur la courbe contrainte-déformation en supposant que la courbe est une portion de droite pour les valeurs de déformation comprises entre 0 et 4.10^{-3} .

II.2.2 Résultats expérimentaux

Sur la figure II.6 sont reportées les courbes de la contrainte de Cauchy en fonction de la déformation logarithmique ainsi que le taux de cristallinité atteint en fonction de la déformation finale (déformation obtenue au moment de l'interruption).

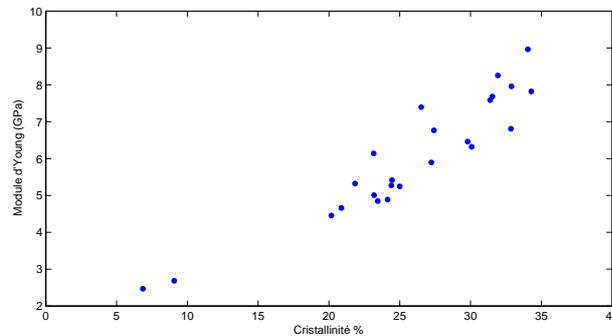
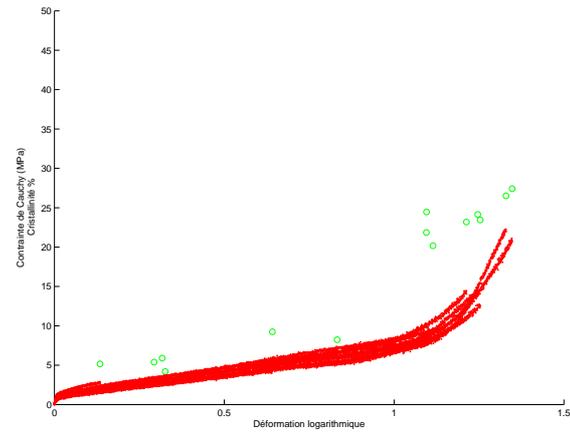


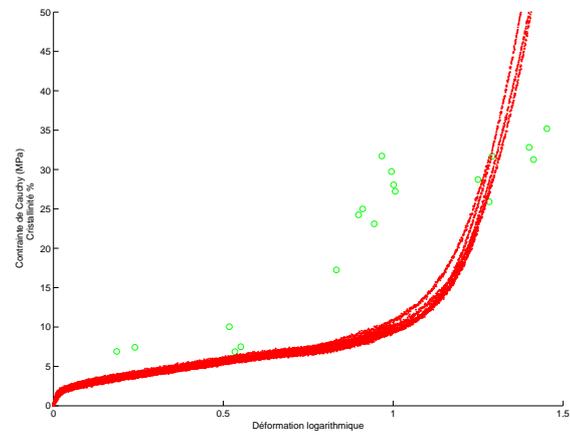
FIGURE II.5 – Module d'Young en fonction du taux de cristallinité.

Nous constatons la bonne répétitivité de la manipulation. Les courbes de contrainte sont conformes aux résultats obtenus par Chevalier *et al.* [CHE 06]. Les niveaux de contrainte atteints pour les vitesses de 33 mm.s^{-1} et 66 mm.s^{-1} sont très proches mais il y a une nette diminution de ce niveau pour la vitesse de 10 mm.s^{-1} . Il apparaît que le taux de cristallinité ne dépend presque pas de la vitesse de traction, ce qui est en concordance avec le modèle de cristallisation induite proposé par Doufas *et al.* [DOU 00]. Les nuages de points obtenus pour la cristallinité sont similaires aux évolutions présentées dans [AHZ 03, GOR 01]. À partir de ces résultats expérimentaux et de ceux donnés dans [CHE 06], nous proposons un modèle visqueux non-linéaire avec cristallisation induite.

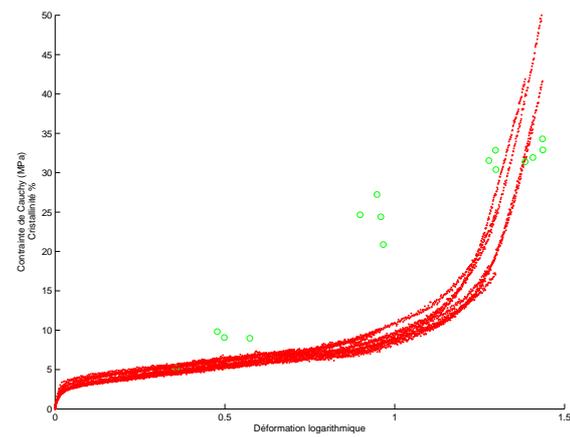
Les résultats des mesures du module d'Young sont donnés sur la figure II.5. Le module d'Young est tracé en fonction de la cristallinité. On remarque une forte augmentation du module par rapport à l'état amorphe (environ 2,6 GPa). En comparant ces résultats avec les résultats de Bédoui [BED 05] obtenus dans le cadre de la cristallisation thermique (tableau III.1), on voit nettement l'effet de l'orientation sur la valeur du module d'Young :



(a)



(b)



(c)

FIGURE II.6 – Essais de traction uniaxiale pour (a) $V=10 \text{ mm}^{-1}$, (b) $V=33 \text{ mm}^{-1}$, (c) $V=66 \text{ mm}^{-1}$.

pour environ 30% de cristallinité, le module est de 3 GPa pour du PET isotrope et de 8 GPa pour du PET orienté. Le module d'Young dépend du taux de cristallinité mais aussi très fortement de l'orientation cristalline. Pour les éprouvettes fortement étirées (élongation supérieure à 4) le module d'Young dans la direction de la traction est multiplié par 3.

II.3 Modélisation viscoplastique

Le modèle proposé dans [CHE 06] est modifié pour prendre en compte l'état de la microstructure du PET : son orientation et le taux de cristallinité. L'évolution du taux de cristallinité est donnée par l'équation II.4 [AHZ 03, DOU 00].

$$X_c = X_c^\infty y \quad (\text{II.3})$$

$$\frac{dy}{dt} = A(T) \dot{\epsilon}_{eq} [-\ln(1 - (y - y_0))]^{\frac{n-1}{n}} (1 - y) \quad (\text{II.4})$$

$$\dot{\epsilon}_{eq} = \max_{i=1,2,3}(\dot{\epsilon}_i) \quad (\text{II.5})$$

Les $\dot{\epsilon}_i$ sont les valeurs principales du tenseur des taux de déformation $\underline{\underline{D}}$, la condition d'incompressibilité donne $\text{tr}(\underline{\underline{D}}) = 0$ sur Ω . L'équation II.4 est enrichie du terme y_0 par rapport à l'expression donnée dans [AHZ 03]. y_0 est la cristallinité initiale. Cette cristallinité est initialement isotrope. Dans le cas du procédé de soufflage des bouteilles en PET, y_0 est la cristallinité thermique résiduelle qui vient de l'étape d'injection de la préforme. X_c^∞ est le taux ultime de cristallinité. $A(T)$ est un paramètre scalaire qui dépend de la température. n est l'exposant d'Avrami. Le nouveau modèle constitutif avec cristallisation induite est décrit par les équations II.6-II.11 :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\underline{\underline{\eta}}\underline{\underline{D}} - p\underline{\underline{I}} \quad (\text{II.6})$$

$$\left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{ijkl} = \left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{jikl} = \left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{ijlk} = \left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{jilk} = \left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{klij} \quad (\text{II.7})$$

$$\left(\underline{\underline{\eta}}\right)_{ijkl} = \begin{cases} K_i \dot{\underline{\underline{\gamma}}}^{m-1} \delta_{ik} \delta_{jl} & \text{si } i = j \\ K_\alpha \dot{\underline{\underline{\gamma}}}^{m-1} \delta_{ik} \delta_{jl} & \text{si } i \neq j \text{ pour } \alpha \neq i \neq j \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

$$K_i = e^{(\beta(\varepsilon_i - \underline{\underline{\varepsilon}}))} K_0(\text{T}) e^{\left(a \frac{1-y_0}{1-y} + b \left(\frac{y-y_0}{1-y_0}\right)^p + c \frac{y-y_0}{1-y_0}\right)} \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{II.9})$$

$$\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = (2\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{D}})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.10})$$

$$0 \leq \beta \quad (\text{II.11})$$

Où $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy. $\underline{\underline{\eta}}$ est un tenseur d'ordre 4 symétrique, il est écrit dans la base des vecteurs principaux du tenseur $\underline{\underline{\varepsilon}}$, toutes ses composantes sont nulles sauf pour les termes diagonaux. L'équation II.8 permet de décrire un matériau orthotrope incompressible. L'effet de durcissement structural est donné par K_i , cette variable varie de façon exponentielle avec la cristallinité y , $K_0(\text{T})$ est un coefficient qui dépend de la température. Les $\underline{\underline{\varepsilon}}_i$ ($i = 1, 2, 3$) sont les valeurs principales du tenseur Eulérien des déformations logarithmiques ($\underline{\underline{\varepsilon}} = 1/2 \log(\underline{\underline{B}})$ et $\underline{\underline{B}}$ est le tenseur de Cauchy-Green gauche). β est le paramètre d'anisotropie, pour $\beta = 0$ nous avons un comportement isotrope, son identification se fera à l'aide d'essai biaxiaux. p est le paramètre qui détermine la non linéarité de la viscosité en fonction du taux de cristallinité. Les coefficients sont identifiés avec la méthode utilisée par Chevalier *et al.* [CHE 06]. Mais dans notre cas, nous avons $K = f(y)$ et non plus $K = f(\varepsilon)$. Les valeurs des paramètres a , b , c et p sont respectivement 0,1435, 1,8503, 0,5702 et 0,2. La valeur des différents coefficients dépend du type de PET utilisé, il est nécessaire de faire un calage des paramètres pour chaque grade de PET.

II.3.1 Essai de traction 1D

Nous avons réalisé des simulations 1D de l'essai de traction, les résultats sont reportés sur la figure II.8. Le modèle proposé reproduit les résultats expérimentaux donnés dans [CHE 06] pour des vitesses de déformations initiales de 0.33 s^{-1} , 1.11 s^{-1} et 2.22 s^{-1} et des températures allant de 80°C à 105°C .

Lors de simulations de procédés de fabrication comme le soufflage, le modèle proposé

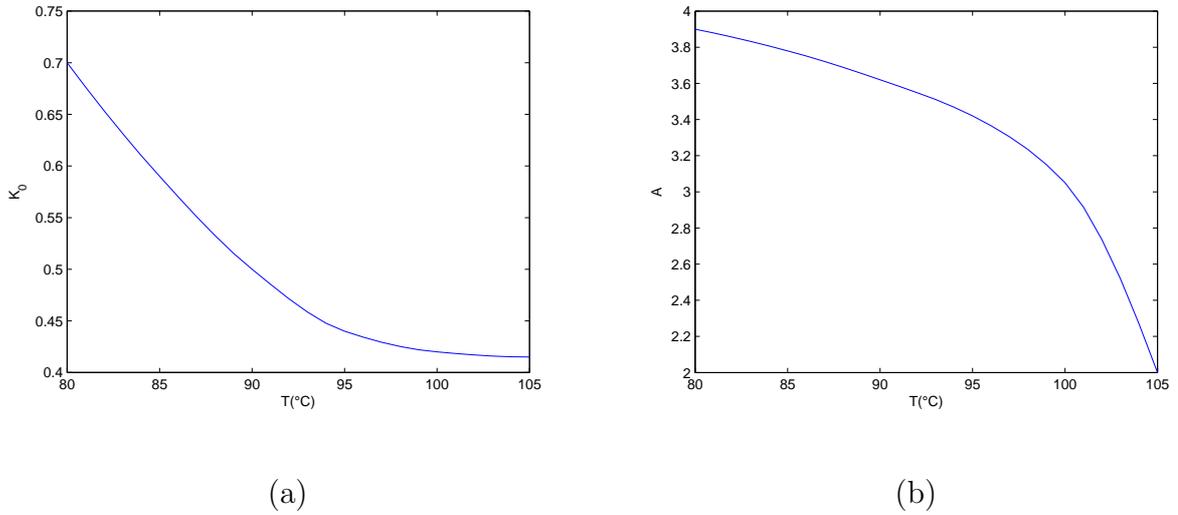


FIGURE II.7 – Coefficient (a) K_0 et (b) A en fonction de la température.

permet de connaître l'état de la microstructure (orientation et taux de cristallinité) à tout instant, plus particulièrement à la fin du soufflage. Cette connaissance de la microstructure va nous permettre, à l'aide des outils de la micromécanique, de prédire le comportement élastique de la bouteille à température ambiante. La modélisation du comportement mécanique du PET par un modèle viscoplastique est suffisante pour le procédé d'étirage soufflage. Effectivement nous avons un chargement monotone du matériau. Mais si l'on souhaite simuler, par exemple, des essais cycliques la modélisation visqueuse n'est plus adaptée. La prise en compte de l'élasticité est nécessaire pour reproduire le retour constaté lors d'un arrêt brutal de soufflage. Dans ce cas un modèle viscoélastique est plus adapté. Nous proposons une version viscoélastique dans les perspectives à ce travail.

Dans les chapitres précédents a été présentée, dans un cadre théorique, la méthode numérique C-NEM, avec laquelle nous sommes capables de réaliser des simulations en grandes transformations. Nous venons de proposer une modélisation du comportement mécanique du PET à des températures légèrement supérieures à T_g . Ce travail permet d'aborder de façon propre les aspects, plus applicatifs, qui vont suivre. Tout d'abord la méthode des C-NEM est utilisée pour valider les modélisations proposées, en simulant les essais de traction. Puis nous proposons des piste pour l'optimisation du procédé d'étirage-soufflage.

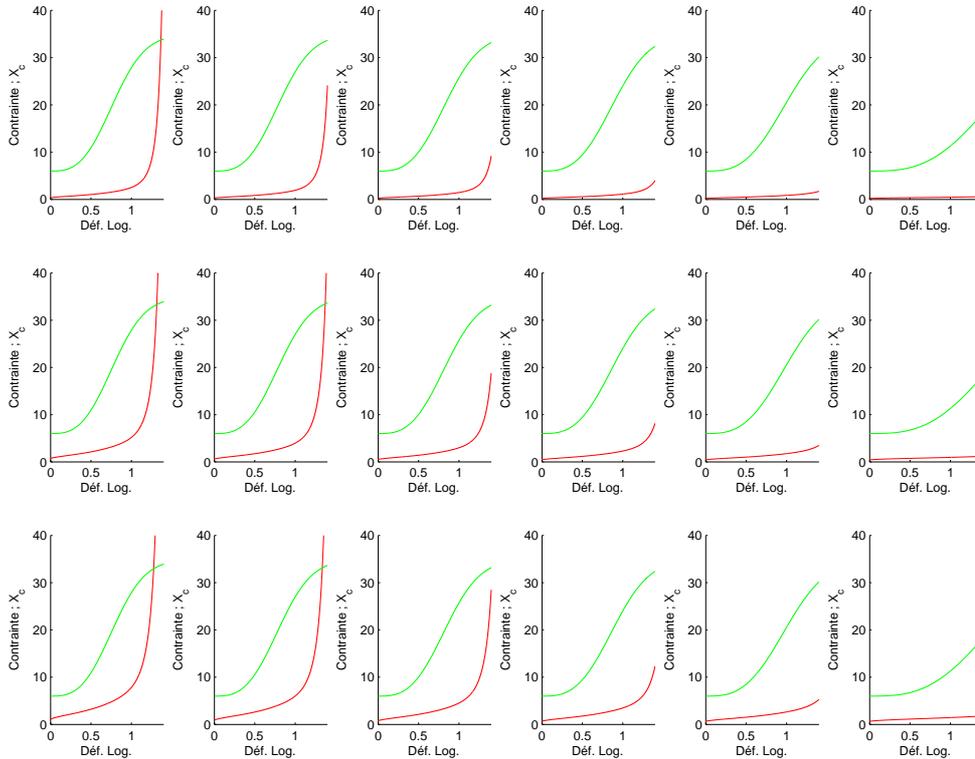


FIGURE II.8 – Simulations de l'essai de traction uniaxiale avec le modèle visqueux.

II.4 Simulation des essais de traction

Dans ce paragraphe nous faisons une validation de la méthode d'identification du modèle en comparant les résultats donnés par les relations quasi analytiques (où l'on suppose que les états de déformation et de contrainte sont homogènes dans l'éprouvette) avec les simulations numériques 2D (avec hypothèse des contraintes planes) des essais de traction avec prise en compte de conditions aux limites plus réalistes (éprouvettes bloquées dans les mors).

II.4.1 Validation du modèle

II.4.1.1 Formulation du problème

Compte tenu des très fortes viscosités mises en jeu, il est légitime de négliger les effets d'inertie et les forces de pesanteur. Le problème à résoudre, dans le cas général

tridimensionnel, est donc le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \\ \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{F}}^d \quad \text{sur } \partial\Omega_F \\ \underline{\underline{v}} = \underline{\underline{v}}^d \quad \text{sur } \partial\Omega_V \\ \operatorname{div}(\underline{\underline{v}}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \end{array} \right. \quad (\text{II.12})$$

La forme faible associée à l'équation II.12 est donnée par le problème suivant : trouver $\underline{\underline{v}}$ cinématiquement admissible et $\underline{\underline{v}} \in H^1(\Omega)$, $p \in L_2(\Omega)$, tel que pour tout $\underline{\underline{v}}^* \in H_0^1(\Omega)$, tout $p^* \in L_2(\Omega)$,

$$\left\{ \begin{array}{l} - \int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}^* dV + \int_{\partial\Omega_F} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{v}}^* dS = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{\underline{v}}) dV = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.13})$$

$$\underline{\underline{D}}^* = \frac{1}{2} (\operatorname{grad}(\underline{\underline{v}}^*) + \operatorname{grad}(\underline{\underline{v}}^*)^T) \quad (\text{II.14})$$

Le comportement est modélisé par le modèle visqueux (Eq.II.6-II.11) présenté précédemment. Dans un premier temps nous prenons le paramètre $\beta = 0$, car il a très peu d'influence en traction simple, nous avons donc un modèle isotrope. Nous verrons l'influence de β sur le modèle lors de sollicitations biaxiales comme le procédé d'étirage-soufflage. Ce qui donne le problème en vitesse et en pression suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} - \int_{\Omega} 2\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* dV + \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\underline{\underline{v}}^*) dV + \int_{\partial\Omega_F} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{v}}^* dS = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{\underline{v}}) dV = 0 \end{array} \right. \quad (\text{II.15})$$

$$(\text{II.16})$$

Dans le cas des essais de traction uniaxiaux, nous utilisons l'hypothèse des contraintes planes, ce qui nous ramène à un problème à deux dimensions.

II.4.1.2 Simplification du problème, cas des contraintes planes

Le problème est bidimensionnel dans le plan (e_1, e_2) (ce qui suppose l'uniformité des variables dans l'épaisseur). La condition d'incompressibilité est directement prise en compte dans la loi de comportement avec l'hypothèse des contraintes planes (CP). Ceci nous permet de supprimer la variable "p" du problème. Sous ces hypothèses, les tenseurs $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{D}}$ peuvent être exprimés sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{II.17})$$

L'hypothèse d'incompressibilité entraîne :

$$D_{33} = -(D_{11} + D_{22}) \quad (\text{II.18})$$

L'hypothèse des contraintes planes nous ramène au problème en vitesse suivant :

$$- \int_{\Omega} 2\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* dV + \int_{\partial\Omega_F} \underline{F} \cdot \underline{v}^* dS = 0 \quad (\text{II.19})$$

Ou encore :

$$- \int_S \int_Z 2\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* dZ dS + \int_{\partial S_F} \int_Z \underline{F} \cdot \underline{v}^* dZ dl = 0 \quad (\text{II.20})$$

Et entraîne avec l'uniformité supposée des variables dans l'épaisseur :

$$- \int_S 2e\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* dS + \int_{\partial S_F} e\underline{F} \cdot \underline{v}^* dl = 0 \quad (\text{II.21})$$

Où la variable "e" représente l'épaisseur au point de coordonnées (\underline{x}) . La condition d'incompressibilité est automatiquement vérifiée. La déformation n'est pas la même au voisinage des mors que dans la zone utile de l'éprouvette : l'épaisseur n'est donc pas uniforme durant l'essai. Néanmoins, nous considérons la variation comme négligeable et compatible avec l'hypothèse de CP. Nous négligeons donc l'apparition des contraintes de cisaillement, dans les plans (e_1, e_3) et (e_2, e_3) dues à l'inclinaison de la normale à la surface.

II.4.1.3 Discrétisation des variables

Le tenseur des taux de déformation $\underline{\underline{D}}$ peut s'écrire sous forme de vecteur colonne comme suit :

$$\underline{\underline{\tilde{D}}} = \begin{bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ D_{33} \\ \sqrt{2}D_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ -(D_{11} + D_{22}) \\ \sqrt{2}D_{12} \end{bmatrix} \quad (\text{II.22})$$

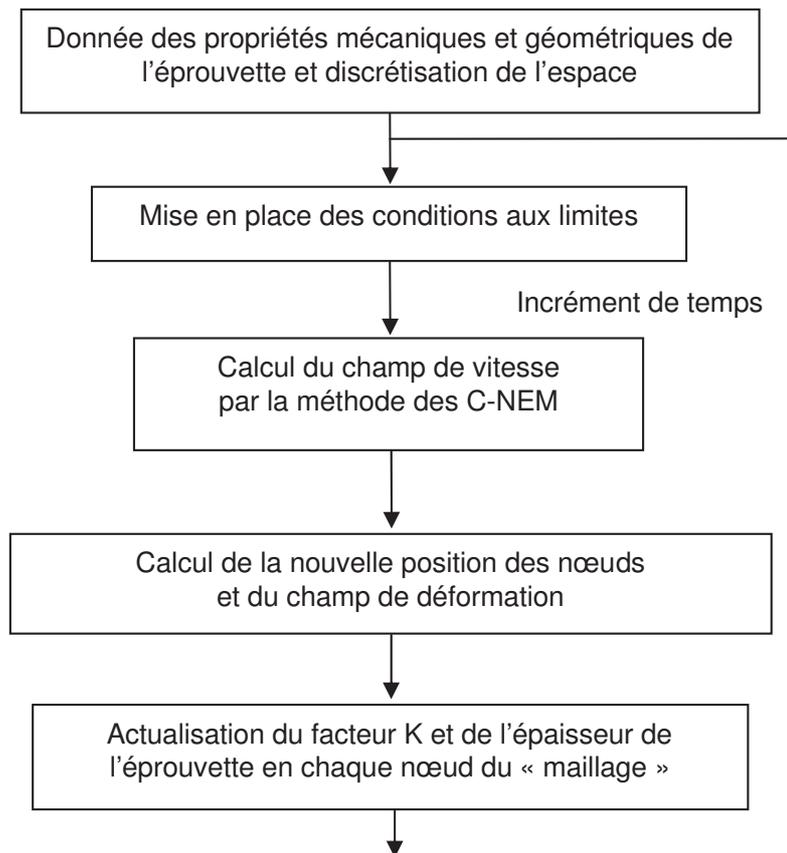


FIGURE II.9 – Simulation d'un essai de traction sur un fluide visqueux.

Les inconnues nodales sont les composantes u et v de la vitesse (respectivement suivant les axes \underline{e}_1 et \underline{e}_2). Elles sont regroupées dans le vecteur colonne "v". La fonction de forme relative au nœud i est notée $\phi_i(\underline{x})$. Pour nous permettre de mettre à jour les facteurs

K_i ($i = 1, 2, 3$) et l'épaisseur au fur et à mesure des itérations, on les considère comme des données nodales stockées dans les vecteurs " \mathbf{k}_i " et " \mathbf{e} ". L'algorithme de calcul de la figure II.9 décrit la méthode utilisée pour résoudre le problème en grande transformation. Pour résoudre le problème, nous considérons une discrétisation à n nœuds, numérotés de 1 à n . Le vecteur des inconnues nodales \mathbf{v} , l'épaisseur de l'éprouvette \mathbf{e} et les facteurs \mathbf{k}_i aux nœuds sont donnés ci-dessous.

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ \vdots \\ u_n \\ v_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{k}_i = \begin{bmatrix} k_1^i \\ \vdots \\ k_n^i \end{bmatrix} \quad (\text{II.23})$$

Les variables, en un point quelconque \underline{x} , sont discrétisées de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \underline{v}(\underline{x}) &= \mathbf{N}(\underline{x}) \cdot \mathbf{v} \\ K_i(\underline{x}) &= \mathbf{M}(\underline{x}) \cdot \mathbf{k}_i \\ e(\underline{x}) &= \mathbf{M}(\underline{x}) \cdot \mathbf{e} \\ \underline{\tilde{D}}(\underline{x}) &= \mathbf{B}(\underline{x}) \cdot \mathbf{v} \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

Avec :

$$\mathbf{N}(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_1(\underline{x}) & 0 & \cdots & \phi_n(\underline{x}) & 0 \\ 0 & \phi_1(\underline{x}) & \cdots & 0 & \phi_n(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.25})$$

$$\mathbf{B}(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_{1,x}(\underline{x}) & 0 & \cdots & \phi_{n,x}(\underline{x}) & 0 \\ 0 & \phi_{1,y}(\underline{x}) & \cdots & 0 & \phi_{n,y}(\underline{x}) \\ -\phi_{1,x}(\underline{x}) & -\phi_{1,y}(\underline{x}) & \cdots & -\phi_{n,x}(\underline{x}) & -\phi_{n,y}(\underline{x}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{1,y}(\underline{x}) & \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{1,x}(\underline{x}) & \cdots & \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{n,y}(\underline{x}) & \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{n,x}(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.26})$$

$$\mathbf{M}(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_1(\underline{x}) & \cdots & \phi_n(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.27})$$

Où les $\phi_i(\underline{x})$ sont nulles sauf pour les nœuds qui sont voisins naturels du point (\underline{x}) . Une fois le problème discrétisé, nous utilisons la méthode de Newton-Raphson pour trouver la solution du problème non linéaire.

II.4.1.4 Intégration numérique

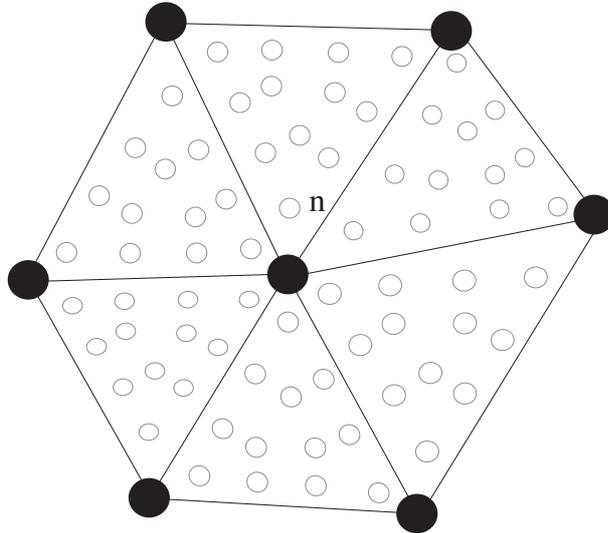


FIGURE II.10 – Points d'intégration servant au calcul des dérivées des fonctions de forme au nœud n .

L'intégration est réalisée en utilisant le découpage de l'espace fait par la triangulation de Delaunay. Nous avons utilisé la méthode de Gauss avec n_g points d'intégration par

triangle de Delaunay. Les points de Gauss servent également dans le calcul de l'épaisseur et du facteur de durcissement K à chaque nœud. Les fonctions de forme C-NEM n'étant pas dérivables aux nœuds (Fig.??), nous n'avons pas un accès direct au gradient de vitesse aux nœuds. Pour résoudre ce problème, nous avons réalisé une moyenne des dérivées des fonctions de forme sur les points de Gauss qui se situent près du nœud. La moyenne se fait sur les points d'intégration qui se trouvent dans les triangles de Delaunay entourant le nœud. Le gradient de vitesse au nœud n se calcule de la manière suivante :

$$v_{n,i} = \sum_{j=1}^{N_T} \frac{\sum_{k=1}^{n_g} \sum_{m=1}^{N_k} \phi_{m,i} v_m P_k A_j}{\sum_{l=1}^{N_T} A_l} \quad i = x, y \quad (\text{II.28})$$

$$u_{n,i} = \sum_{j=1}^{N_T} \frac{\sum_{k=1}^{n_g} \sum_{m=1}^{N_k} \phi_{m,i} u_m P_k A_j}{\sum_{l=1}^{N_T} A_l}$$

Où N_T est le nombre de triangles de Delaunay entourant le nœud n , N_k le nombre de voisins naturels du $k^{\text{ème}}$ point d'intégration, et P_k le poids du point k dans l'intégration de Gauss et A_l l'aire du triangle l .

II.4.1.5 Résultats sur l'identification

L'identification du modèle, sur les essais de traction uniaxiale, avait été faite en supposant l'uniformité de la déformation et des contraintes dans toute l'éprouvette. Nous avons vérifié la validité de cette hypothèse, en simulant les essais de traction avec des conditions aux limites plus réalistes : les nœuds où la vitesse de la traverse est imposée suivant la direction Y sont pincés et le déplacement suivant la direction X est interdit (Fig.II.11). Les résultats des simulations sont comparés avec le modèle pour une température de 90°C et des vitesses de traction de 15 mm.s^{-1} et 100 mm.s^{-1} . Sur la figure II.12, on peut voir la contrainte de Cauchy, en fonction de la déformation logarithmique, d'une simulation de traction uniaxiale réalisée pour des vitesses de traction imposées au bord de 15 mm.s^{-1} et 100 mm.s^{-1} , ainsi que le résultat donné par Chevalier et al. [CHE 06] dans les mêmes conditions. Sur le même graphique on observe l'écart (en %) entre la simulation réaliste et le modèle homogène. L'écart est compris entre 2,5% et 5%. Les résultats de la figure II.12

sont obtenus pour un découpage de l'intervalle de temps en 500. De plus, on voit que l'écart entre la simulation et le modèle homogène est le même quelque soit la vitesse de traction (pour une même discrétisation de l'intervalle de temps).

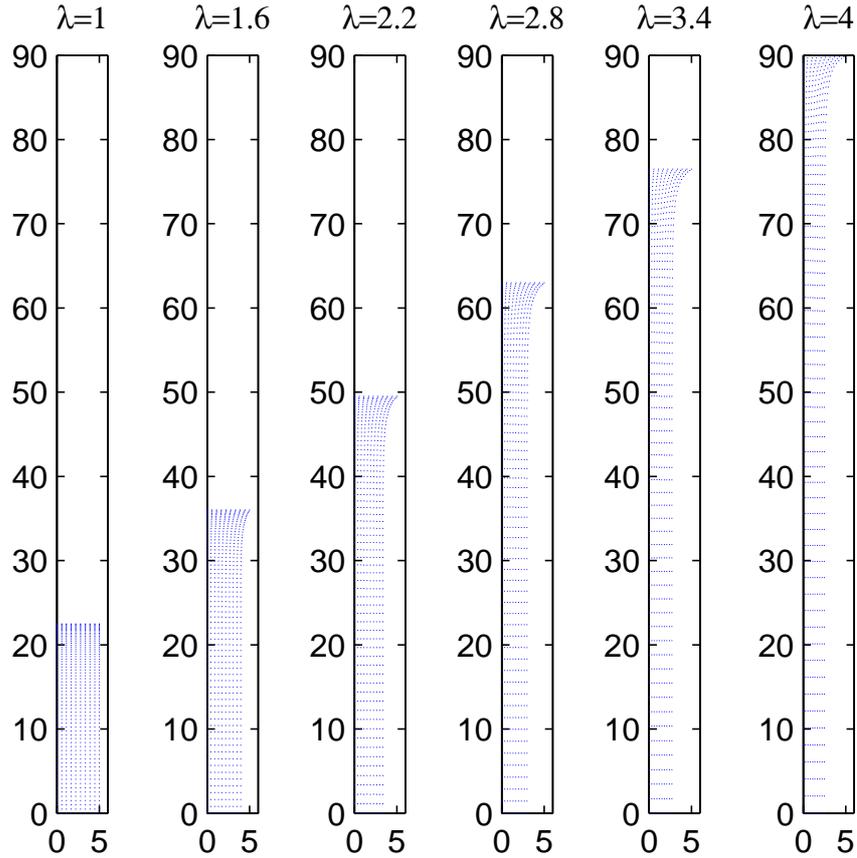


FIGURE II.11 – Simulation de l'essai de traction uniaxiale
($V = 15\text{mm}\cdot\text{s}^{-1}$).

En traction uniaxiale, les conditions aux limites réelles étant moins sévères (léger glissement suivant la direction X) que celles appliquées pour la simulation, il est raisonnable de dire que la méthode d'identification des paramètres du modèle (Eq.II.6-II.11) est validée. En effet, l'hypothèse d'un état de déformation homogène donne des résultats presque identiques à une simulation ayant des conditions aux limites plus contraignantes.

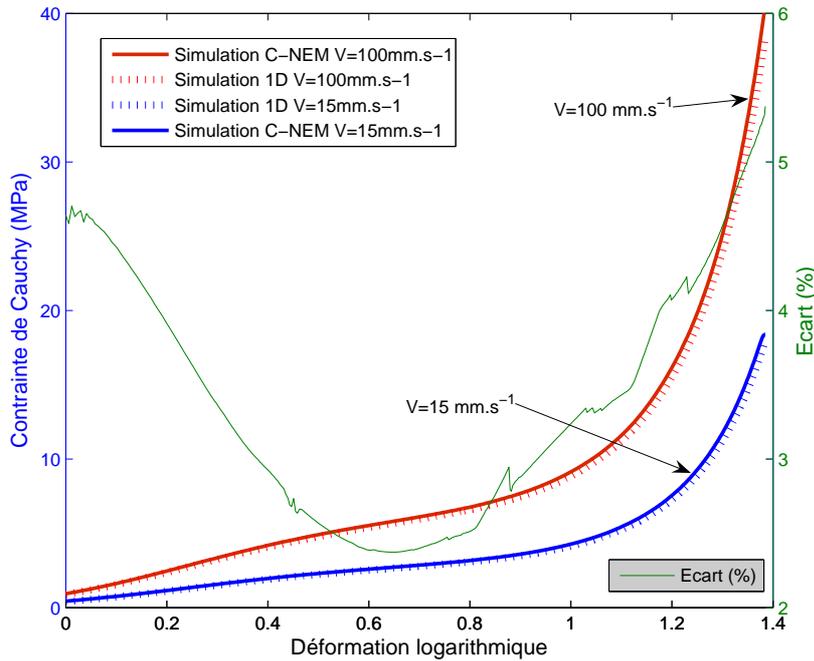


FIGURE II.12 – Simulation C-NEM d'essais de traction uniaxiale $V=15\text{ mm.s}^{-1}$ et $V=100\text{ mm.s}^{-1}$ et comparaison avec l'hypothèse de traction uniforme.

II.5 Simulation du soufflage libre

Dans cette section, nous proposons une méthode d'optimisation du procédé d'étirage-soufflage. Nous nous limitons au soufflage libre de préformes et au soufflage avec canne d'étirage dans le cas du modèle visqueux présenté précédemment. Ces deux exemples peuvent se traiter en 2D en utilisant l'hypothèse d'axisymétrie.

II.5.1 Soufflage de préformes : modèle visqueux

Le modèle visqueux (Eq.II.6-II.11) est bien adapté à la simulation du procédé d'étirage-soufflage. En effet, pendant toute la durée du procédé de fabrication la préforme est soumise à une pression interne, ceci empêche un éventuel retour élastique. La prise en compte de l'élasticité n'est donc pas nécessaire dans un premier temps pour la simulation du procédé de soufflage.

II.5.1.1 formulation du problème axisymétrique

Le soufflage libre des bouteilles en PET est un problème axisymétrique. Ainsi le problème 3D (Eq.II.17) peut être réduit à un problème 2D en utilisant les coordonnées cylindriques (r, z) .

$$- \int_S 2r \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* ds + \int_S r p \operatorname{div}(\underline{V}^*) ds + \oint_{\partial\Omega_p} r \underline{F} \cdot \underline{V}^* dl = 0 \quad (\text{II.29})$$

$$\int_S r \operatorname{div}(\underline{V}) p^* ds = 0 \quad (\text{II.30})$$

Dans le problème d'optimisation, un nombre important de simulations de soufflage libre doit être réalisé. L'utilisation de la formulation mixte (vitesse, pression) dans le cas de la simulation du procédé de soufflage donne des temps de calcul très importants. Afin de réduire le temps de calcul, une méthode de pseudo-pénalisation est implémentée. Il faut donc contrôler la condition d'incompressibilité à chaque simulation. La pression hydrostatique est remplacée par un terme proportionnel à la divergence de la vitesse comme donné dans l'expression suivante.

$$p = -\alpha \underline{\underline{I}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{2\nu}{1 - 2\nu} \quad (\text{II.31})$$

La variation relative du volume de matière observée lors des simulations de soufflage est inférieure à 4% dans le cas le plus défavorable, les résultats ainsi obtenus sont très proches de l'incompressibilité. En utilisant cette méthode, le nombre de ddl est de 2 par nœud, ainsi le modèle constitutif (Eq.II.6-II.11) et la formulation variationnelle (Eq.II.29) deviennent :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}} + \alpha (\underline{\underline{I}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}) \underline{\underline{I}} \quad (\text{II.32})$$

$$- \int_S 2r \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}^* ds - \int_S r \alpha (\underline{\underline{I}} : \underline{\underline{\eta}} : \underline{\underline{D}}) \operatorname{div}(\underline{V}^*) ds + \oint_{\partial\Omega_p} r \underline{F} \cdot \underline{V}^* dl = 0 \quad (\text{II.33})$$

Afin de simplifier la notation de l'équation II.33, nous introduisons un nouveau tenseur du quatrième ordre $\underline{\underline{\tilde{\eta}}}$ comme le tenseur de rigidité en élasticité. Ces composantes non nulles sont données par l'expression suivante :

$$\underline{\underline{(\tilde{\eta})}}_{ijij} = \begin{cases} (1 + \frac{\alpha}{2}) \tilde{K}_i \dot{\gamma}^{m-1} & \text{si } i = j \\ \frac{\alpha}{2} \tilde{K}_k \dot{\gamma}^{m-1} & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad \text{avec } k \neq i \neq j \quad (\text{II.34})$$

$$\underline{\underline{(\tilde{\eta})}}_{ijij} = \tilde{K}_k \dot{\gamma}^{m-1} \quad \text{si } i \neq j \quad \text{avec } k \neq i \neq j$$

$$\tilde{K}_i = e^{(\beta(\varepsilon_i - \underline{\varepsilon}))} K_0(T) e^{\left(a \frac{1-y_0}{1-y} + b \left(\frac{y-y_0}{1-y_0}\right)^p + c \frac{y-y_0}{1-y_0}\right)} \quad i = 1, 2, 3 \quad \text{avec } 0 \leq \beta \quad (\text{II.35})$$

Avec ce nouveau tenseur, nous pouvons écrire l'équation II.33 d'une façon plus simple à implémenter (Eq.II.36).

$$- \int_S 2r \underline{\underline{D}} : \underline{\underline{\tilde{\eta}}} : \underline{\underline{D}}^* ds + \oint_{\partial\Omega_p} r \underline{F} \cdot \underline{V}^* dl = 0 \quad (\text{II.36})$$

Les variables, en un point quelconque \underline{x} , sont discrétisées de la façon suivante :

$$\underline{v}(\underline{x}) = \mathbf{N}_a(\underline{x}) \cdot \mathbf{v}$$

$$K_i(\underline{x}) = \mathbf{M}_a(\underline{x}) \cdot \mathbf{k}_i \quad (\text{II.37})$$

$$\underline{\underline{\tilde{D}}}(\underline{x}) = \mathbf{B}_a(\underline{x}) \cdot \mathbf{v}$$

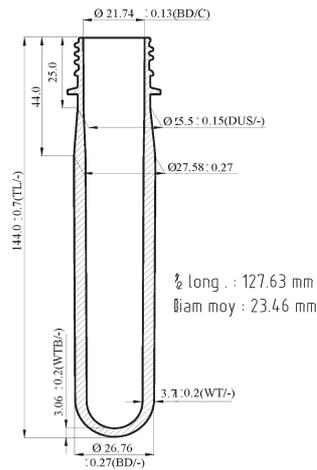
Avec :

$$\mathbf{N}_a(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_1(\underline{x}) & 0 & \cdots & \phi_n(\underline{x}) & 0 \\ 0 & \phi_1(\underline{x}) & \cdots & 0 & \phi_n(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.38})$$

$$\mathbf{B}_a(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_{1,r}(\underline{x}) & 0 & \cdots & \phi_{n,r}(\underline{x}) & 0 \\ \frac{\phi_1(\underline{x})}{r} & 0 & \cdots & \frac{\phi_n(\underline{x})}{r} & 0 \\ 0 & \phi_{1,z}(\underline{x}) & \cdots & 0 & \phi_{n,z}(\underline{x}) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{1,z}(\underline{x}) & \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{1,r}(\underline{x}) & \cdots & \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{n,z}(\underline{x}) & \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{n,r}(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.39})$$

$$\mathbf{M}_a(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \phi_1(\underline{x}) & \cdots & \phi_n(\underline{x}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.40})$$

Où les $\phi_i(x)$ sont nulles sauf pour les nœuds qui sont voisins naturels du point (x) . Comme pour le problème de traction, une fois le problème discrétisé, nous utilisons la méthode de Newton-Raphson pour trouver la solution du problème non linéaire.



(a)



(b)

FIGURE II.13 – (a) plan de la préforme utilisé pour l'optimisation du paramètre β , (b) machine de soufflage libre.

Cette fois le paramètre β joue un rôle important dans l'évolution de la géométrie. Ce paramètre étant impossible à identifier avec les résultats d'essais uniaxiaux ou biaxiaux équilibrés. Afin de trouver la meilleure valeur du coefficient β nous avons utilisé la technique d'identification inverse.

Nous avons réalisé des soufflages libres de préforme en PET (Fig.II.13) avec une distribution initiale de température uniforme (96°C) et une pression interne égale à 0.6 MPa. La moyenne des hauteurs finales (H_{real}) et la moyenne des diamètres finaux (d_{real}) sont respectivement de 33,8 cm et 10,6 cm (Fig.II.14.b). Nous utilisons ces paramètres (hauteur et diamètre) de forme de bouteille pour trouver β , nous comparons ces deux longueurs des bouteilles réelles à ces mêmes longueurs sur les bouteilles simulées. La meilleure valeur du coefficient β est le minimum de l'expression suivante :

$$\beta = \min_{0 \leq \beta^* \leq 1} \left\{ \frac{\sqrt{(d_{real} - d_{sim})^2 + (H_{real} - H_{sim})^2}}{\sqrt{(d_{real})^2 + (H_{real})^2}} \right\} \quad (\text{II.41})$$

Où H_{sim} et d_{sim} sont respectivement la hauteur et le diamètre des bouteilles simulées. Nous trouvons $\beta = 3$, cette valeur est obtenue pour la simulation représentée sur la figure II.14.a. Pour $\beta < 3$ les bouteilles sont trop courtes et pour $\beta > 3$ les bouteilles sont trop longues. Dans toutes les simulations la valeur du diamètre atteint est d'environ 10,5 cm. β affecte seulement la longueur de la bouteille.

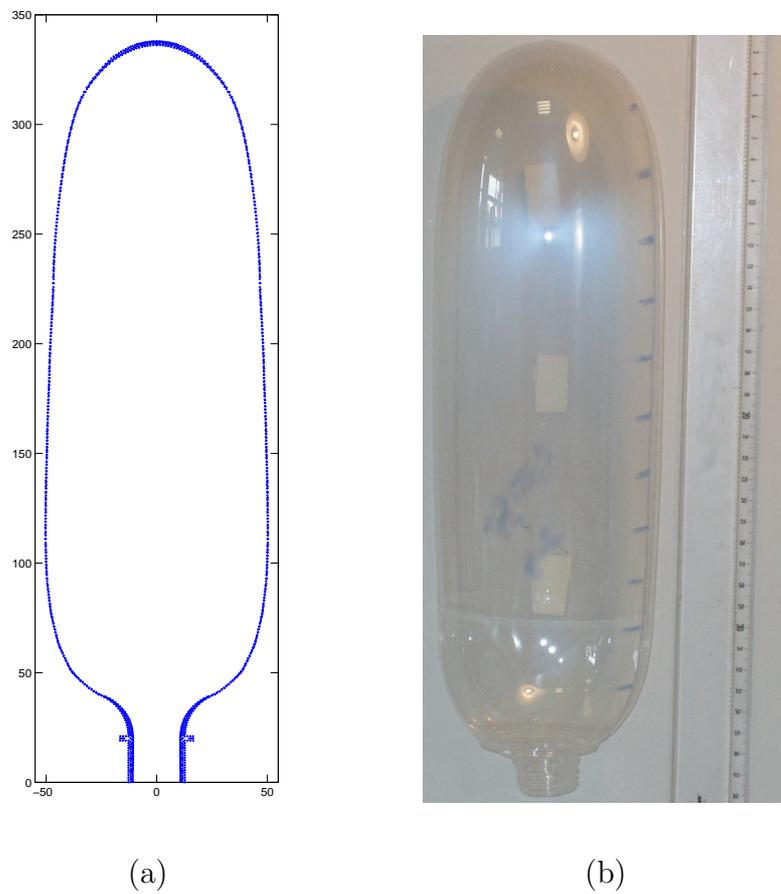


FIGURE II.14 – (a) Soufflage libre de bouteille pour $\beta = 3$, (b) soufflage libre de la préforme (pression interne = 0.6 MPa, température = 96°C).

II.5.1.2 Résultats numériques - soufflage libre

Dans le procédé de soufflage, une "bonne" bouteille est une bouteille avec une épaisseur constante, mais cela est très difficile à obtenir. En effet, si certaines parties de la bouteille

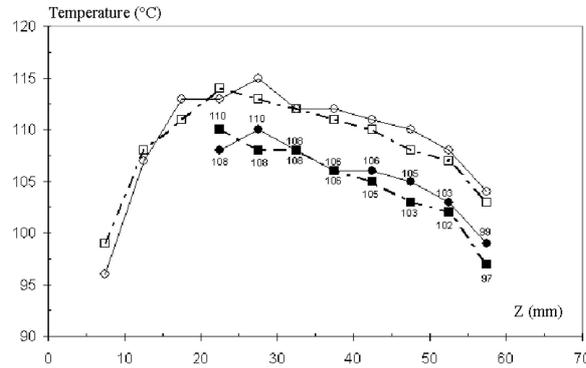


FIGURE II.15 – Distribution de température industrielle [MEN 07].

ont une épaisseur plus importante cela signifie qu'elles ont été moins étirées. Les propriétés mécaniques du matériau sont donc moins bonnes à ces endroits.

Dans cette partie, nous allons chercher la distribution de température initiale, le long de la préforme, qui optimise l'épaisseur de la préforme. Pour cette première application, pour simplifier le profil mesuré en condition de soufflage réel dans [MEN 07] (voir figure II.15), nous utilisons un profil de température qui ne dépend que de deux paramètres (ΔT et ΔL) et qui est linéaire par partie comme cela est montré sur la figure II.16.

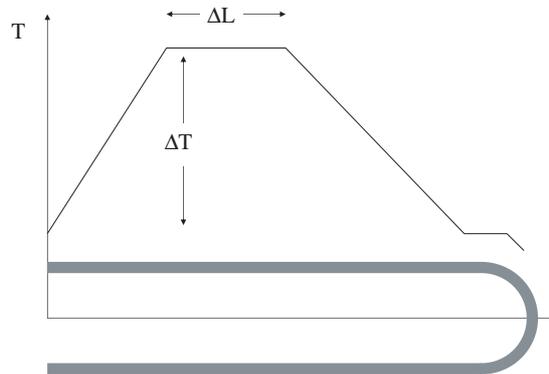


FIGURE II.16 – Distribution de température le long de la préforme.

Les préformes utilisées dans les simulations ont une épaisseur de 4,05 mm, un rayon extérieur de 11 mm et une hauteur de 75 mm. Les bouteilles ont été calculées pour obtenir une hauteur finale de 150 mm (deux fois la hauteur initiale). Le rayon maximal des bouteilles obtenues est d'environ 40 mm, soit quatre fois le rayon extérieur initial, pour des épaisseurs finales inférieures à 0,5 mm. Les simulations qui correspondent aux

profils à ($\Delta T = 10^\circ\text{C}$) et à ($\Delta T = 2^\circ\text{C}$) sont tracés sur la figure II.17. Les résultats de l'optimisation sont donnés sur la figure II.18, les deux paramètres ΔT et ΔL sont les abscisses sur chacun des axes du plan horizontal et l'écart type de l'épaisseur es tracé sur l'axe vertical. Nous constatons, dans le cas particulier du soufflage libre, que pour avoir une épaisseur homogène le long de la bouteille il faut une température initiale uniforme suivant la hauteur de la préforme. Les profils d'épaisseur sont représentés figure II.19 pour un ΔL constant (20 mm) et pour un ΔT variant de 2°C à 10°C . On définit ξ comme le rapport entre l'abscisse curviligne (longueur parcourue depuis le col de la bouteille) et l'abscisse curviligne maximum. On remarque que pour un ΔT élevé il reste de la matière non étirée au fond de la bouteille ($\xi = 1$) et près du col ($\xi = 0$).

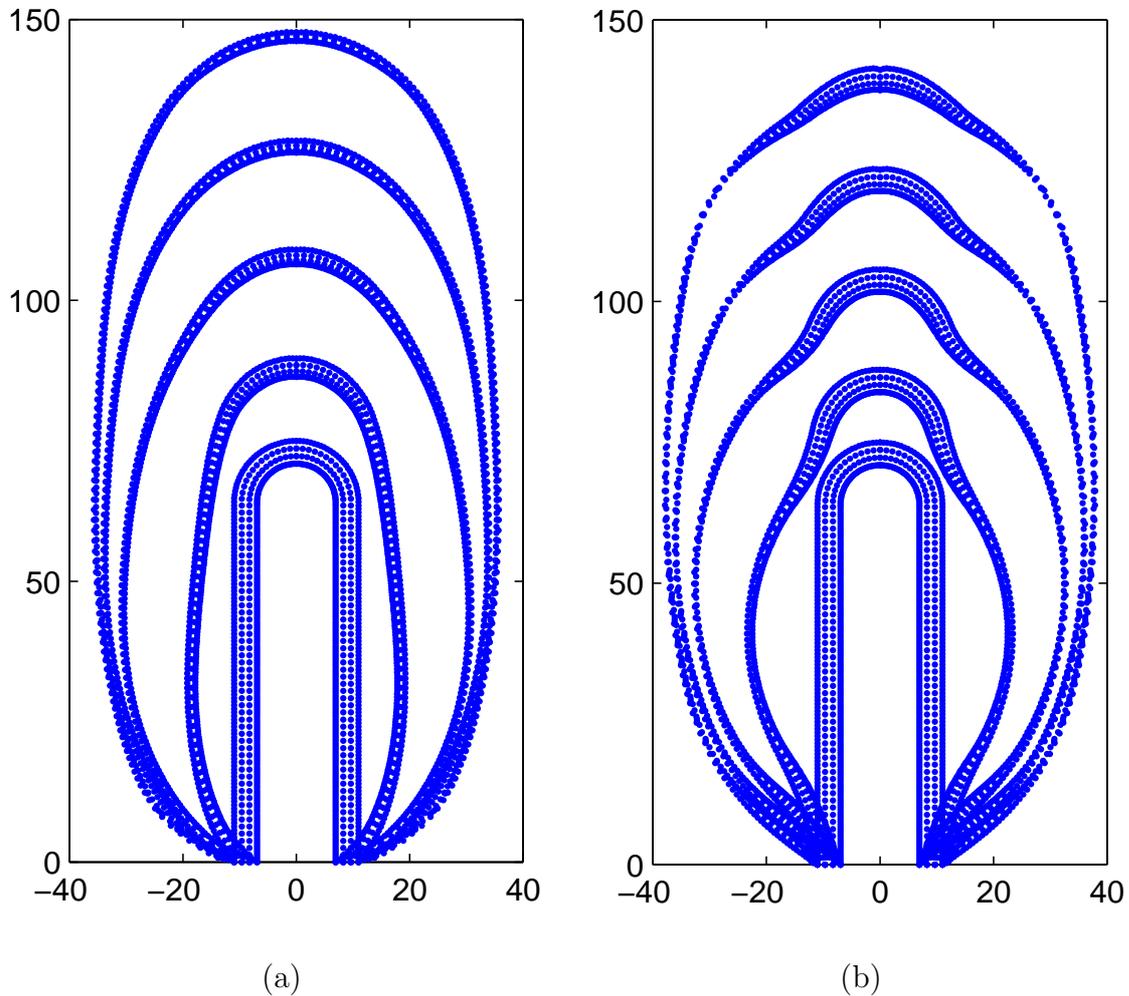


FIGURE II.17 – Évolution du soufflage pour (a) $\Delta T = 2^\circ\text{C}$, $\Delta L = 20$ mm et (b) $\Delta T = 10^\circ\text{C}$, $\Delta L = 20$ mm.

On constate sur ces deux simulations que l'évolution de la bouteille au cours du temps

n'est pas la même. Dans le premier cas (Fig.II.17.1) la déformation se développe de manière homogène dans la préforme, tandis que pour la deuxième simulation (Fig.II.17.2) la déformation se propage le long de la préforme.

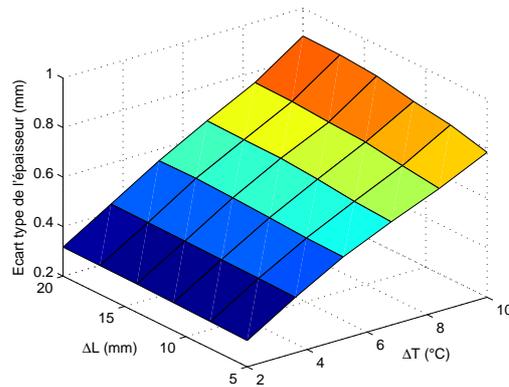


FIGURE II.18 – *Ecart type de l'épaisseur en fonction des paramètres ΔT et ΔL .*

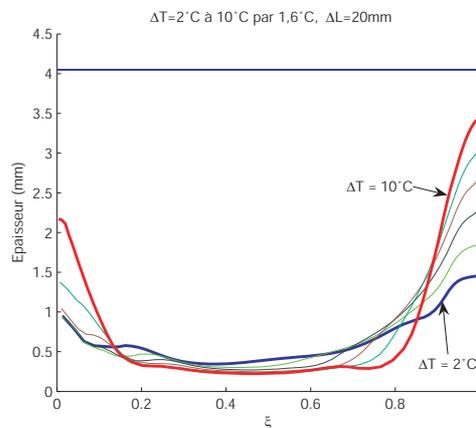


FIGURE II.19 – *Epaisseur de la bouteille en fonction de ξ .*

II.5.1.3 Résultats numériques - soufflage avec tige d'élongation

Maintenant nous considérons l'effet de la tige d'élongation. Le contact avec la tige d'élongation est un contact collant unilatéral. L'optimisation est réalisée sur deux paramètres procédés : la vitesse de la tige d'élongation (V_r) et l'instant de l'application de la pression de soufflage (t_p). La pression de soufflage est activée quand la tige d'élongation

à atteint un certain déplacement : t_p est équivalent à une distance d_p . Dans toutes les simulations nous utilisons un même profil de température donné. Les conditions opératoires du procédé sont montrées sur la figure II.20.

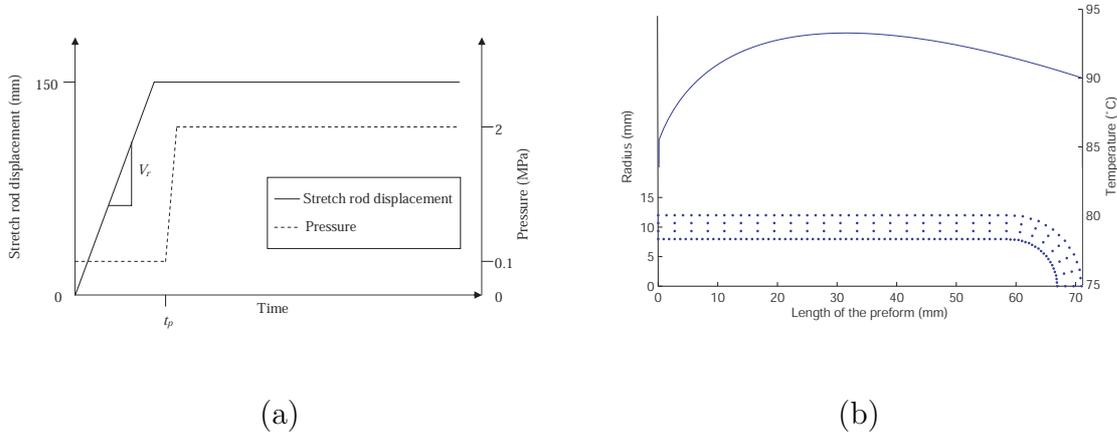


FIGURE II.20 – Conditions opératoires simulées (a) vitesse de tige et pression, (b) Profil de température le long de la préforme.

Les simulations sont stoppées quand le volume de la bouteille atteint 0,5 L. Les résultats de l'optimisation sont donnés sur la figure II.21. On peut y voir l'écart type ($\sigma^{1/2}$) de l'épaisseur comme une fonction de V_r et d_p . V_r va de 500 mm.s^{-1} à 1625 mm.s^{-1} et d_p va de 80 mm à 130 mm. Comme dans l'exemple du soufflage libre, $\sigma^{1/2}$ n'a pas de minimum, mais la meilleure bouteille est obtenue pour $t_p = 80 \text{ mm}$ et $V_r = 500 \text{ mm.s}^{-1}$.

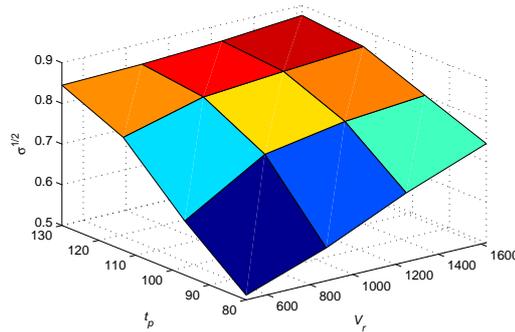


FIGURE II.21 – Écart type ($\sigma^{1/2}$) de l'épaisseur de la bouteille.

Dans ce cas, la tige d'élongation ne va pas assez vite pour pousser le fond de la bouteille durant toute la durée du soufflage. Le taux de déformation dû à la pression est supérieur au taux de déformation dû à la tige. L'évolution de deux différentes bouteille

est représentée sur la figure II.22, une pour $d_p = 80$ mm et $V_r = 500$ mm.s⁻¹ et une autre pour $d_p = 130$ mm et $V_r = 1625$ mm.s⁻¹. Sur la figure II.23, nous avons tracé l'épaisseur des deux bouteilles en fonction de ξ .

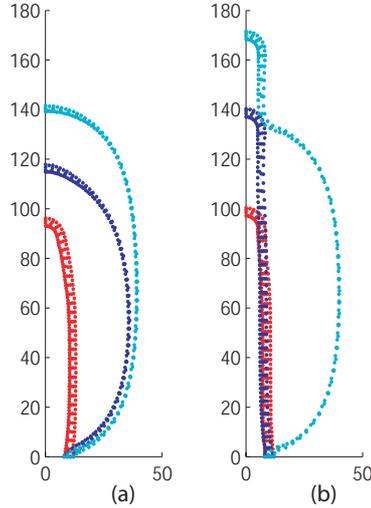


FIGURE II.22 – Évolution des bouteille (a) $t_p = 80$ mm et $V_r = 500$ mm.s⁻¹ (b) $t_p = 130$ mm et $V_r = 1625$ mm.s⁻¹.

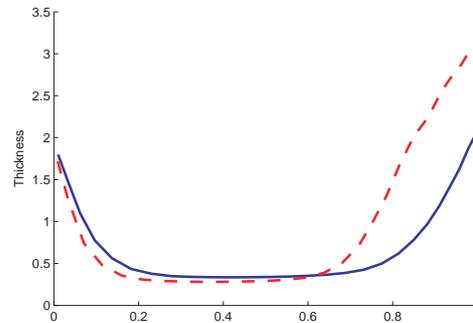


FIGURE II.23 – Épaisseur des bouteilles pour $t_p = 80$ mm et $V_r = 500$ mm.s⁻¹ et $t_p = 130$ mm et $V_r = 1625$ mm.s⁻¹.

Bien que réalisées sans moule, ces simulations nous montrent l'évolution de la bouteille en fonction des paramètres de fabrication (vitesse de tige et retard à la pression). Les différentes évolutions obtenues sont comparables avec les expériences réalisées par Huang *et al.* [HUA 06]. Dans le cas où la tige est rapide et le retard à la pression est important le gonflage de la bouteille se fait après l'arrêt de la tige. Dans le cas inverse où la tige est

lente et le retard à la pression est court, la préforme se décolle de la tige avant l'arrêt de celle-ci.

II.6 Simulation complète du procédé

Dans cette section nous exposons des exemples complets du procédé d'étirage-soufflage avec la prise en compte des effets thermiques du moule et de la tige d'élongation. Nous devons ajouter l'équation suivante au problème de l'équation II.12 :

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = \text{div}(k \text{grad}(T)) + \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} \quad (\text{II.42})$$

Le problème thermique est résolu numériquement par la méthode des C-NEM. Dans le cas de l'étirage-soufflage, les nouvelles conditions aux limites liées à l'équation II.42 sont :

sur la surface de la préforme en contact avec la tige

$$T = T_t$$

sur la surface de la préforme en contact avec le moule

$$T = T_m$$

sur la surface externe et libre de la préforme

$$(k \text{grad}(T)) \cdot \underline{\underline{n}} = -h_m (T - T_m) \quad (\text{II.43})$$

Où T_m et T_t sont respectivement la température du moule et la température de la tige, elles sont supposées constantes durant la simulation. h_m est le coefficient de transfert thermique entre la préforme et le moule. Nous négligeons les échanges de chaleur entre l'air et l'intérieur de la préforme. Les valeurs de ρ , k et c_p sont données dans [SCH 98] et résumées dans le tableau II.2.

Le contact avec le moule est supposé collant sans possibilité de décollement. L'algorithme de contact est présenté sur les figures II.24 et II.25. On gère les pas de temps pour que le contact se fasse nœud après nœud. Si à l'instant $t + \Delta t$ plusieurs nœuds se retrouvent dans la paroi du moule nous divisons Δt par 2 jusqu'à ce qu'il ne reste qu'un seul nœud à traiter. L'instant de contact précis est trouvé par dichotomie.

ρ (kg.m ⁻³) à $T = 80^\circ\text{C}$	1336
k (W/m.K)	0.25
c_p (kJ/kg.K)	
à 23°C	1.13
à 80°C	1.42
à 100°C	1.51
à 200°C	1.88

TABLE II.2 – Propriétés physiques du PET [SCH 98].

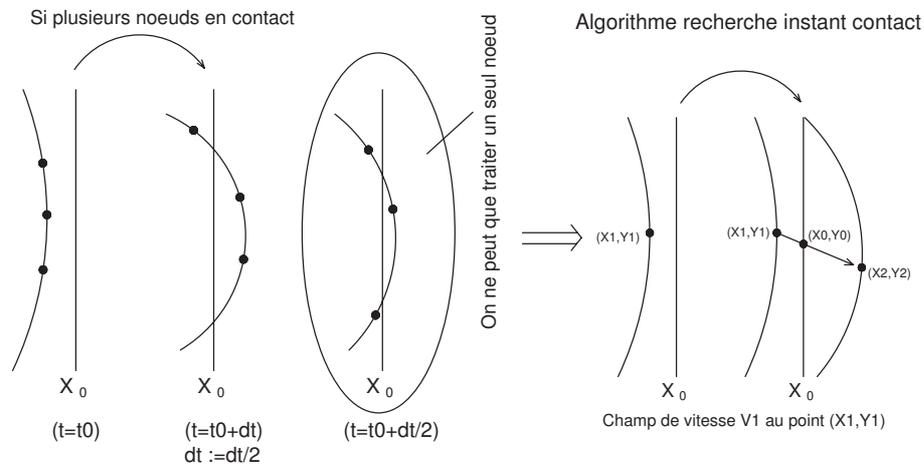


FIGURE II.24 – Recherche de contact entre un nœud et le moule.

II.6.1 Résultat : bouteille de 2 L et 0.33 L

Nous avons réalisé des simulations du procédé d'étirage-soufflage pour deux préformes de 40 g et 25 g dans des moules de 2 L et 0.33 L. Les figures II.26 et II.27 représentent les évolutions des préformes pour les deux cas. Ces simulations ont été réalisées sur un

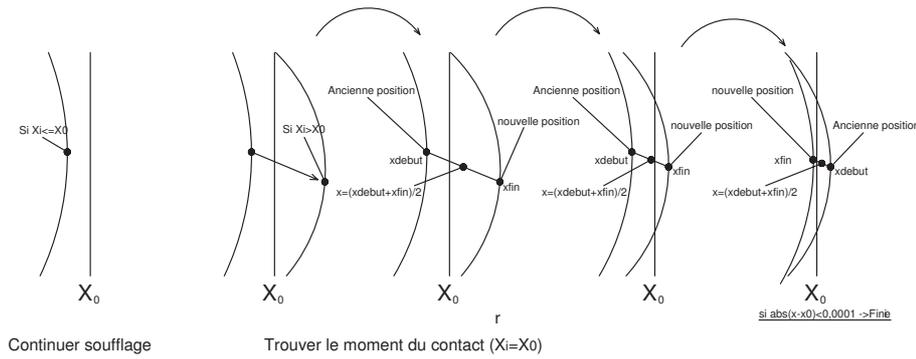


FIGURE II.25 – Recherche de l’instant de contact entre un nœud et le moule.

PC de bureau (Pentium 4, 3,4 GHz) en moins de 2 heures, sans remaillage ou addition de nœud.

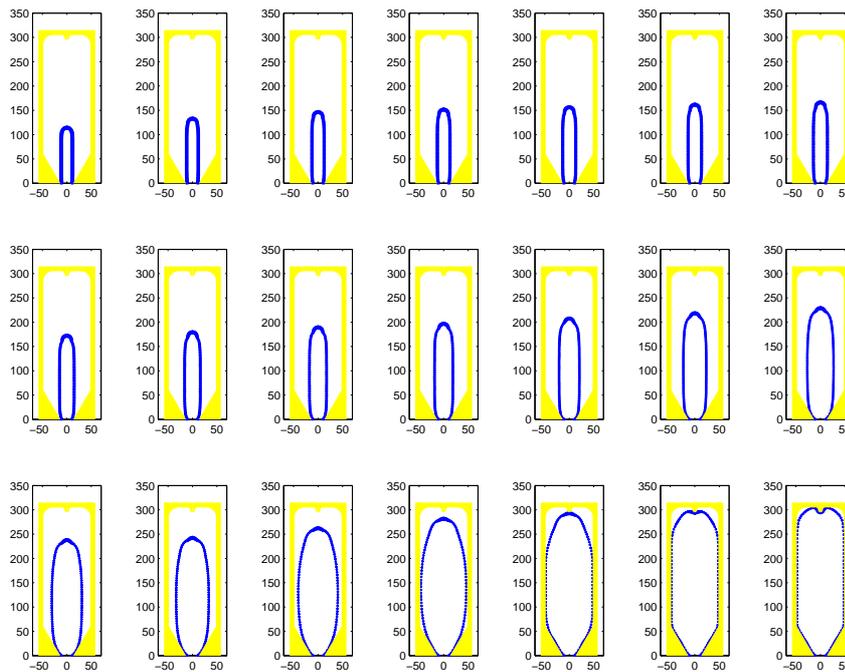


FIGURE II.26 – Évolution de la préforme dans un moule de 2 L.

Le modèle utilisé permet de suivre l’état de la microstructure tout au long de la simulation, et particulièrement à la dernière étape pour la forme finale de la bouteille. Ultérieurement, nous pourrions ainsi réaliser des calculs micromécaniques pour la détermination de la tenue d’une bouteille formée. Ces calculs font l’objet du chapitre III.

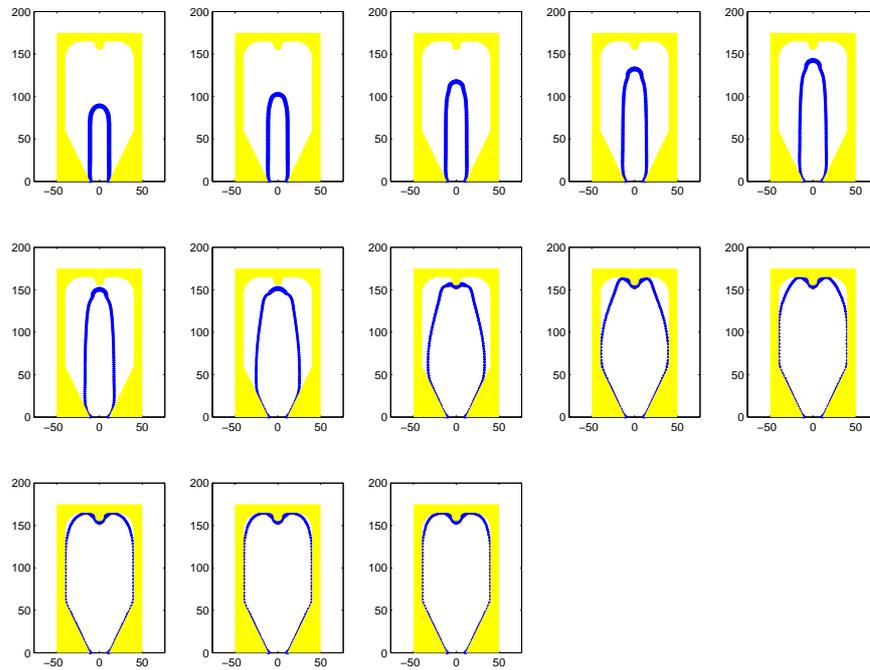


FIGURE II.27 – Évolution de la préforme dans un moule de 0,33 L.

La figure II.28 montre la répartition du taux de cristallinité dans les bouteilles de 0,33 L et 2 L. On constate que les fonds de bouteilles sont épais et que le taux de cristallinité est faible, ceci est dû à la tige d'étirage car la matière en contact avec elle n'est pas étirée. Le fond des bouteilles est souvent une zone fragile.

II.7 Conclusion partielle

Dans cette partie, nous avons proposé un modèle orthotrope non linéaire lié à l'évolution de la microstructure capable de représenter le comportement mécanique du PET pour des sollicitations complexes monotones. Ce modèle est bien adapté à la simulation de l'étirage-soufflage, la matière est toujours sous tension jusqu'à son refroidissement. Après le refroidissement, le comportement mécanique change et il faut utiliser d'autres modèles pour représenter le comportement du PET à une température inférieure à T_g . Cette modélisation fait l'objet du chapitre III et s'appuie sur les résultats obtenus sur la mesure du module d'Young.

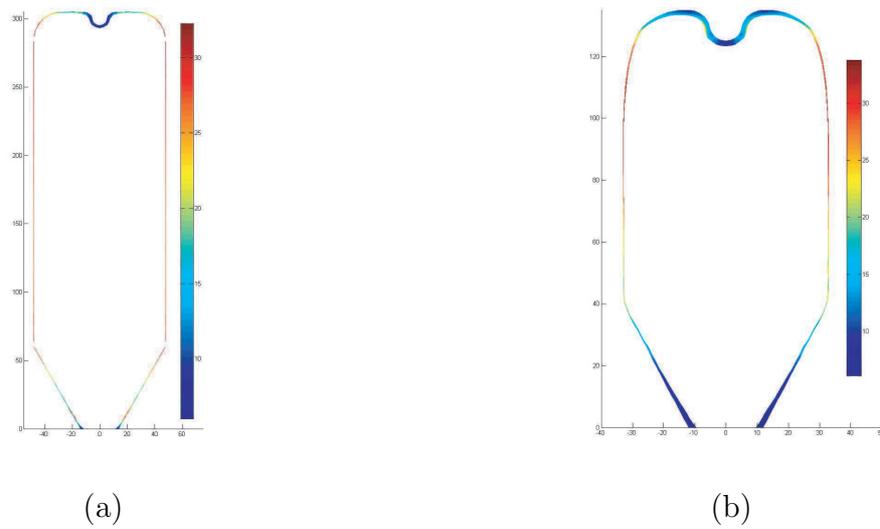


FIGURE II.28 – Mesure de la cristallinité pour (a) la préforme de 40 g, (b) la préforme de 25 g.

Nous avons validé la méthode d'identification pour le modèle visqueux non linéaire en grandes transformations par comparaison avec des simulations (2D). Le modèle de comportement proposé par Chevalier *et al.* [CHE 06] a été enrichi en introduisant un paramètre d'anisotropie (β) qui permet de prendre en compte l'effet de l'orientation moléculaire du PET sur les modifications de comportement lors de sollicitations complexes. L'utilisation de la méthode sans maillage (C-NEM) autorise la simulation et l'optimisation des procédés de mise en forme, en grandes transformations, sans "remaillage" et sans dégradation de la solution.

Dans le cadre des processus axisymétriques, nous avons mis en évidence l'influence de la répartition de température initiale et de la vitesse de la tige d'élongation dans le processus de déformation de la bouteille. Nous avons montré deux exemples complets de simulation du procédé qui nous permettent de trouver l'orientation du matériau en fonction des déformations principales et la répartition du taux de cristallinité dans les bouteilles.

Chapitre III

Détermination des propriétés induites par homogénéisation micromécanique

III.1 Introduction

Dans le chapitre précédent nous avons proposé un modèle de comportement mécanique orthotrope lié à la cristallisation induite. Ce modèle utilisé dans les simulations numériques du procédé d'étirage-soufflage permet d'estimer la morphologie du PET en fin de soufflage.

Afin de mieux comprendre les effets de la microstructure du PET sur son comportement mécanique, nous présentons les outils de la micromécanique appliqués à l'homogénéisation des propriétés élastiques. Nous nous limitons dans cette première approche au cas des petites perturbations. Cette modélisation couplée à la connaissance de la microstructure dans des structures en PET nous permet de prédire le comportement des bouteilles en service et ainsi optimiser la conception des bouteilles.

Les outils développés dans ce chapitre sont basés sur le résultat fondamental fourni par Eshelby [ESH 57] pour le problème d'inclusion noyée dans un milieu infini. Les différentes techniques présentées sont largement publiées et sont reprises dans des ouvrages de références ([BOR 01, NEM 99, ZAO 00, WIL 02]). L'ensemble des modèles présentés dans le chapitre nous permet de mieux comprendre le comportement du PET et ainsi mieux maîtriser la conception des bouteilles et autres emballages en PET.

III.2 Modélisation micromécanique

Bien que les déformations des bouteilles en services puissent atteindre 4 à 5% avant déformation permanente, nous allons homogénéiser les propriétés mécaniques du PET, dans le cadre de l'élasticité linéaire en petite perturbation. Le PET est un polymère semi-cristallin, il est donc composé d'une phase amorphe et d'une phase cristalline. Le taux de cristallinité du PET varie suivant les conditions d'obtention du matériau. La cristallisation du PET peut se produire de deux façons : thermiquement ou induite par une sollicitation. La première donne un PET semi-cristallin qui a un comportement mécanique isotrope. En revanche, la seconde donne une forte orientation au comportement global du PET. L'objet de cette partie est de déterminer les propriétés mécaniques effectives du PET : dans le cas d'une cristallisation thermique, avec l'utilisation des modèles "classiques" et isotrope, puis dans le cas de la cristallisation induite, avec un modèle qui prend en compte l'anisotropie du PET étiré. Le comportement effectif du matériau sera déduit du comportement de ses phases constituantes : amorphe et cristalline. Pour cela, nous allons utiliser différentes méthodes d'homogénéisation.

Avant d'appliquer tel ou tel schéma, il y a deux étapes préliminaires à effectuer.

III.2.1 Étape de représentation

La première étape est une étape de représentation : elle consiste à déterminer la nature des constituants homogènes du milieu hétérogène. Dans notre cas, les constituants homogènes seront la phase amorphe et la phase cristalline. Dans ce qui va suivre nous ne nous intéresserons donc pas aux hétérogénéités liées aux macromolécules ou tout autre détail encore plus fin. A l'échelle d'observation où nous sommes, les cristallites et le PET amorphe seront considérés comme homogènes.

Après avoir déterminé la nature des constituants du mélange macro-homogène, il faut connaître leurs propriétés physico-mécaniques, comme par exemple, leur tenseur de rigidité. En plus de ces propriétés intrinsèques, il faut définir leurs caractéristiques géométriques ainsi que leur disposition les uns par rapport aux autres. Pour le PET, on pourra considérer la phase amorphe comme une matrice et la phase cristalline comme des inclusions noyées dans cette matrice. Suivant la méthode d'homogénéisation utilisée, les inclusions cristallines pourront avoir une forme de sphéroïde (cas de la cristallisation thermique), d'ellipsoïde, ou encore de cylindre (cas de la cristallisation d'origine mécanique). Enfin, il est nécessaire de déterminer la nature de l'interface entre la phase amorphe et la phase cristalline. Dans une première approche, nous considérons cette interface comme parfaite. Nous ne tenons pas compte de la mésophase.

III.2.2 Étape de localisation

La seconde étape préliminaire à l'homogénéisation est une étape dite de localisation. Cette étape consiste à déterminer les champs microscopiques (déformation, contrainte, ...) en fonction des champs macroscopiques appliqués au matériau homogénéisé. Il faut aussi choisir une méthode de localisation, en fonction des conditions aux limites du problème (savoir s'il s'agit d'un problème périodique ou aléatoire). Le PET semble avoir une microstructure aléatoire. Dans le cas de la cristallisation thermique, le développement des cristaux et leur orientation se font de manière aléatoire suivant une loi de distribution sphérique et uniforme (il n'y a pas de direction privilégiée). Ce qui donne au PET, du point de vue macroscopique, un comportement mécanique isotrope. En comparaison, le PET à cristallisation induite (sous contrainte) présente une répartition des cristaux beaucoup

plus complexe qui dépend de nombreux facteurs (direction et vitesse de sollicitation).

III.2.3 Étape d'homogénéisation

Après avoir effectué les deux premières étapes de représentation et de localisation, nous pouvons appliquer un schéma d'homogénéisation. Pour cela, il faut savoir quelle opération de moyenne réaliser afin de parvenir au comportement global souhaité, avec une sûreté de prévision maîtrisée. L'homogénéisation peut être pratiquée soit pour avoir une estimation du comportement effectif (basée sur des approximations de la solution réelle du problème) soit pour en avoir un encadrement.

III.3 Homogénéisation en élasticité linéaire isotrope

Dans le contexte de l'élasticité linéaire, nous pouvons utiliser les outils analytiques de l'homogénéisation. Les calculs multi-échelles dans le cadre de l'élasticité non linéaire ou même de la viscoélasticité ne sont possibles que numériquement, ou analytiquement mais avec l'utilisation d'un grand nombre d'hypothèses, se sont des thèmes de recherche à eux seuls. Pour le comportement du PET à une température supérieure à T_g , nous avons utilisé des modèles macroscopiques qui nous donnent une information de la microstructure en fin de soufflage. Cette information nous permettra de prévoir les propriétés élastiques du PET à une température inférieure à T_g . Notre étude d'homogénéisation se limite donc aux propriétés élastiques du PET, dans le cas où le matériau se trouve à une température inférieure à sa température de transition vitreuse. Dans la suite, après avoir passé en revue les différentes méthodes d'homogénéisation, nous testons leur aptitude à reproduire le comportement du PET.

III.3.1 Passage du micro au macro et inversement

$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ correspondent aux tenseurs des contraintes locales et de déformation locale en un point \underline{x} du domaine. Nous avons : $\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V$ et $\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V$ où $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ sont les moyennes de $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x})$ sur le volume V . Le volume V correspond au volume élémentaire représentatif (VER), c'est-à-dire le volume minimum à partir duquel on peut considérer le mélange comme macro-homogène. Dans V , $\underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{E}}$ sont homogènes.

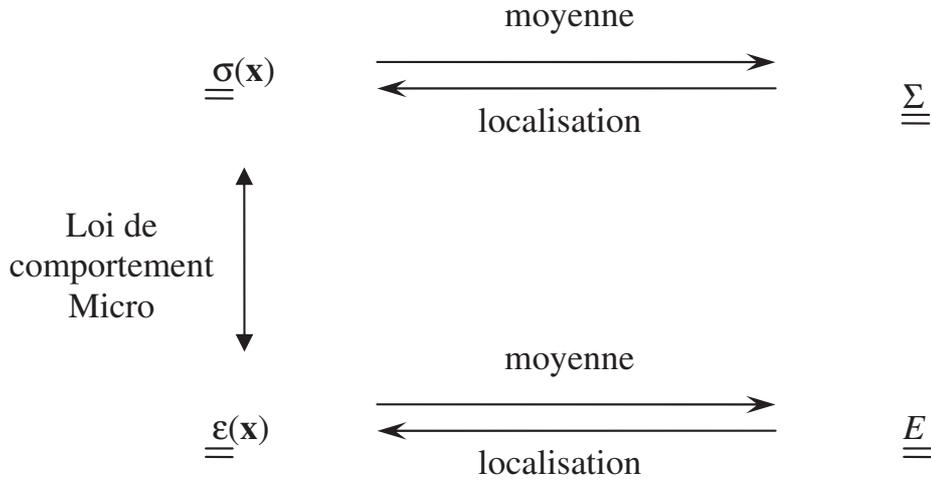


FIGURE III.1 – Passage micro-macro.

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) dV \quad (\text{III.1})$$

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) dV \quad (\text{III.2})$$

$$(\text{III.3})$$

Inversement nous avons : $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{B}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\Sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{E}}$, où $\underline{\underline{B}}(\underline{\underline{x}})$ et $\underline{\underline{A}}(\underline{\underline{x}})$ sont, respectivement, les tenseurs (d'ordre 4) de concentration de contrainte et de localisation de la déformation.

$$\langle A \rangle_{Vijkl} = I_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{III.4})$$

$$\langle B \rangle_{Vijkl} = I_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{III.5})$$

$$(\text{III.6})$$

III.3.1.1 Contrainte homogène au contour

Pour des conditions de contraintes homogènes, nous avons $\forall \underline{\underline{x}} \in \partial V, \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \cdot \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{\Sigma}} \cdot \underline{\underline{n}} = \underline{\underline{t}}^d$ où l'exposant "d" signifie "donné".

III.3.1.2 Déformation homogène au contour

Pour des conditions de déformation homogène, nous avons $\forall \underline{\underline{x}} \in \partial V, u(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{x}} = \underline{\underline{u}}^d$.

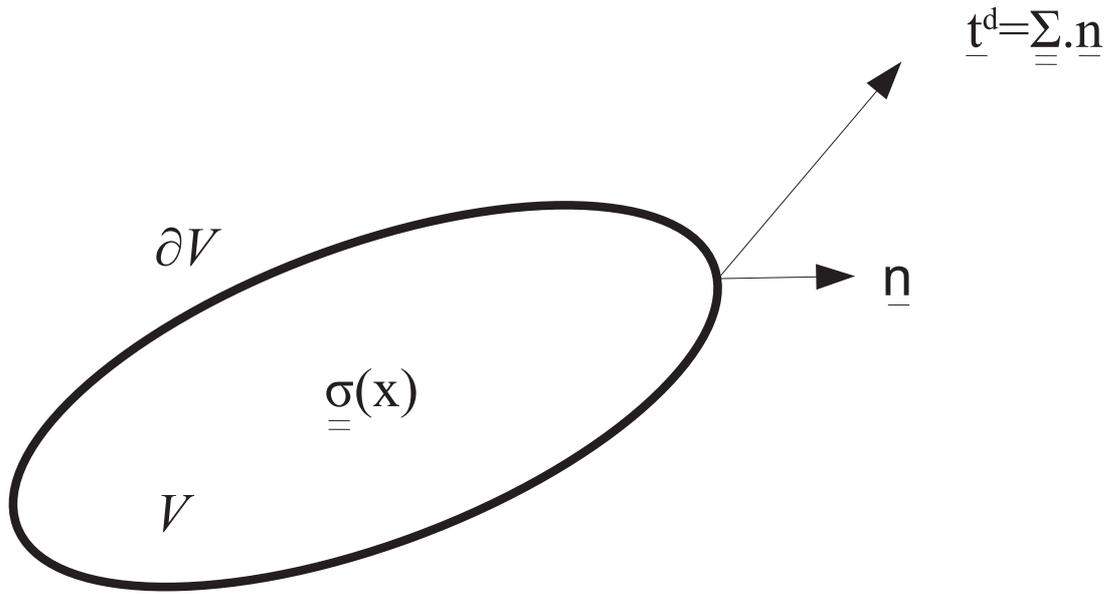


FIGURE III.2 – Conditions homogènes en contrainte.

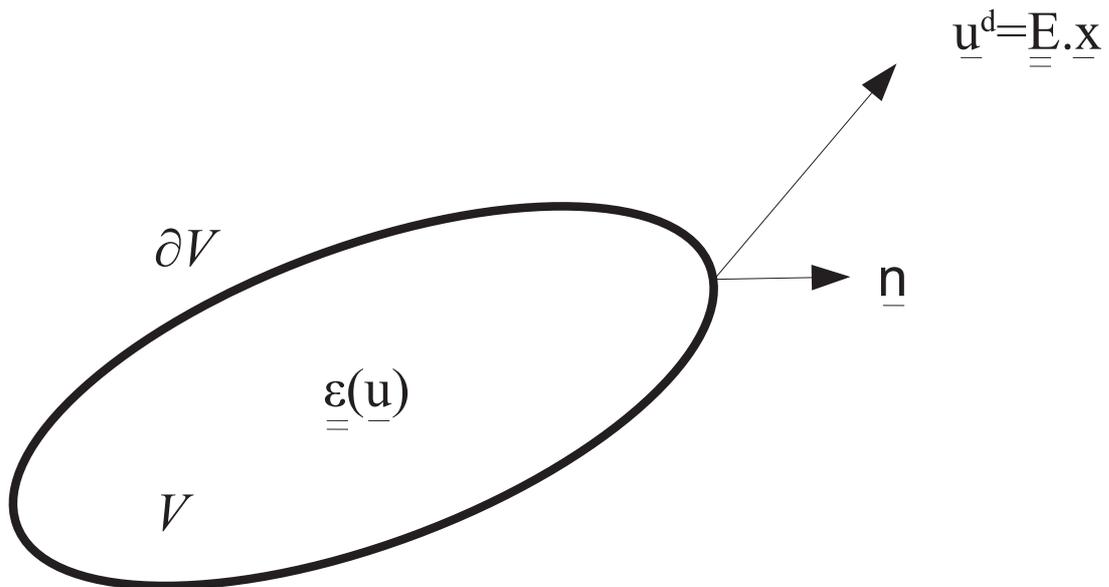


FIGURE III.3 – Condition homogène en déformation.

III.3.2 Lemme de Hill ou condition de Hill-Mandel

Soit $\underline{\sigma}^*(\underline{x})$ (un champ de contrainte statiquement admissible) et $\underline{\varepsilon}^*(\underline{x})$ (un champ de déformation cinématiquement admissible) non nécessairement associés [HIL 72]. Alors si $\underline{\sigma}^*(\underline{x})$ vérifie des conditions homogènes en contrainte sur ∂V ou si $\underline{\varepsilon}^*(\underline{x})$ vérifie des conditions homogènes en déformation sur ∂V on a :

$$\langle \underline{\underline{\sigma}}^*(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle = \langle \underline{\underline{\sigma}}^*(\underline{x}) \rangle : \langle \underline{\underline{\varepsilon}}^*(\underline{x}) \rangle \quad (\text{III.7})$$

III.3.3 Théorie des modules effectifs

On a soit le problème 1 (contrainte homogène au contour) :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) &= 0 \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) &= \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) \cdot \underline{n} &= \underline{\underline{\Sigma}}^d \cdot \underline{n} \quad \text{sur } \partial V \\ \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V &= \underline{\underline{\Sigma}}^d \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

Soit le problème 2 (déformation homogène au contour) :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})) &= 0 \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) &= \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in V \\ \underline{u}(\underline{x}) &= \underline{\underline{E}}^d \cdot \underline{x} \quad \text{sur } \partial V \\ \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V &= \underline{\underline{E}}^d \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

III.3.3.1 Définition des tenseurs effectifs

Si $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ et $\underline{u}(\underline{x})$ sont la solution du problème 1, alors on a :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{\tilde{S}}} : \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \underline{\underline{\tilde{S}}} : \underline{\underline{\Sigma}}^d \quad (\text{III.10})$$

$$\underline{\underline{\tilde{S}}} = \left\langle \underline{\underline{S}}(\underline{x}) : \underline{\underline{B}}(\underline{x}) \right\rangle_V \quad (\text{III.11})$$

Si $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x})$ et $\underline{u}(\underline{x})$ sont la solution du problème 2, alors on a :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}}^d \quad (\text{III.12})$$

$$\underline{\underline{\tilde{C}}} = \left\langle \underline{\underline{C}}(\underline{x}) : \underline{\underline{A}}(\underline{x}) \right\rangle_V \quad (\text{III.13})$$

III.3.4 Homogénéisation des milieux aléatoires

La structure du PET cristallisé est sans nul doute aléatoire. Effectivement la répartition des cristaux (respectivement leur taille) dans un volume élémentaire représentatif ne peut pas être décrite par un motif de base. On ne peut donc pas utiliser les techniques d'homogénéisation des milieux périodiques, utilisées pour les matériaux structurés comme les structures alvéolaires des biomatériaux ou les composites techniques.

III.3.4.1 Théorèmes variationnels pour les milieux macro-homogènes

Soit $\underline{\underline{E}}^d$ une déformation macroscopique imposée. Alors :

$$\begin{aligned}
 2\tilde{w}(\underline{\underline{E}}^d) &= \underline{\underline{E}}^d \underline{\underline{\tilde{C}}} : \underline{\underline{E}}^d = \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} \right\rangle_V & (III.14) \\
 &= \min_{\underline{\underline{\varepsilon}}^* \in K(\underline{\underline{\varepsilon}})} \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* \right\rangle_V \\
 &= - \left\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}} - 2\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{E}}^d \right\rangle_V \\
 &= - \min_{\underline{\underline{\sigma}}^* \in S(\underline{\underline{\sigma}})} \left\langle \underline{\underline{\sigma}}^* : \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}}^* - 2\underline{\underline{\sigma}}^* : \underline{\underline{E}}^d \right\rangle_V
 \end{aligned}$$

Où $K(\underline{\underline{\varepsilon}})$ est l'espace des champs cinématiquement admissibles et $S(\underline{\underline{\sigma}})$ est l'espace des champs statiquement admissibles. Il en est de même pour $\underline{\underline{\Sigma}}^d$ une contrainte macroscopique imposée.

$$\begin{aligned}
 2\tilde{u}(\underline{\underline{\Sigma}}^d) &= \underline{\underline{\Sigma}}^d : \underline{\underline{\tilde{S}}} : \underline{\underline{\Sigma}}^d & (III.15) \\
 &= \left\langle \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}} \right\rangle_V \\
 &= \min_{\underline{\underline{\sigma}}^* \in S(\underline{\underline{\sigma}})} \left\langle \underline{\underline{\sigma}}^* : \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\sigma}}^* \right\rangle_V \\
 &= - \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}} - 2\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\Sigma}}^d \right\rangle_V \\
 &= - \min_{\underline{\underline{\varepsilon}}^* \in K(\underline{\underline{\varepsilon}})} \left\langle \underline{\underline{\varepsilon}}^* : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* - 2\underline{\underline{\varepsilon}}^* : \underline{\underline{\Sigma}}^d \right\rangle_V & (III.16)
 \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{S}}_{ijkl}^E = \underline{\underline{S}}_{jikl}^E = \underline{\underline{S}}_{ijlk}^E \quad (\text{III.20})$$

$$\underline{\underline{S}}_{ijkl}^E \neq \underline{\underline{S}}_{klij}^E \quad (\text{III.21})$$

– Polarisation

L'équation de comportement dans le domaine I s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) - \underline{\underline{\varepsilon}}^t) \quad (\text{III.22})$$

Ou encore :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) + \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{III.23})$$

$$\underline{\underline{\tau}} = -\underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.24})$$

τ est appelé "tenseur de polarisation" ou "polarisation". On a donc :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = -\underline{\underline{P}} : \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{III.25})$$

$$\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{C}}^{-1} = \underline{\underline{S}}^E : \underline{\underline{S}} \quad (\text{III.26})$$

Le tenseur $\underline{\underline{P}}$ est symétrique et défini positif et $\forall \underline{\underline{A}} \neq \underline{\underline{0}} \quad \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{P}}^{-1} : \underline{\underline{A}} > \underline{\underline{A}} : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{A}} > 0$ ($\underline{\underline{A}}$ est un tenseur du second ordre) et $\forall \lambda > 0 \quad \underline{\underline{P}}(\lambda \underline{\underline{C}}) = \lambda^{-1} \underline{\underline{P}}(\underline{\underline{C}})$ (homogénéité de degré -1 du tenseur $\underline{\underline{P}}$ par rapport au tenseur d'élasticité $\underline{\underline{C}}$). D'une façon duale nous avons :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}}^I - \underline{\underline{\varepsilon}}^t) \quad \forall \underline{\underline{x}} \in I \quad (\text{III.27})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = -\underline{\underline{Q}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.28})$$

$$\underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{C}} : \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}^E \right) = \underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{P}} : \underline{\underline{C}} \quad (\text{III.29})$$

$$\left(\underline{\underline{I}} \right)_{ijkl} = 1/2(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (\text{III.30})$$

– Problème d'Eshelby inhomogène et tenseur d'influence de Hill

Maintenant l'inclusion ellipsoïdale I a pour tenseur des modules élastiques le tenseur $\underline{\underline{C}}^I$, et $\underline{\underline{S}}^I$ comme tenseur des souplesses. $\underline{\underline{C}}^I = \underline{\underline{C}} + \Delta\underline{\underline{C}}^I$ où $\Delta\underline{\underline{C}}^I$ est symétrique non nul mais n'est pas nécessairement défini. L'inclusion I subit une transformation caractérisée par une "polarisation" $\underline{\underline{\tau}}$ (homogène) qui conduirait à une déformation libre (elle-même homogène) $\underline{\underline{\varepsilon}}^t = -\underline{\underline{S}}^I : \underline{\underline{\tau}}$.

Le problème ainsi posé peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \text{ est cinématiquement admissible dans } V \text{ et } \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \rightarrow 0 \text{ loin de } I \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \quad \forall \underline{\underline{x}} \in V/I \text{ et } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) + \underline{\underline{\tau}} \quad \forall \underline{\underline{x}} \in I \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) \text{ est statiquement admissible dans } V \end{array} \right. \quad (\text{III.31})$$

Pour se ramener au problème d'Eshelby homogène on pose :

$$\underline{\underline{\tau}}' = \underline{\underline{\tau}} + \Delta\underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^I \quad (\text{III.32})$$

La déformation (homogène) dans l'inclusion satisfait donc :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = -\underline{\underline{P}}(\underline{\underline{C}}) : \underline{\underline{\tau}}' = -\underline{\underline{P}}(\underline{\underline{C}}) : \left(\underline{\underline{\tau}} + \Delta\underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^I \right) \quad (\text{III.33})$$

Le tenseur $\underline{\underline{P}}$ est construit à partir des propriétés du milieu infini. Le tenseur $\underline{\underline{P}}$ étant inversible, on obtient :

$$\left(\underline{\underline{P}}^{-1} - \underline{\underline{C}} + \underline{\underline{C}}^I \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^I = -\underline{\underline{\tau}} = \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.34})$$

$$\underline{\underline{C}}^* = \underline{\underline{P}}^{-1} - \underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}} : \left[\left(\underline{\underline{S}}^E \right)^{-1} - \underline{\underline{I}} \right] \quad (\text{III.35})$$

$\underline{\underline{C}}^*$ est le tenseur d'influence de Hill, il ne dépend que de $\underline{\underline{C}}$ et de la forme de l'inclusion. $\underline{\underline{C}}^*$ est un tenseur symétrique et défini positif dont ses composantes ont la dimension d'un module d'élasticité.

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = - \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{III.36})$$

De façon duale nous avons $\underline{\underline{\sigma}}^I$ le tenseur des contraintes homogènes dans l'inclusion.

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^I + \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{III.37})$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^t = -\underline{\underline{S}}^I : \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{III.38})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = -\left(\underline{\underline{S}}^* + \underline{\underline{S}}^I\right)^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.39})$$

$$\underline{\underline{S}}^* = \left(\underline{\underline{C}}^*\right)^{-1} = \underline{\underline{Q}}^{-1} - \underline{\underline{S}} \quad (\text{III.40})$$

– Interprétation du tenseur d'influence de Hill

Si $\underline{\underline{C}}^I \gg \underline{\underline{C}}$ (c'est-à-dire que l'inclusion est plus rigide que le milieu infini) on aura $\underline{\underline{C}}^I \gg \underline{\underline{C}}^* > 0$ (au sens des tenseurs définis positifs).

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I \approx -\left(\underline{\underline{C}}^I\right)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.41})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I \approx -\left(\underline{\underline{S}}^*\right)^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}^t = -\underline{\underline{C}}^* : \underline{\underline{\varepsilon}}^t \quad (\text{III.42})$$

Le tenseur d'influence de Hill " $\underline{\underline{C}}^*$ " caractérise donc l'effet que le milieu infini exerce sur l'inclusion en réponse à une déformation homogène de cette dernière.

– Problème d'inclusion avec chargement à l'infini

En plus du problème précédent, le domaine V est soumis à un chargement homogène à l'infini. Les conditions aux limites sont données par $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\varepsilon}}^0$ et $\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\sigma}}^0 = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^0$ loin de l'inclusion I .

On a donc :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = -\underline{\underline{P}} : \underline{\underline{\tau}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^0 = -\left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I\right)^{-1} : \underline{\underline{\tau}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (\text{III.43})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^I - \underline{\underline{\sigma}}^0 = -\underline{\underline{C}}^* : (\underline{\underline{\varepsilon}}^I - \underline{\underline{\varepsilon}}^0) \quad (\text{III.44})$$

Problème d'inhomogénéité dans lequel l'inclusion (de module $\underline{\underline{C}}^I$) ne subit aucune déformation de transformation. Lorsque le système est soumis à la déformation homogène à l'infinie $\underline{\underline{\varepsilon}}^0$, l'inclusion se déforme de manière homogène et son état mécanique ($\underline{\underline{\sigma}}^I ; \underline{\underline{\varepsilon}}^I$) est caractérisé par les équations suivantes :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I - \underline{\underline{\sigma}}^0 = -\underline{\underline{C}}^* : (\underline{\underline{\varepsilon}}^I - \underline{\underline{\varepsilon}}^0) \quad (\text{III.45})$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^0 = \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{C}}^I : \underline{\underline{\varepsilon}}^I \quad (\text{III.46})$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right)^{-1} : \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (\text{III.47})$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}}^I = \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right)^{-1} : \underline{\underline{P}}^{-1} : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (\text{III.48})$$

$$(\text{III.49})$$

Cela se ramène au problème d'Eshelby avec chargement à l'infini avec une polarisation $\underline{\underline{\tau}}$, qui est définie par :

$$\underline{\underline{\tau}} = \left(\underline{\underline{C}}^I + \underline{\underline{C}} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^I = \underline{\underline{T}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (\text{III.50})$$

$$\underline{\underline{T}} = \left(\underline{\underline{C}}^I + \underline{\underline{C}} \right) : \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right)^{-1} : \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}} \right) \quad (\text{III.51})$$

$$\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{P}}^{-1} : \left[\underline{\underline{P}} - \left(\underline{\underline{C}}^* + \underline{\underline{C}}^I \right)^{-1} \right] : \underline{\underline{P}}^{-1} \quad (\text{III.52})$$

Le tenseur $\underline{\underline{T}}$ est symétrique.

III.3.4.4 Equations intégrales

$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}})$ (ou $\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{S}}(\underline{\underline{x}}) : \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}})$) la loi de comportement locale. $\underline{\underline{C}}^0$ et $\underline{\underline{S}}^0$ sont les tenseurs d'élasticité et de souplesse d'un certain milieu de référence, qui n'est pas nécessairement la phase prépondérante ou le milieu effectif. Nous pouvons écrire :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}) = \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) + \underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{x}}) \quad (\text{III.53})$$

$$\underline{\underline{\tau}}(\underline{\underline{x}}) = \left(\underline{\underline{C}}(\underline{\underline{x}}) - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{\underline{x}}) \quad (\text{III.54})$$

$$(\text{III.55})$$

Ou encore

$$\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{x}) = \underline{\underline{\underline{S}}}^0 : \underline{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{x}) + \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^t(\underline{x}) \quad (\text{III.56})$$

$$\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^t(\underline{x}) = \left(\underline{\underline{\underline{S}}}(\underline{x}) - \underline{\underline{\underline{S}}}^0 \right) : \underline{\underline{\underline{\tau}}}(\underline{x}) \quad (\text{III.57})$$

Les équations intégrales sont données par :

$$\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}(\underline{x}) - \langle \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}} \rangle_V = - \int_V \underline{\underline{\underline{\Gamma}}}^0(\underline{x} - \underline{y}) : \left(\underline{\underline{\underline{\tau}}}(\underline{x}) - \langle \underline{\underline{\underline{\tau}}} \rangle_V \right) dV_y \quad (\text{III.58})$$

Où $\underline{\underline{\underline{\Gamma}}}^0(\underline{x})$ est l'opérateur de Green modifié associé au milieu infini homogène de référence (de module $\underline{\underline{\underline{C}}}$). Cette équation est l'équation de Lippmann et Schwinger. Il en existe une forme duale donnée par :

$$\underline{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{x}) - \langle \underline{\underline{\underline{\sigma}}} \rangle_V = - \int_V \underline{\underline{\underline{\Delta}}}^0(\underline{x} - \underline{y}) : \left(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^t(\underline{x}) - \langle \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^t \rangle_V \right) dV_y \quad (\text{III.59})$$

Où $\underline{\underline{\underline{\Delta}}}^0(\underline{x})$ est l'opérateur de Green modifié en contrainte associé au milieu infini homogène de référence de souplesse $\underline{\underline{\underline{S}}}$.

III.3.4.5 Techniques d'homogénéisation appliquées au cas du PET

Pour l'homogénéisation du PET, en petite perturbation, nous avons utilisé différentes méthodes. Certaines sont des méthodes approchées, des encadrements, ou encore des méthodes exactes :

- multicouche biphasé
- bornes de Voigt et Reuss
- bornes de Hashin et Shtrikman
- schéma auto-cohérent
- schéma différentiel

Par la suite nous désignerons par "inclusion" la phase cristalline ou un composite biphasé (phase cristalline et phase amorphe), et par matrice la phase amorphe du PET. Nous avons la relation exacte suivante :

$$\left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{\bar{C}}} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 = \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^\alpha \right) : \underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^\alpha \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.60})$$

$$\alpha = (\theta, \varphi) \quad (\text{III.61})$$

$$\underline{\underline{\bar{\varepsilon}}}^\alpha = \underline{\underline{E}}^\alpha : \underline{\underline{\varepsilon}}^0 \quad (\text{III.62})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{E}}^\alpha(\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{C}}^i, \Omega^i) \quad i = 1, \dots, \infty \quad (\text{III.63})$$

Où $\underline{\underline{C}}^\alpha$ est le tenseur d'élasticité des inclusions (isotropes transverses) et (θ, φ) caractérisent l'orientation de l'axe d'isotropie transverse et de l'inclusion.

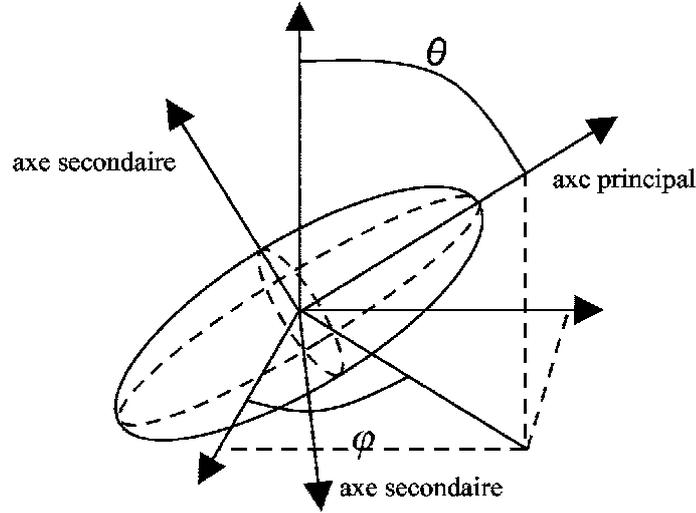


FIGURE III.4 – Inclusion shéroïdale.

À partir de la solution du problème de Eshelby plusieurs méthodes d'homogénéisation, basées sur des estimations, ont été établies. En effet, le problème de l'inclusion noyée dans une matrice infinie nous permet d'estimer le tenseur $\underline{\underline{E}}^\alpha$.

– Bornes de Voigt et Reuss

Pour le calcul du tenseur d'élasticité (borne de Voigt), on considère la moyenne des déformations dans chaque phase égale à la déformation macroscopique. On suppose une distribution isotrope des phases. Nous avons donc :

$$\underline{\underline{\bar{C}}} = (1 - f) \underline{\underline{C}} + \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \underline{\underline{C}}^\alpha(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.64})$$

La borne de Reuss est donnée par l'expression suivante, qui fait intervenir les tenseurs de souplesse de chaque phase.

$$\underline{\underline{\bar{S}}} = (1 - f) \underline{\underline{S}} + \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \underline{\underline{S}}^\alpha(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.65})$$

$\underline{\underline{C}}$ et $\underline{\underline{S}}$ sont respectivement les tenseurs d'élasticité et de souplesse de la phase amorphe.

– Multicouche biphasé

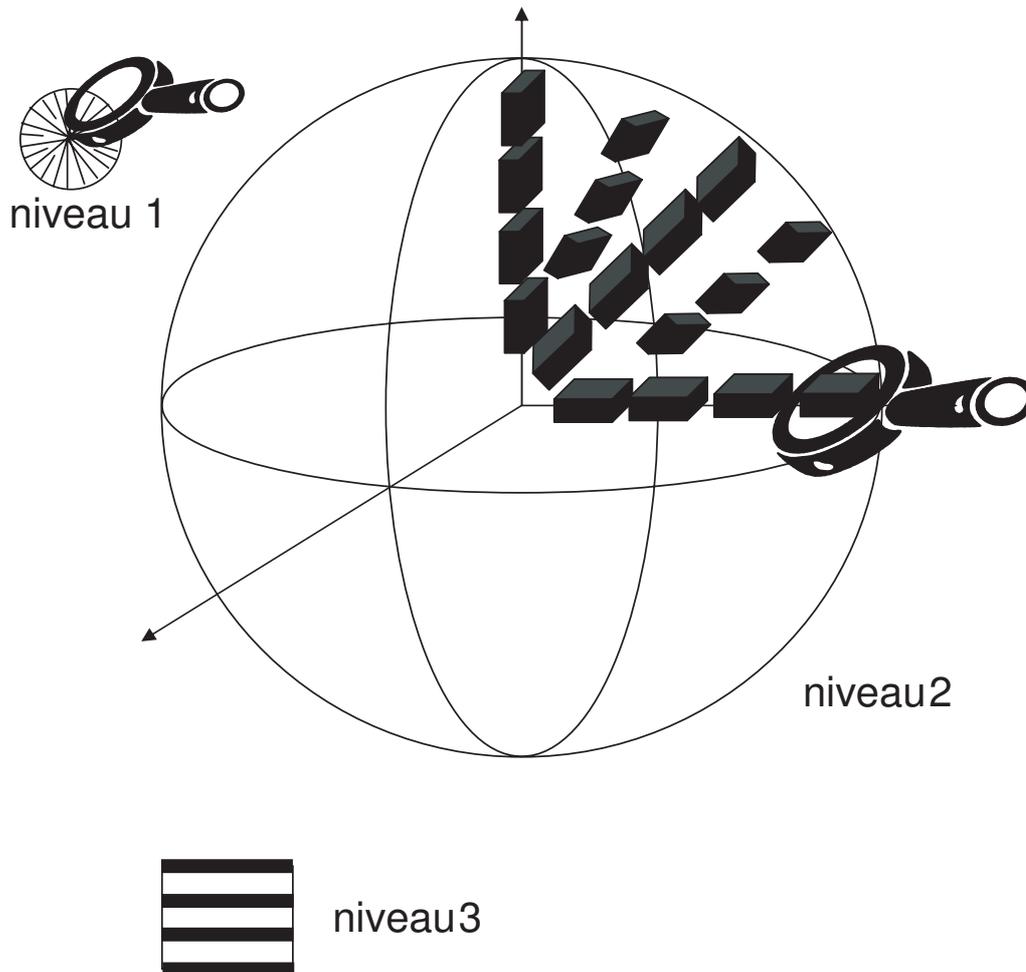


FIGURE III.5 – Représentation schématique d'un sphérolite.

On retrouve le multicouche dans la microstructure en sphérolite du PET. Comme on peut le voir sur la figure III.5, les sphérolites de PET sont composées de multicouches phase cristalline et phase amorphe. La méthode du multicouche biphase donne exactement les modules du matériau composite.

$$\underline{\underline{C}} = \left\langle \underline{\underline{M}} \right\rangle + \left\langle \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{L}} \right\rangle : \left\langle \underline{\underline{L}} \right\rangle^{-1} : \left\langle \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{C}} \right\rangle \quad (\text{III.66})$$

$$\underline{\underline{L}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{K}}^{-1} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{N}} + \underline{\underline{N}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{K}}^{-1}) \quad (\text{III.67})$$

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{L}} : \underline{\underline{C}} \quad (\text{III.68})$$

$$\left\langle \underline{\underline{L}}^{-1} \right\rangle = \frac{1}{2} (\underline{\underline{J}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{N}} + \underline{\underline{N}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{J}}) \quad (\text{III.69})$$

$$\underline{\underline{J}} = (2\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{N}}) \cdot \left\langle \underline{\underline{K}}^{-1} \right\rangle^{-1} \cdot (2\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{N}}) \quad (\text{III.70})$$

$$\underline{\underline{N}} = \underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}} \quad (\text{III.71})$$

$$(\underline{\underline{I}})_{ij} = \delta_{ij} \quad (\text{III.72})$$

$$(\underline{\underline{K}})_{ij} = \left(\underline{\underline{C}} \right)_{ipjq} (\underline{\underline{n}})_p (\underline{\underline{n}})_q \quad (\text{III.73})$$

$\underline{\underline{L}}$ et $\underline{\underline{M}}$ sont définis initialement comme des inverses partiels, c'est-à-dire :

$$\underline{\underline{L}} = \left(\underline{\underline{P}}^0 : \underline{\underline{C}} : \underline{\underline{P}}^0 \right)^{-1} \quad (\text{III.74})$$

$$\underline{\underline{M}} = \left(\underline{\underline{P}}^{0\perp} : \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{P}}^{0\perp} \right)^{-1} \quad (\text{III.75})$$

$$\underline{\underline{L}} : \underline{\underline{L}}^{-1} = \underline{\underline{L}}^{-1} : \underline{\underline{L}} = \underline{\underline{P}}^0 \quad (\text{III.76})$$

$$\underline{\underline{M}} : \underline{\underline{M}}^{-1} = \underline{\underline{M}}^{-1} : \underline{\underline{M}} = \underline{\underline{P}}^{0\perp} \quad (\text{III.77})$$

$$(\text{III.78})$$

Où $\underline{\underline{P}}^0$ est un opérateur de projection orthogonale.

$$\underline{\underline{P}}^0 = \underline{\underline{N}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{I}} \underline{\underline{\otimes}} \underline{\underline{N}} - \underline{\underline{N}} \otimes \underline{\underline{N}} \quad (\text{III.79})$$

$$\underline{\underline{P}}^{0\perp} = \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}^0 \quad (\text{III.80})$$

$\underline{\underline{I}}$ est l'identité des tenseurs du quatrième ordre.

$$\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} = \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \right) \quad (\text{III.81})$$

$$\left(\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \right)_{ijkl} = \left(\underline{\underline{A}} \right)_{ik} \left(\underline{\underline{B}} \right)_{jl} \quad (\text{III.82})$$

$$\left(\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{B}} \right)_{ijkl} = \left(\underline{\underline{A}} \right)_{il} \left(\underline{\underline{B}} \right)_{jk} \quad (\text{III.83})$$

$$(\text{III.84})$$

– Schéma de la distribution diluée (matrice-inclusions)

Cette technique s'applique dans le cas de très faible concentration d'inclusions, on suppose que le comportement d'une inclusion n'est pas affecté par les autres inclusions.

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{C}} + \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left(\underline{\underline{C}}^\alpha - \underline{\underline{C}} \right) : \underline{\underline{E}}^\alpha \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.85})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{E}}^\alpha(\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{C}}^\alpha, \Omega^\alpha) \quad (\text{III.86})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{A}}^\alpha : \left(\underline{\underline{A}}^\alpha - \underline{\underline{S}}^{E^\alpha} \right)^{-1} \quad (\text{III.87})$$

$$\underline{\underline{A}}^\alpha = \left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^\alpha \right)^{-1} : \underline{\underline{C}} \quad (\text{III.88})$$

$\underline{\underline{S}}^{E^\alpha}$ correspond au tenseur d'Eshelby pour une inclusion d'orientation (θ, φ) noyée dans une matrice infinie, de tenseur d'élasticité $\underline{\underline{C}}$. Le schéma de la distribution diluée ne donne pas de bonne approximation dans notre cas, car la concentration en inclusion cristalline dans le cas du PET peut atteindre plus de 40%. En revanche, ce schéma nous sert à mettre en place le schéma différentiel.

Pour les schémas différentiel et auto-cohérent, qui supposent une morphologie de type matrice-inclusions, deux types de calculs vont être effectués. Dans le premier cas, seule la phase cristalline composera les inclusions. En revanche dans le second cas, les inclusions seront constituées de composite multicouche biphasé (phase amorphe et cristalline).

De fait dans la littérature nous retrouvons plusieurs descriptions de la morphologie des cristallites [KUL 99] (Fig.III.6). Dans le premier calcul, les inclusions représentent les lamelles cristallines (Fig.III.6.a), mais dans le deuxième, elles modélisent la microstructure représentée dans la figure III.6.b. La microstructure en sphérolite (Fig.III.6.c) n'est pas prise en compte dans la modélisation.

– Schéma différentiel (matrice-inclusions)

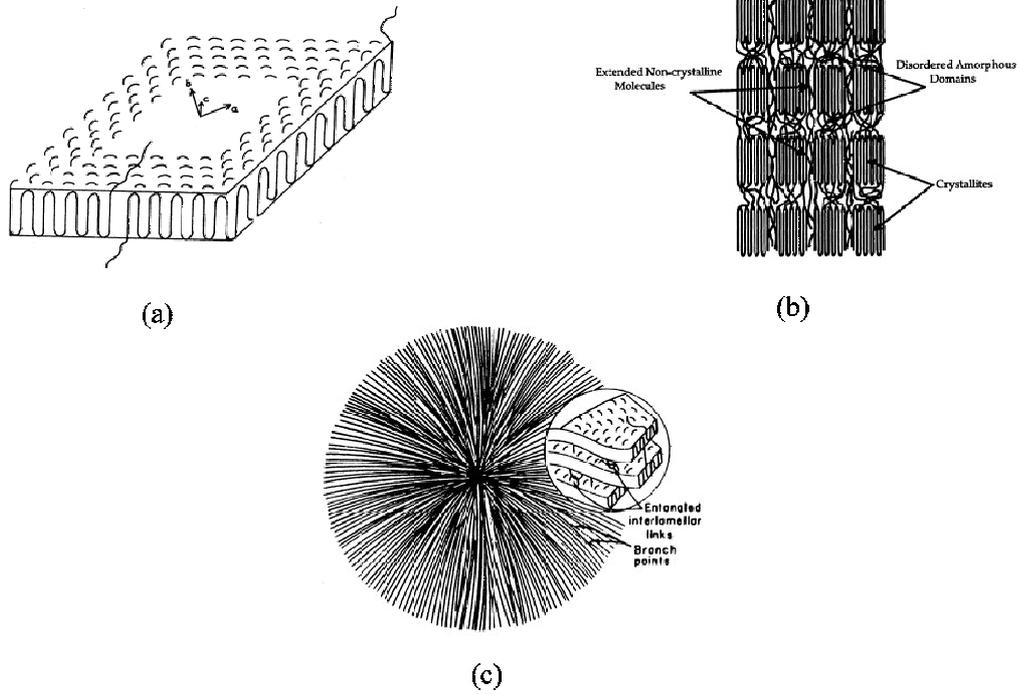


FIGURE III.6 – Morphologie du PET [KUL 99].

Cette technique est basée sur celle de la distribution diluée. En effet, l'homogénéisation se passe comme suit : On introduit une faible fraction volumique d'inclusion (δf) dans la matrice amorphe de tenseur d'élasticité $\underline{\underline{C}}$. À l'aide du schéma précédent, on détermine le tenseur des modules homogénéisés $\overline{\underline{\underline{C}}}$. On recommence l'opération précédente, mais le tenseur de la matrice est maintenant égal à $\overline{\underline{\underline{C}}}$, ainsi de suite (Fig.III.8).

$$\frac{d\overline{\underline{\underline{C}}}}{df} = \frac{1}{2\pi(1-f)} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left(\underline{\underline{C}}^\alpha - \overline{\underline{\underline{C}}} \right) : \underline{\underline{E}}^\alpha \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.89})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{E}}^\alpha(\underline{\underline{C}}, \underline{\underline{C}}^\alpha, \Omega^\alpha) \quad (\text{III.90})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \overline{\underline{\underline{A}}}^\alpha : \left(\overline{\underline{\underline{A}}}^\alpha - \overline{\underline{\underline{S}}}^{E^\alpha} \right)^{-1} \quad (\text{III.91})$$

$$\overline{\underline{\underline{A}}}^\alpha = \left(\overline{\underline{\underline{C}}} - \underline{\underline{C}}^\alpha \right)^{-1} : \overline{\underline{\underline{C}}} \quad (\text{III.92})$$

– Schéma auto-cohérent (matrice - inclusions)

On considère ici que l'inclusion n'est pas noyée dans la matrice mais dans le milieu homogénéisé lui-même. Cela nous donne la formulation suivante :

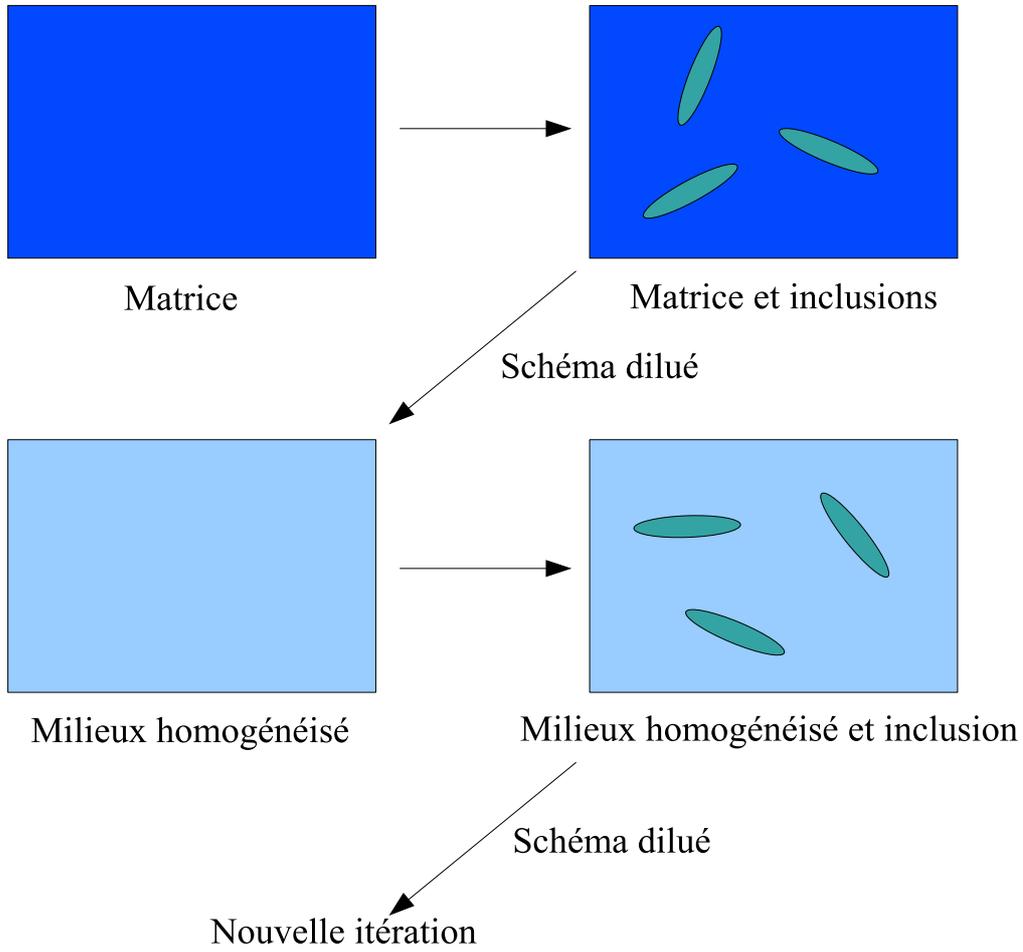


FIGURE III.7 – Principe du schéma différentiel.

$$\underline{\underline{\bar{C}}} = \underline{\underline{C}} + \frac{f}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left(\underline{\underline{C}}^\alpha - \underline{\underline{C}} \right) : \underline{\underline{E}}^\alpha \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.93})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{E}}^\alpha(\underline{\underline{\bar{C}}}, \underline{\underline{C}}^\alpha, \Omega^\alpha) \quad (\text{III.94})$$

$$\underline{\underline{E}}^\alpha = \underline{\underline{A}}^\alpha : \left(\underline{\underline{A}}^\alpha - \underline{\underline{S}}^{E^\alpha} \right)^{-1} \quad (\text{III.95})$$

$$\underline{\underline{A}}^\alpha = \left(\underline{\underline{\bar{C}}} - \underline{\underline{C}}^\alpha \right)^{-1} : \underline{\underline{\bar{C}}} \quad (\text{III.96})$$

Cette équation implicite se résout de manière itérative.

Il existe une autre façon de traiter le schéma auto-cohérent.

– Schéma auto-cohérent (agrégat)

Cette technique est surtout utilisée pour les matériaux polycristallins. Dans ce cas, il n'y a pas d'inclusion noyée dans une matrice, mais un agrégat de composite biphasé (Fig.III.8). Pour simplifier les calculs, la forme de chaque "grain" sera la même (même rapport de forme et même orientation). Pour nous permettre d'avoir un milieu homogène isotrope, les "grains" seront choisis sphériques. La démarche d'homogénéisation est la suivante : il faut premièrement homogénéiser le composite (à l'aide de la technique précédemment citée) puis résoudre l'équation suivante (obtenue à partir du schéma auto-cohérent matrice - inclusions) :

$$\underline{\underline{I}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \left\{ \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}}^E : \left(\underline{\underline{S}} : \underline{\underline{C}}^\alpha - \underline{\underline{I}} \right) \right\}^{-1} \sin \theta d\theta d\varphi \quad (\text{III.97})$$

Où, dans notre cas, $\underline{\underline{S}}^E$ est le tenseur d'Eshelby pour une inclusion sphérique noyée dans une matrice isotrope de tenseur d'élasticité le tenseur homogénéisé $\underline{\underline{C}}$.

– Bornes de Hashin et Shtrikman

Les bornes de Hashin et Shtrikman sont données par l'expression suivante :

$$\underline{\underline{C}}^{HS} = \underline{\underline{C}}^0 + \left\langle \left[\underline{\underline{I}} + \left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{P}} \right]^{-1} \right\rangle : \left\langle \left[\left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0 \right) + \underline{\underline{P}} \right]^{-1} \right\rangle \quad (\text{III.98})$$

$$\underline{\underline{C}}^{HS} = \left\langle \left[\underline{\underline{I}} + \left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{P}} \right]^{-1} \right\rangle^{-1} : \left\langle \left[\underline{\underline{I}} + \left(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0 \right) : \underline{\underline{P}} \right]^{-1} : \underline{\underline{C}} \right\rangle \quad (\text{III.99})$$

$\underline{\underline{C}}^{HS}$ est une borne supérieure du tenseur d'élasticité du milieu homogénéisé, si le tenseur d'élasticité du milieu de référence $\underline{\underline{C}}^0$ est supérieur au sens des formes quadratiques associées à $\underline{\underline{C}}^r$ ($r =$ matrice, inclusions). Donc pour obtenir la borne inférieure de Hashin et Shtrikman, on prend $\underline{\underline{C}}^0$ égal à $\underline{\underline{C}}^a$ le tenseur d'élasticité de la phase amorphe (phase la plus molle). En revanche, pour la borne supérieure on ne peut pas utiliser directement le tenseur de rigidité de la phase cristalline. Il faut construire un tenseur qui soit supérieur quelle que soit la direction.

$$\underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{C}}^0 : \underline{\underline{\varepsilon}} \geq \underline{\underline{\varepsilon}} : \left(\underline{\underline{R}} : \underline{\underline{C}}(x) : \underline{\underline{R}}^{-1} \right) : \underline{\underline{\varepsilon}} \quad \forall x, \underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{R}} \quad (\text{III.100})$$

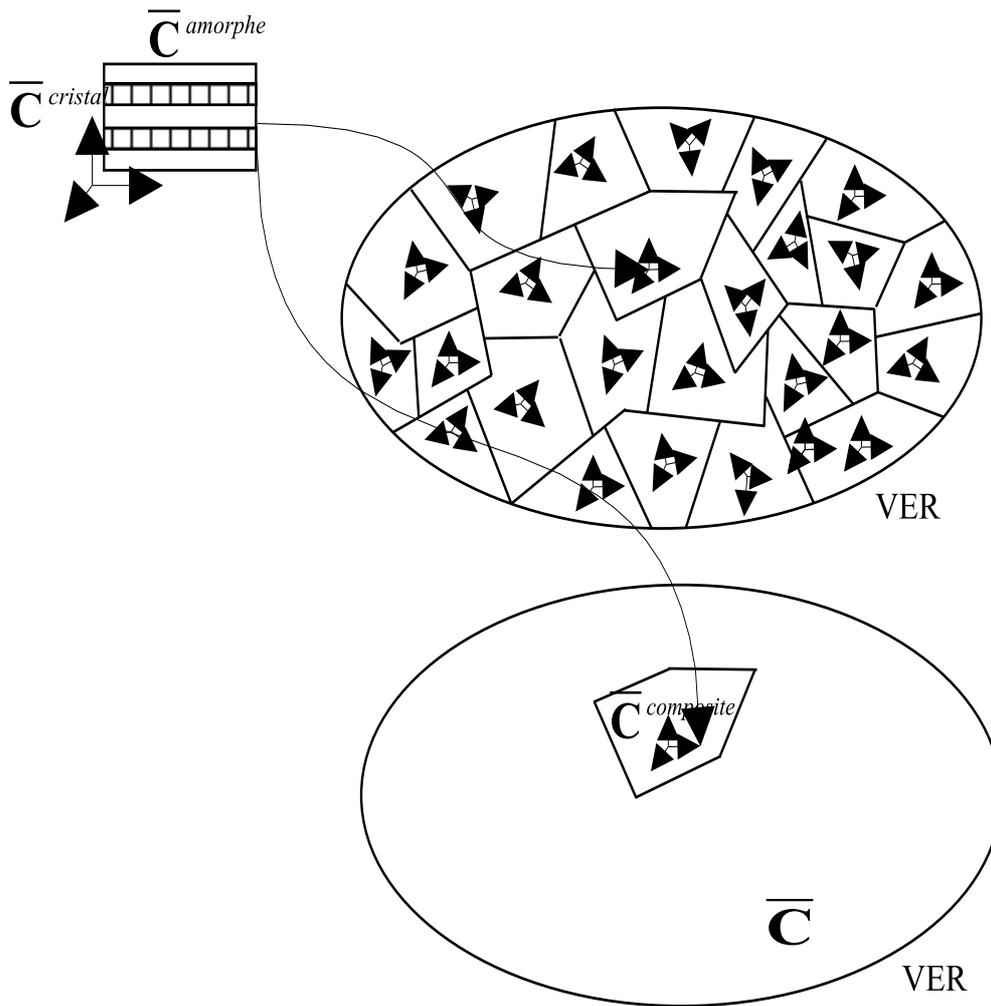


FIGURE III.8 – Principe du schéma auto-cohérent agrégat.

où $\underline{\underline{R}}$ est l'opérateur de rotation des tenseurs du quatrième ordre. Pour vérifier la condition de supériorité (au sens des formes quadratiques), il faut que les déterminants des sous matrices de $(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0)$ soient positifs.

III.4 Résultats

Nous n'avons pas fait d'essai de cristallisation thermique sur du PET. Ne disposant pas de données expérimentales, nous ferons référence aux valeurs rencontrées dans la littérature pour comparer les résultats des méthode d'homogénéisation "classique" avec les valeurs expérimentales.

III.4.1 Données expérimentales

Dans un premiers temps, les différents modèles sont comparés avec les résultats expérimentaux de Bédoui *et al.* [BED 06] qui donnent le module d'Young "E" du PET en fonction de la fraction volumique de cristaux "f" pour une température d'essai de 23°C (tableau III.1). Il faut noter que d'autres auteurs donnent des valeurs du module "E" très différentes de celles-ci, le PET peuvent ce présenté avec des grades assez divers. Pour du PET complètement amorphe, elles se situent aux alentours de 1 GPa pour les plus faibles et 3 GPa pour les plus élevés.

Module d'Young (MPa)	2600	2652	2838	3025	3390
Fraction volumique de cristaux (%)	0,5	2	25	32	41

TABLE III.1 – Module d'Young et fraction volumique de cristaux pour le PET à 23°C [BED 06].

Les valeurs des modules (en MPa) du tenseur de rigidité de la phase cristalline utilisées pour les estimations et les bornes sont les suivantes [RUT 97] :

$$\underset{\equiv}{C}^{cristal} = \begin{bmatrix} 118000 & 5070 & 5070 & 0 & 0 & 0 \\ 5070 & 7700 & 5460 & 0 & 0 & 0 \\ 5070 & 5460 & 7700 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2240 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3240 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3240 \end{bmatrix} \quad (\text{MPa}) \quad (\text{III.101})$$

Là aussi les valeurs rencontrées dans la littérature divergent ([HIN 96, MAT 90, RUT 97]). C'est essentiellement au niveau du module qui est dirigé suivant l'axe des chaînes (ici e_1) que l'on trouve la plus grande différence entre les publications. Pour la phase amorphe, le module d'Young est de 2,6 GPa et le coefficient de Poisson de 0,4.

III.4.2 Calcul des bornes

Pour le calcul de la borne supérieure de Hashin et de Shtrikman il faut tout d'abord déterminer le tenseur de rigidité du milieu de référence $\underline{\underline{C}}^0$. Le PET cristallisé thermiquement ayant un comportement global isotrope le milieu de référence sera pris isotrope. Les conditions sur les déterminants des sous-matrices de $(\underline{\underline{C}} - \underline{\underline{C}}^0)$ donnent six inéquations. Pour le choix de E^0 et de ν^0 , respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du milieu de référence, il suffit de prendre E^0 le plus petit possible tel que les six inéquations soient vérifiées. Dans le cas où le tenseur des modules de la phase cristalline est le tenseur $\underline{\underline{C}}^{crystal}$ donné précédemment, E^0 et ν^0 valent respectivement 114,1 GPa et 0,385. Les valeurs des bornes de Voigt et Reuss et de Hashin et Shtrikman ($HS+$ et $HS-$) sont données sur la figure III.9.

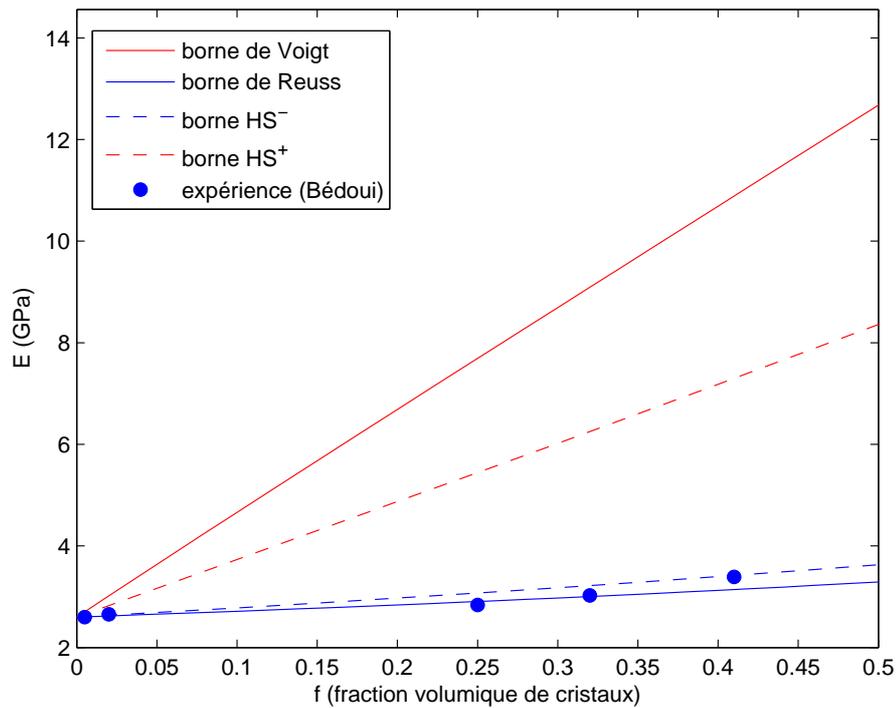


FIGURE III.9 – Bornes de Voigt, Reuss, Hashin, Shtrikman du module d'Young du PET.

Les bornes supérieures ($HS+$ et $Voigt$) sont loin des valeurs expérimentales de Bédoui *et al.*, elles constituent des encadrements supérieurs, mais très loin des valeurs expérimentales qui se placent plutôt au voisinage des bornes inférieures, et ne nous permettent pas de prévoir le comportement du PET cristallisé thermiquement (Fig.III.9). Un autre pro-

blème se pose, lorsque l'on observe les bornes inférieures (*HS-* et *Reuss*) certaines valeurs expérimentales sont en dessous de la borne inférieure de Hashin et Shtrikman (Fig.III.10). Par conséquent les valeurs qui seront obtenues, par les divers schémas utilisés, ne pourront pas coller aux valeurs expérimentales. La difficulté pour les modèles classiques à représenter le comportement du PET est sans doute liée aux hypothèses faites sur la description de la microstructure (matrice - inclusions). Cette description ne prend pas en compte l'influence des chaînes macromoléculaires qui font partie à la fois de la phase amorphe et de la phase cristalline.

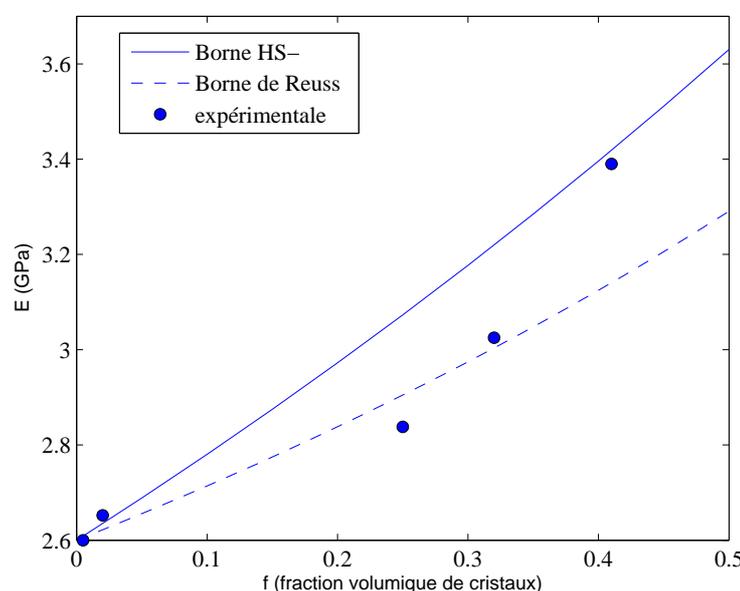


FIGURE III.10 – Bornes inférieures et valeurs expérimentales [BED 05] du module d'Young du PET.

Mais la modélisation micromécanique peut nous apporter des informations sur le durcissement que l'on observe au-delà de 25% de taux de cristallinité (Fig.III.10).

III.4.3 Modèle auto-cohérent (agrégat)

Nous présentons ici les résultats obtenus par le modèle présenté précédemment (Eq.III.97). Ce schéma permet de prendre en compte, dans une certaine mesure, la microstructure biphasée.

Comme pour la borne inférieure de Hashin et Shtrikman, seules les valeurs du module d'Young qui correspondent à des fractions volumiques de 0 et 41% sont proches des valeurs

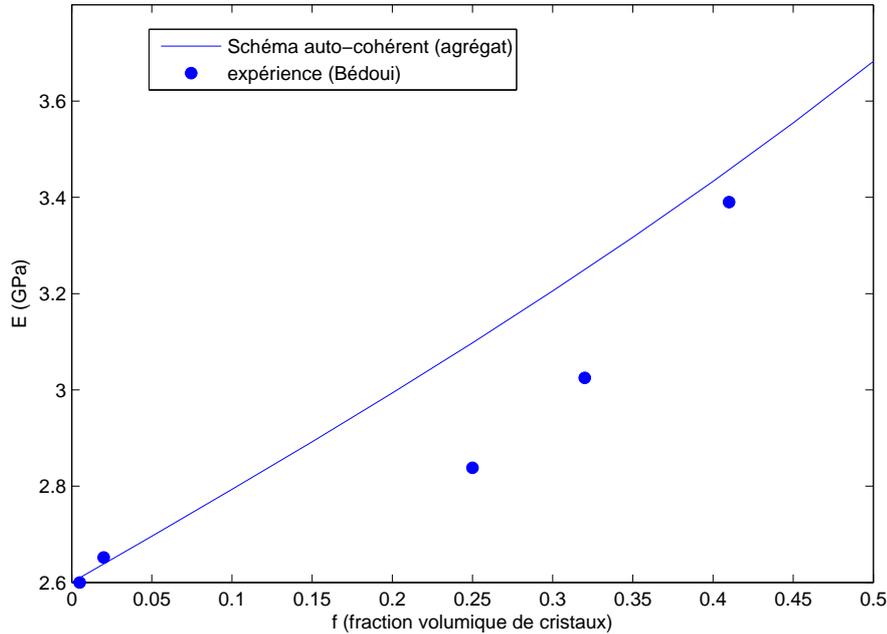


FIGURE III.11 – Module d'Young du PET obtenu par le schéma auto-cohérent (agrégat) et valeurs expérimentales [BED 05].

expérimentales. Ce schéma ne rend pas compte de la courbure de la courbe donnée par les valeurs expérimentales. En effet, avec le modèle en agrégat, la forme des inclusions doit être la même, c'est-à-dire avoir le même facteur de forme, et la même orientation, pour des inclusions sphéroïdales. Si l'on veut un comportement effectif isotrope, on ne peut donc pas avoir de variation du facteur de forme, et les inclusions restent sphériques quelque soit f . Pour faire apparaître la courbure nous devons donc faire évoluer la microstructure en fonction de la fraction volumique f .

III.4.4 Hypothèse sur l'évolution de la microstructure

Dans le cas d'une microstructure de type matrice-inclusions, les inclusions représentent les lamelles cristallines (Fig.III.6.a) ou le composite biphasé (Fig.III.6.b). Quelque soit le modèle, l'axe des chaînes moléculaires est dans la même direction que l'axe principal des inclusions sphéroïdales (Fig.III.4). Pour alléger les calculs, on ne prend pas en compte le fait que les mailles cristallines soient tricliniques. Les inclusions sphéroïdales sont décrites par un facteur de forme qui est le rapport de la longueur de l'axe principal sur la longueur des axes secondaires. Dans le cas des lamelles, la croissance se fait suivant les axes perpen-

diculaires à l'axe des chaînes (α décroît). Pour le composite, on suppose que la croissance se fait dans les trois directions mais principalement suivant l'axe principal (α croît). La taille des lamelles cristallines est donnée par Bédoui. La hauteur suivant l'axe des chaînes est de 13 nm et ne varie pas, mais la largeur suivant les axes secondaires varie de 26 nm à 31 nm pour une cristallinité comprise entre 25 et 41%. On peut voir le facteur de forme α des lamelles en fonction du taux de cristallinité (Fig.III.12). Il évolue très vite pour les faibles taux, et varie peu au-delà de 30%.

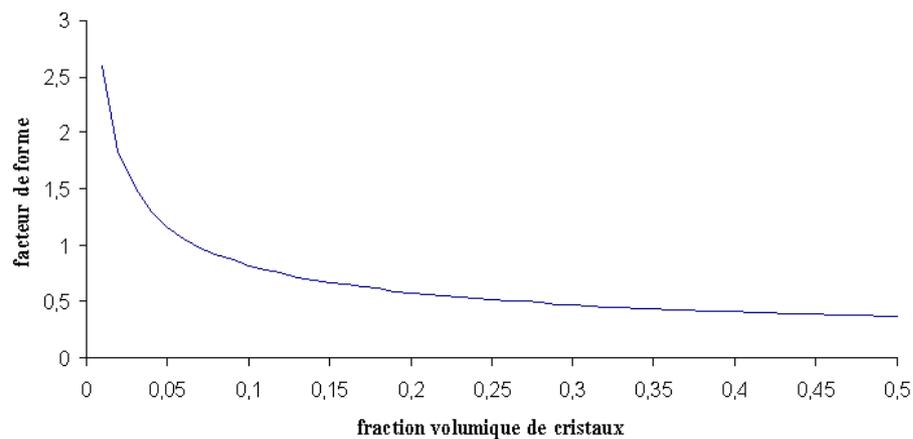


FIGURE III.12 – Facteur de forme des lamelles cristallines.

Concernant l'évolution du facteur de forme du composite biphasé, nous ne disposons pas de données expérimentales, il est raisonnable de considérer qu'il croît avec le taux de cristallinité ($\alpha > 1$ pour un taux de 40%).

III.4.5 Modèles avec microstructure en lamelle cristalline

Pour cette morphologie, nous avons appliqué les schémas différentiel et auto-cohérent et avons fait varier le facteur de forme α de 10^{-3} à 10^3 . Les résultats sont donnés figure III.13 et figure III.14.

Les deux surfaces obtenues sont presque identiques, sauf pour les valeurs du facteur de forme supérieures à 10^2 . Les résultats obtenus montrent bien l'importance du facteur de forme dans l'évolution du comportement mécanique du PET. Mais l'hypothèse prise

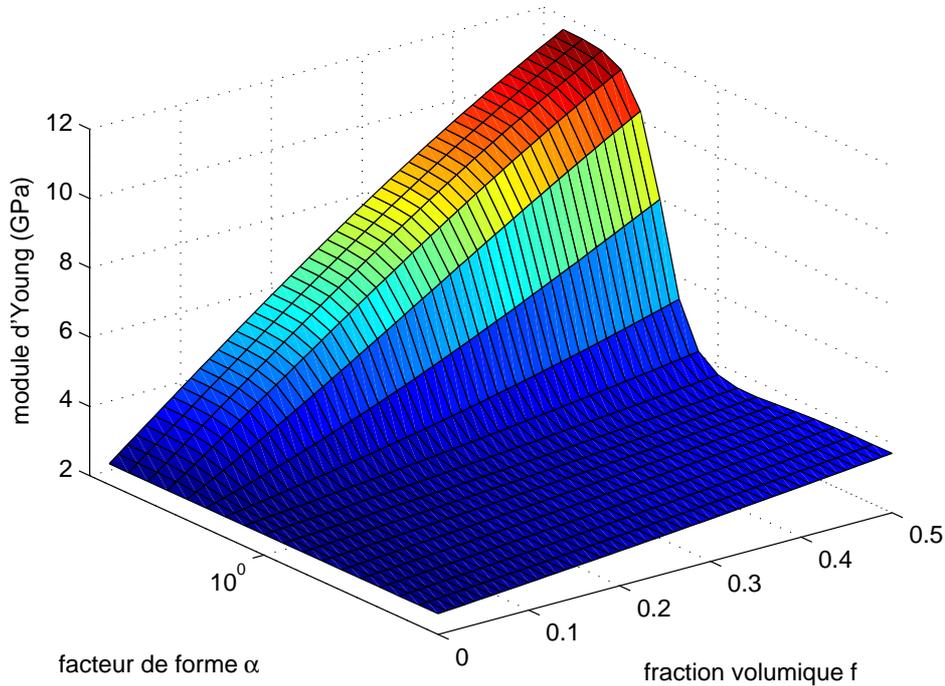


FIGURE III.13 – Module d'Young du PET estimé par le schéma différentiel pour une microstructure en lamelle.

sur la variation du facteur de forme ($\alpha < 1$) ne permet pas d'obtenir le galbe observé sur la courbe des valeurs expérimentales du module d'Young.

III.4.6 Modèles avec microstructure multicouche biphasée

Les mêmes schémas qu'au chapitre précédent ont été appliqués à la microstructure multicouche biphasée (phases amorphe et cristalline). Dans le biphasé, il y a 45% de phase cristalline. La différence avec la microstructure en lamelle est que la fraction volumique d'inclusion atteint 100%, pour obtenir un taux de cristallinité de 45%. Le tenseur de rigidité du multicouche est calculé à l'aide de l'équation III.66. Les résultats obtenus sont donnés figure III.15 et figure III.16. L'allure des surfaces obtenues est similaire à celles présentées précédemment. La différence se trouve au niveau des valeurs du module d'Young quand le facteur de forme α devient supérieur à 1.

Ici, l'hypothèse d'un facteur de forme croissant avec le taux de cristallinité autorise un galbe de la courbe E/f . En revanche, si α atteint des valeurs comprises entre 5 et 10 les modules calculés (pour les deux schémas) sont supérieurs aux valeurs expérimentales. Il

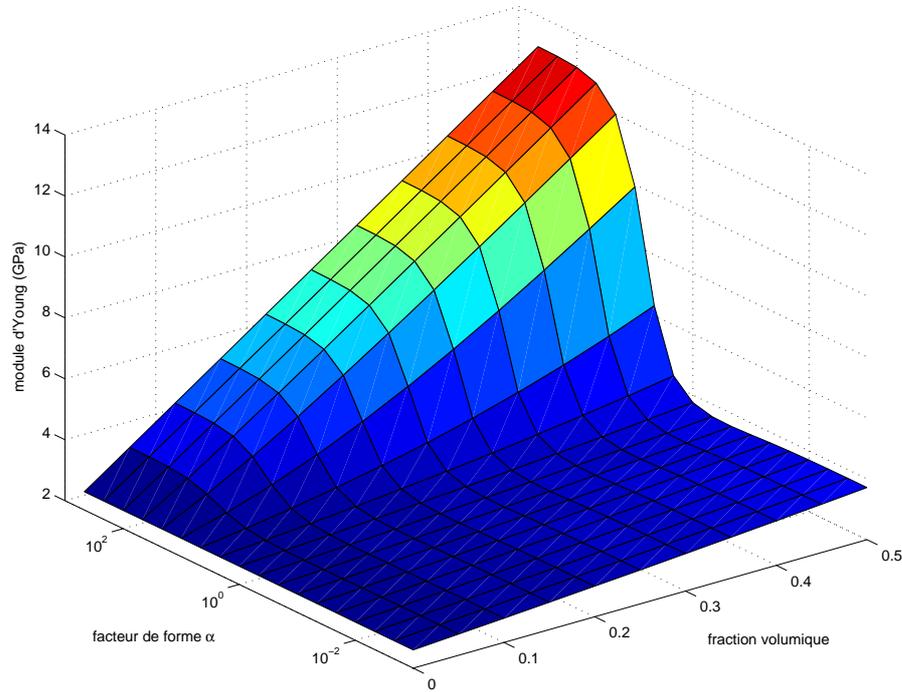


FIGURE III.14 – Module d'Young du PET estimé par le schéma auto-cohérent pour une microstructure en lamelle.

est difficile de représenté le comportement du PET avec les méthodes "classiques" d'homogénéisation, il faut coupler ces méthodes avec une approche probabiliste pour éviter les problèmes liés aux dispersions des valeurs expérimentales.

III.4.7 Problème de dispersion sur les valeurs expérimentales

Dans la littérature, il existe une forte dispersion sur les valeurs expérimentales du module d'Young du PET amorphe. Douze valeurs du module d'Young comprises entre 0,97 GPa et 3,16 GPa ont été trouvées et récapitulées dans le tableau suivant.

Considérons maintenant E (Module d'Young) comme une variable aléatoire réelle. Avec les données obtenues précédemment, nous pouvons déterminer la loi de probabilité de E . D'après le principe du maximum d'entropie, E suit une loi Gamma (Fig.III.17) de paramètres \overline{E}, σ_E^2 [CHE 06]. On peut estimer la moyenne et la variance liées aux valeurs expérimentales du module d'Young : $\overline{E} = 1,91$ GPa et $\sigma_E^2 = 0,4439$.

La loi Gamma pour une variable aléatoire X est définie à l'aide de sa moyenne \overline{X} et

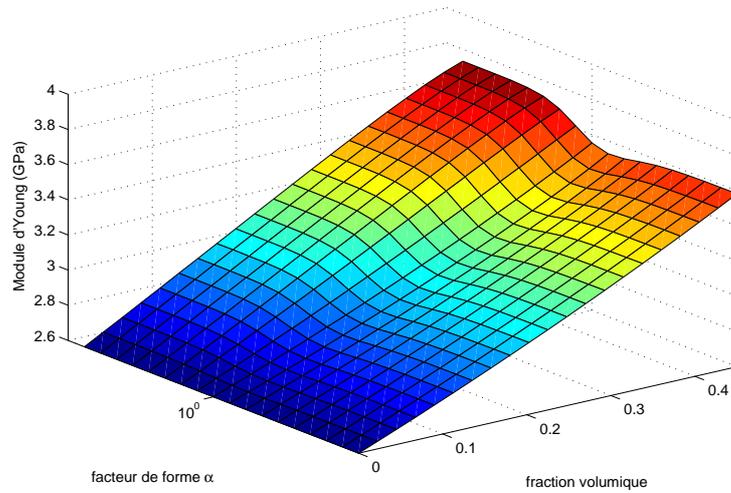


FIGURE III.15 – Module d'Young du PET estimé par le schéma différentiel pour une microstructure multicouche biphasé.

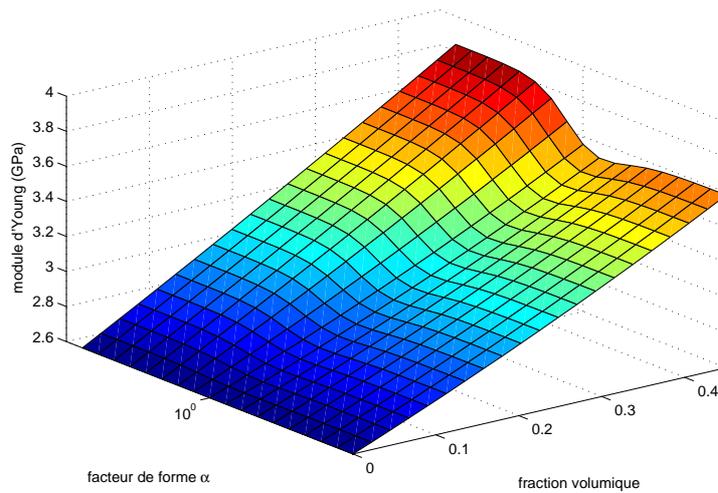


FIGURE III.16 – Module d'Young du PET estimé par le schéma auto-cohérent pour une microstructure multicouche biphasé.

de sa variance σ_X^2 . La densité de probabilité est donnée par :

$$f_X(x) = \frac{1}{b^a \Gamma(a)} x^{a-1} e^{-x/b} \quad (\text{III.102})$$

La fonction de répartition est donnée par :

Module d'Young (GPa) de la phase amorphe et référence correspondante	
2,2	U. Göschel [GOS 92]
2	U. Göschel [GOS 96]
1,2	L. Chevalier <i>et al.</i> [CHE 99]
2,6	F. Bédoui <i>et al.</i> [BED 06]
2,6	W. Loyens <i>et al.</i> [LOY 02]
2	A. Ajji <i>et al.</i> [AJJ 96]
3,16	A. Flores <i>et al.</i> [FLO 05]
0,97	L. Carpaneto <i>et al.</i> [CAR 99]
1,5	G.P. Karayannidis <i>et al.</i> [KAR 03]
2,14	N. Torres <i>et al.</i> [TOR 00]
1,44	D.P.R. Kint <i>et al.</i> [KIN 02]
1,1	X.F. Lu <i>et al.</i> [LU 01]
1,91	Moyenne des modules d'Young de la phase amorphe.
0,4439	Variance.

TABLE III.2 – Module d'Young du PET dans la littérature.

$$F_X(x) = \frac{1}{b^a \Gamma(a)} \int_0^x t^a e^{-t/b} dt \quad (\text{III.103})$$

Où

$$\Gamma(a) = \int_0^x t^{a-1} e^{-t} dt; \quad a.b = \bar{X}; \quad a.b^2 = \sigma_X^2 \quad (\text{III.104})$$

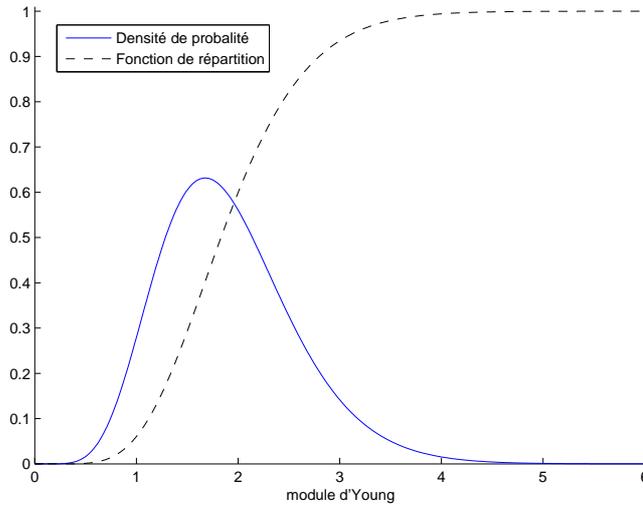


FIGURE III.17 – Densité de probabilité et fonction de répartition de la variable aléatoire E .

Sur la figure III.17 nous voyons que pour des valeurs de E supérieures à 5, la probabilité est quasiment nulle. Pour les valeurs de E inférieures à 0,4 la probabilité est aussi proche de zéro. En ce qui concerne le coefficient de Poisson, sa variation a peu d'influence sur le comportement global du PET cristallisé. Il sera donc pris égal à 0,4. Contrairement à la phase amorphe, les valeurs du tenseur de rigidité de la phase cristalline, sont sensiblement constantes dans la littérature. Le tenseur de rigidité sera donc considéré déterministe et sa valeur utilisée pour les calculs sera la même que précédemment.

III.4.7.1 Détermination de la loi de probabilité du PET homogénéisé

Nous avons vu que les modèles auto-cohérent et différentiel donnaient presque les mêmes résultats. Pour minimiser les temps de calcul, nous utiliserons le schéma auto-cohérent (avec inclusion multicouche). Dans notre problème, il n'y a qu'une seule variable aléatoire, dont nous connaissons analytiquement sa loi de probabilité. Cela va nous permettre de trouver rapidement la loi de probabilité du module d'Young du PET homogénéisé (E^{hom}). En effet, d'après le théorème suivant : Si K une variable aléatoire à valeur dans \mathfrak{R} de loi $P_K(dk) = p_K(k)dk$, et Y une autre variable aléatoire à valeur dans \mathfrak{R} de loi $P_Y(dy) = p_Y(y)dy$ tel que :

$$\begin{aligned}
 k &\mapsto g(k) = y \\
 \mathfrak{R} &\mapsto \mathfrak{R}
 \end{aligned}
 \tag{III.105}$$

Où g est bijective et g^{-1} existe et est de classe C^1 . Alors :

$$p_Y(y) = p_K(g^{-1}(y)) \left| \frac{dg^{-1}(y)}{dy} \right|
 \tag{III.106}$$

Il reste donc à déterminer la fonction qui relie le module d'Young de la phase amorphe (E) au module d'Young du PET partiellement cristallisé (E^{hom}). Cette dernière étape se fera numériquement. On se limitera à $E \in]0; 7]$, car au delà de 7 la densité de probabilité de E est quasiment nulle ($< 10^{-10}$). Les résultats sont représentés sur la figure III.18, où nous pouvons voir le module d'Young moyen, les bornes à 95% et 5% de la fonction de répartition, cela pour différentes valeurs du facteur de forme (α). Nous voyons bien ici, qu'une grande dispersion des valeurs d'entrées entraîne une sur les valeurs de sorties. Effectivement si les bornes à 5% et 95% sur le PET amorphe sont très éloignées, elles le restent sur le PET homogénéisé. Nous voyons sur la figure III.18.d que les valeurs expérimentales obtenues par Bédoui *et al.* sont comprises entre la valeur moyenne de E et la borne à 95%.

Précédemment nous avons traité de la cristallisation d'origine thermique (isotrope). Dans la suite de cette partie nous développons des outils appliqués à la cristallisation d'origine mécanique (anisotrope).

III.5 Modèle isotrope transverse

Lors du procédé de soufflage des bouteilles en PET, la microstructure du matériau évolue, elle part d'un état isotrope quasiment amorphe pour arriver dans un état fortement anisotrope avec une concentration de cristaux pouvant atteindre près de 40%. Le matériau final est orthotrope, dans le cas du soufflage une ou deux directions sont fortement étirées, alors que la troisième direction subit une très forte contraction. La valeur des propriétés mécaniques dans cette dernière direction a très peu d'influence sur le comportement global de la bouteille.

Afin de simplifier les calculs du comportement effectif, nous faisons l'hypothèse que le

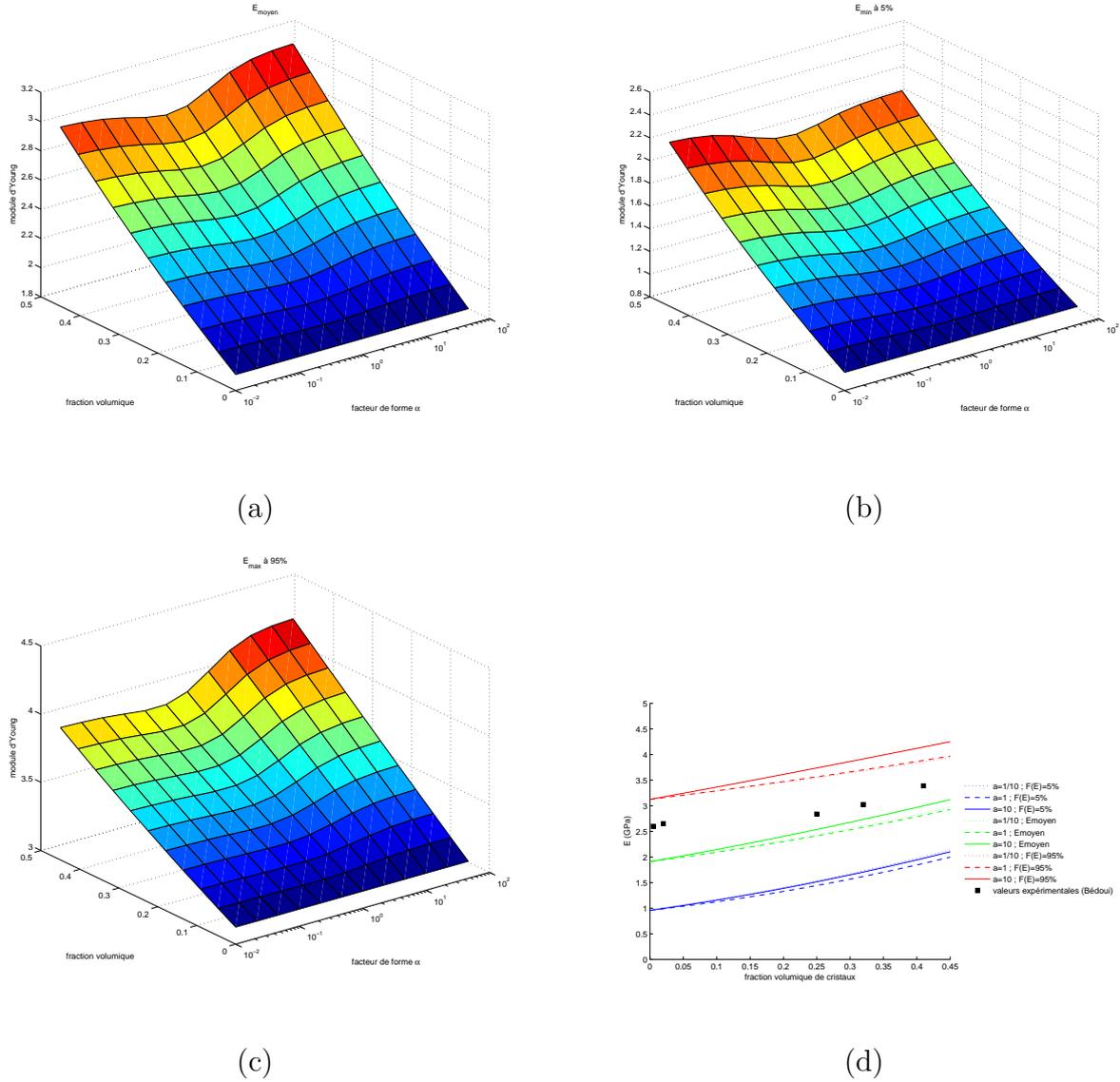


FIGURE III.18 – Estimation du module d'Young par le modèle auto-cohérent (a) E_{moyen} ; (b) E_{min} ($F_E = 5\%$); (c) E_{max} ($F_E = 95\%$); (d) coupe des surfaces a, b, c.

comportement du matériau est isotrope transverse. Nous privilégions seulement deux directions, celles dont les déformations principales sont les plus grandes. Dans le cas du procédé d'étirage-soufflage, il s'agit des directions circonférentielle et longitudinale. L'identification des modules dans l'épaisseur est très délicate et sans conséquence sur un calcul d'enveloppes minces. Nous supposons que les propriétés de la troisième direction sont égales à celles de la deuxième.

Le PET est modélisé comme un composite matrice-inclusions, où la matrice représente la

phase amorphe et les inclusions représentent les cristaux. Les cristaux ayant des propriétés élastiques (Eq.III.101) et une géométrie isotrope transverse [RUT 97], ils sont modélisés par des inclusions sphéroïdales (ellipsoïdes de révolution).

Les calculs d'homogénéisation sont basés sur un modèle (Eq.III.110) proposé par Walpole [WAL 81] et modifié par Federico *et al.* [FED 04]. Les deux modèles sont dérivés du problème d'Eshelby [ESH 57], qui donne la solution pour les champs de contrainte et de déformation dans une matrice isotrope infinie dans laquelle une inclusion ellipsoïdale est noyée. La solution exacte est connue pour une inclusion sphéroïdale au comportement isotrope transverse, dont l'axe d'isotropie transverse est confondu avec l'axe de symétrie de l'inclusion. La déformation dans l'inclusion est donnée en fonction de la déformation imposée à l'infini (Eq.III.107).

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{A}} \underline{\underline{\varepsilon}}^\infty \quad (\text{III.107})$$

$$\underline{\underline{A}} = \left[\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{S}} : \left(\underline{\underline{C}}_0^{-1} : \underline{\underline{C}}_i - \underline{\underline{I}} \right) \right]^{-1} \quad (\text{III.108})$$

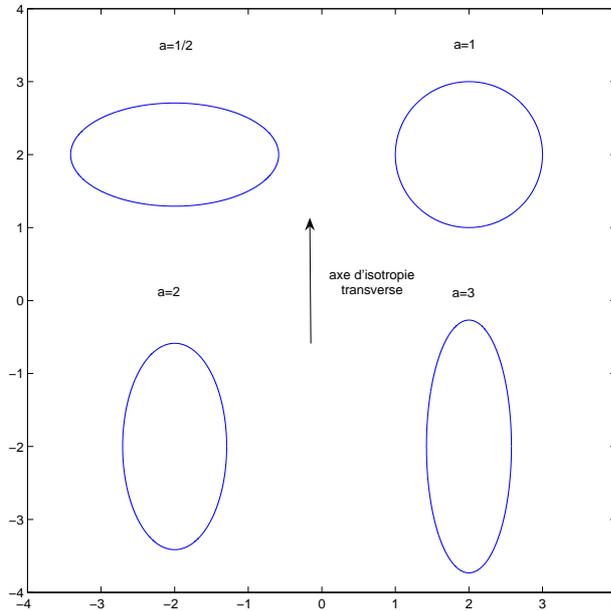


FIGURE III.19 – Différents facteurs de forme.

$\underline{\underline{A}}$ est le tenseur de localisation de la déformation, $\underline{\underline{C}}_0$ et $\underline{\underline{C}}_i$ sont respectivement les tenseurs d'élasticité de la matrice et de l'inclusion, $\underline{\underline{I}}$ est le tenseur identité dans l'espace

des tenseurs d'ordre 4 symétriques et $\underline{\underline{S}}$ est le tenseur d'Eshelby [FED 04], qui ne dépend que du coefficient de Poisson de la matrice et du facteur de forme de l'inclusion (Fig.III.19).

$$\underline{\underline{C}} = \left[\sum_{r=0}^N c_r \underline{\underline{C}}_r : \underline{\underline{A}}_r \right] : \left[\sum_{r=0}^N c_r \underline{\underline{A}}_r \right]^{-1} \quad (\text{III.109})$$

$$\sum_{r=0}^N c_r = 1 \quad (\text{III.110})$$

L'équation III.110 donne une estimation du tenseur d'élasticité du milieu effectif pour un mélange de $N + 1$ phases (La phase 0 étant la matrice). Pour la matrice, le tenseur d'Eshelby vaut l'identité. Chacune des N phases est composée d'inclusions identiques : elles ont les mêmes orientation, facteur de forme et propriétés élastiques. c_r donne la fraction volumique de chacune des phases. Dans le cas du PET bi-étiré nous avons une répartition statistique (non périodique) des cristaux.

Précédemment nous avons fait l'hypothèse d'isotropie transverse, nous considérons donc cette répartition isotrope transverse également. L'orientation d'une inclusion est paramétrée par deux angles (θ et φ), comme cela est illustré dans la figure III.4. Dans notre cas, si nous réalisons une moyenne des inclusions par rapport à leur distribution, nous obtenons une inclusion unique isotrope transverse et de forme sphéroïdale et l'équation III.110 se réécrit de la manière suivante :

$$\underline{\underline{C}} = \left[(1 - c) \underline{\underline{C}}_0 + c \int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \underline{\underline{C}}_i : \underline{\underline{A}}_i \, d a \right] : \left[(1 - c) \underline{\underline{I}} + c \int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \underline{\underline{A}}_i \, d a \right]^{-1} \quad (\text{III.111})$$

$$\int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \, d a = 1 \quad (\text{III.112})$$

\mathbb{S}^{2+} est la demi sphère unité qui décrit toutes les orientations dans l'espace à 3 dimensions. ψ est la densité de probabilité de l'orientation d'une inclusion et c est la fraction volumique de cristaux.

III.5.1 Densité de répartition

L'isotropie transverse impose à ψ d'être invariable par rapport à φ ($\psi(\theta, \varphi) = \psi(\theta)$), une façon de construire ces densités est présentée dans [JOH 98] dans le cas discret. Nous proposons ici une densité de probabilité qui depend des valeurs principales de la

déformation (Fig.III.20). Dans le cas où le matériau n'est pas étiré, il est isotrope et la densité de probabilité ne dépend pas de l'orientation ($\psi(\theta) = 1/2\pi$). Dans le cas où il est étiré, la densité de probabilité s'écrit :

$$\psi(\theta) = \frac{g(\theta)}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} g(\theta') \sin(\theta') d\theta' d\varphi'} \quad (\text{III.113})$$

$$\text{avec } g(\theta) = (1 - \chi_e^2) \left(1 + \exp\left(\frac{\theta - \frac{\pi}{2}\chi_e^{1/2}}{\chi_e^2}\right) \right)^{-1} + \chi_e^2 \quad (\text{III.114})$$

$$\chi_e = \exp(\beta_e (\varepsilon_{II} - \varepsilon_{III})) \quad \text{avec } \varepsilon_I \leq \varepsilon_{II} \leq \varepsilon_{III} \quad (\text{III.115})$$

Où les ε_k ($k = I, II, III$) sont les valeurs principales de la déformation et χ_e est une fonction qui représente l'orientation : $\chi_e = 1$ le matériau n'est pas étiré et est isotrope, $\chi_e = 0$ tous les cristaux sont orientés dans la même direction.

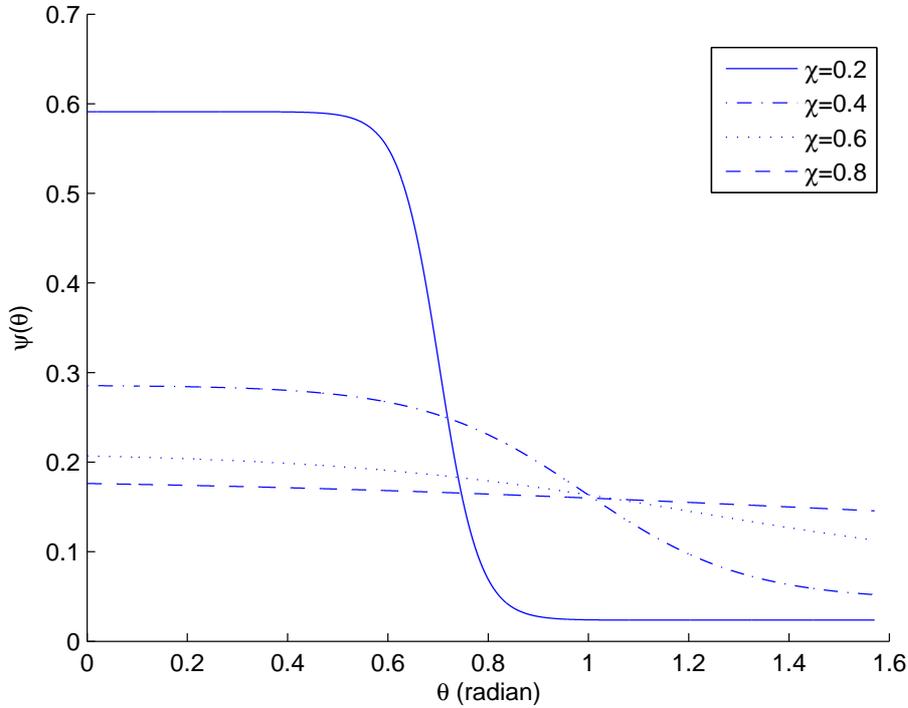


FIGURE III.20 – $\psi(\theta)$ pour différentes valeurs de χ_e .

III.5.2 Influence du facteur de forme

La figure III.21 montre l'influence du facteur de forme sur les modules effectifs du milieu homogénéisé. Plus le facteur de forme est élevé plus les propriétés suivant le plan d'isotropie transverse et l'axe d'isotropie transverse sont différentes. Le facteur de forme devient un paramètre du modèle (Eq.III.112) qu'il faut pouvoir identifier.

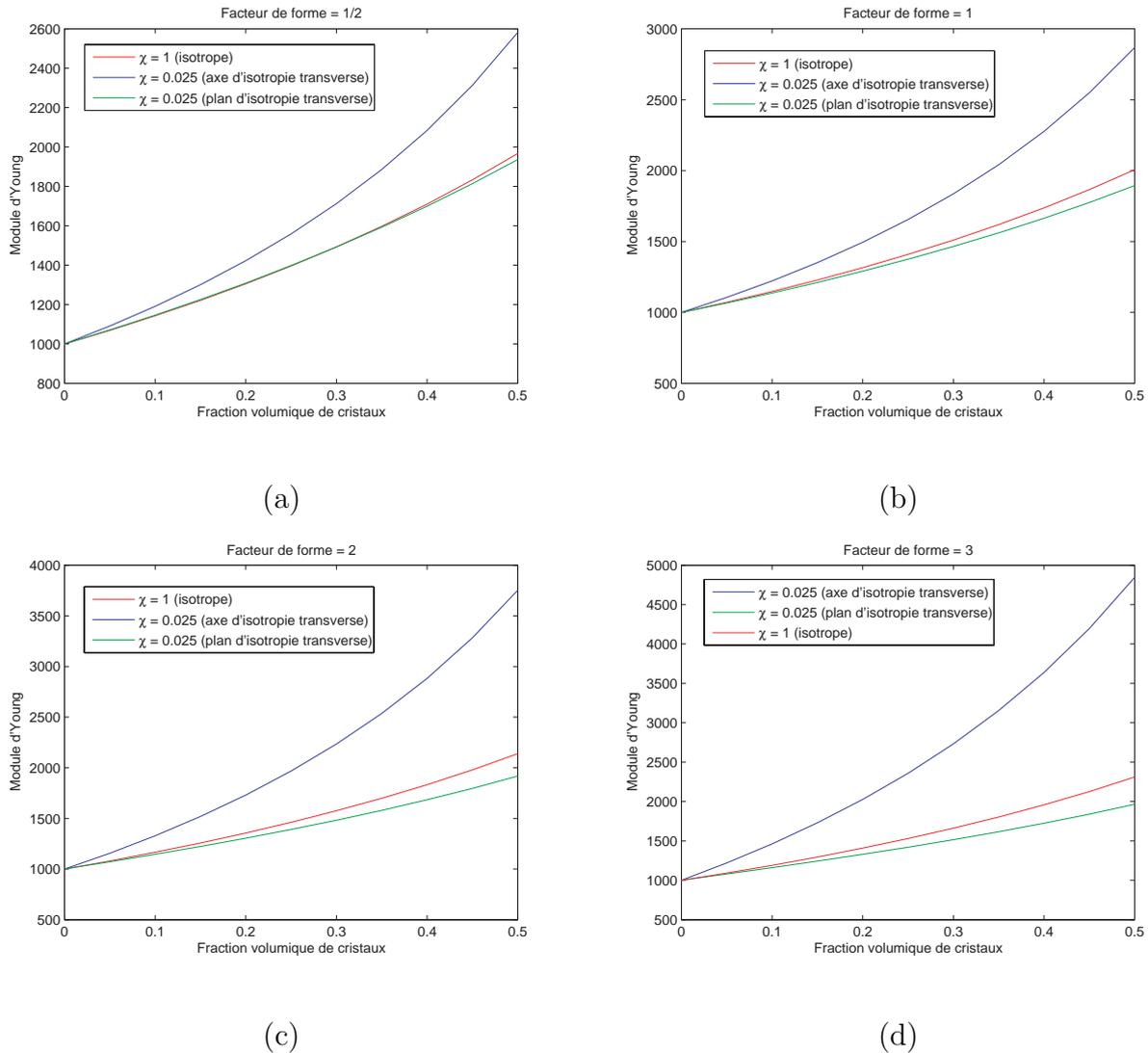


FIGURE III.21 – Estimation du module d'Young pour différentes valeurs du facteur de forme des inclusions.

L'identification de la valeur du facteur de forme avec les résultats de mesures de module donnés au chapitre II, donne un facteur de forme $\alpha = 5$ pour un coefficient β_e de 2. Les indications données sur le facteur de forme sur la figure III.12 ne sont valables

que dans le cas de la cristallisation thermique (isotrope). Les résultats du modèle de l'équation III.112 sont comparés avec les valeurs expérimentales sur la figure III.22.a en fonction de la cristallinité et sur la figure III.22.b en fonction de l'orientation (χ_e). Dans ce calcul nous supposons un module d'Young de la phase amorphe égal à 2 GPa. Les estimations données par le schéma d'homogénéisation anisotrope sont quasiment égales aux mesures expérimentales.

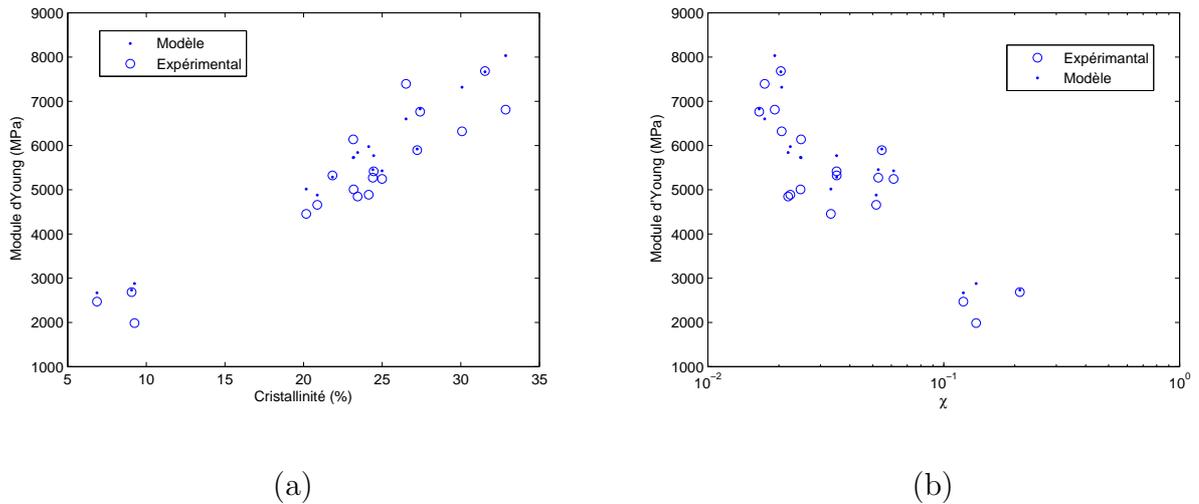
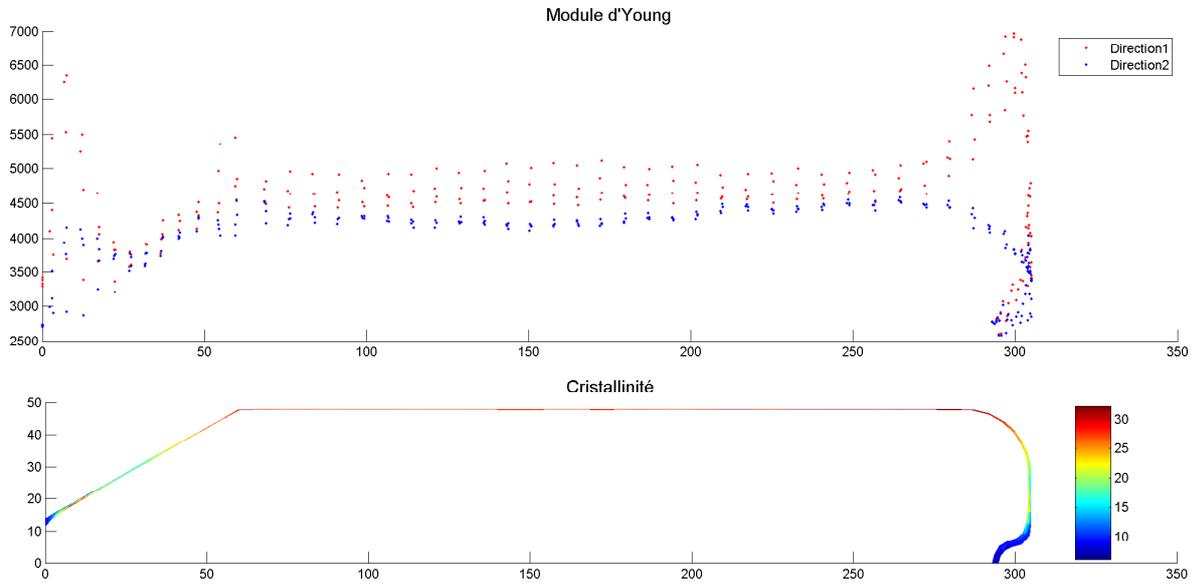


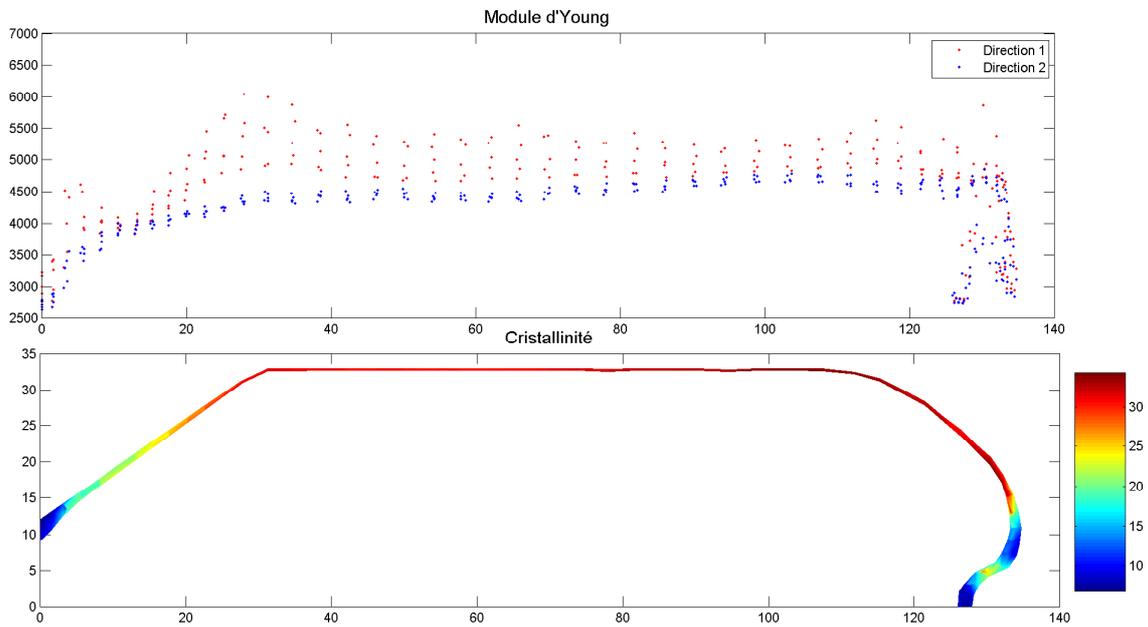
FIGURE III.22 – Estimation du module d'Young (a) en fonction de la cristallinité, (b) en fonction de l'orientation.

III.6 Application à la conception de bouteilles

Le modèle d'homogénéisation anisotrope proposé précédemment permet de prédire le comportement mécanique de matériau ayant une microstructure complexe. Avec le modèle de comportement visqueux proposé dans le chapitre II, nous sommes capable de simuler complètement le procédé de fabrication de bouteille (de la préforme à la mise en service de la bouteille). Ayant la connaissance de la géométrie finale et la répartition des cristaux (orientation et taux de cristallinité) des bouteilles nous pouvons effectuer un calcul de structure à température ambiante, le PET est alors dans un état solide élastique. La loi de comportement anisotrope proposée dans le paragraphe III.5 est utilisée. Les données d'entrée du modèle sont l'orientation et le taux de cristallinité issue du calcul visqueux figure II.28 effectué au chapitre II. En chaque nœuds du maillage nous connaissons les propriétés élastiques anisotropes du matériau (Fig.III.23). Sur la figure III.23, dans la



(a)



(b)

FIGURE III.23 – Représentation des modules d'Young suivant les directions principales 1 et 2 dans (a) la bouteille de 2 L, (b) la bouteille de 0,33 L.

partie cylindrique des bouteille, la direction 1 correspond à la direction circonférentielle et la direction 2 correspond à la direction longitudinale. On remarque que le module dans la direction circonférentielle varie fortement dans l'épaisseur, alors que le module dans la direction longitudinale ne dépend pas du rayon. La connaissance des modules élastiques permet, à l'aide de logiciel existant, de faire des calculs de flambage ou encore de résistance et ainsi valider la conception d'une bouteille sans faire une multitude de tests réels (Fig.III.24).

En parallèle de ce travail de thèse, un stage de master a permis de mettre en évidence le caractère anisotrope du PET dans les bouteilles finies. À l'aide de l'outil de corrélation d'image "Corelli" des mesures de déformation sont faites à la surface d'une bouteille de 2L, d'une célèbre boisson, soumise à une pression interne. Les valeurs des modules mesurées sont les mêmes que celles présentées dans [CHE 99], soit 2,4 GPa dans le sens longitudinal et 3,6 GPa dans le sens circonférentiel pour un modules de la phase amorphe de 1,2 GPa.

En exemple d'application, nous avons étudié la mise sous pression de bouteille et leurs variations de forme. En effet, le PET est fortement utilisé pour le stockage des boissons gazeuses, la forme des bouteilles ne doit pas changer quelque soit le niveau de pression dans la bouteille. La figure III.25 montre la bouteille de 2 L et de 0,33 L soumises à une pression interne de 4 bars. On remarque que la bouteille de 0,33 L garde le même aspect, mais la bouteille de 2 L se déforme beaucoup dans le fond. Ceci est dû à son fond plat et à sa forme axisymétrique.

III.7 Conclusion partielle

Dans un premier temps nous nous sommes concentrés sur le cas isotrope, avec le modèle "classique", ce qui peut être une première approximation dans le cas de la cristallisation thermique. Cette première étape ne donnant pas entière satisfaction lors de la comparaisons avec les mesures de module, nous avons proposé un modèle qui permet de modéliser le comportement élastique du PET étiré. Le modèle proposé représente bien les résultats expérimentaux, la micromécanique nous montre l'importance de la microstructure dans la modification de comportement du PET lors de la cristallisation. Avec ces modèles "classique" nous ne prenons pas en compte les effets de taille des cristaux et de confinement de la phase amorphe.

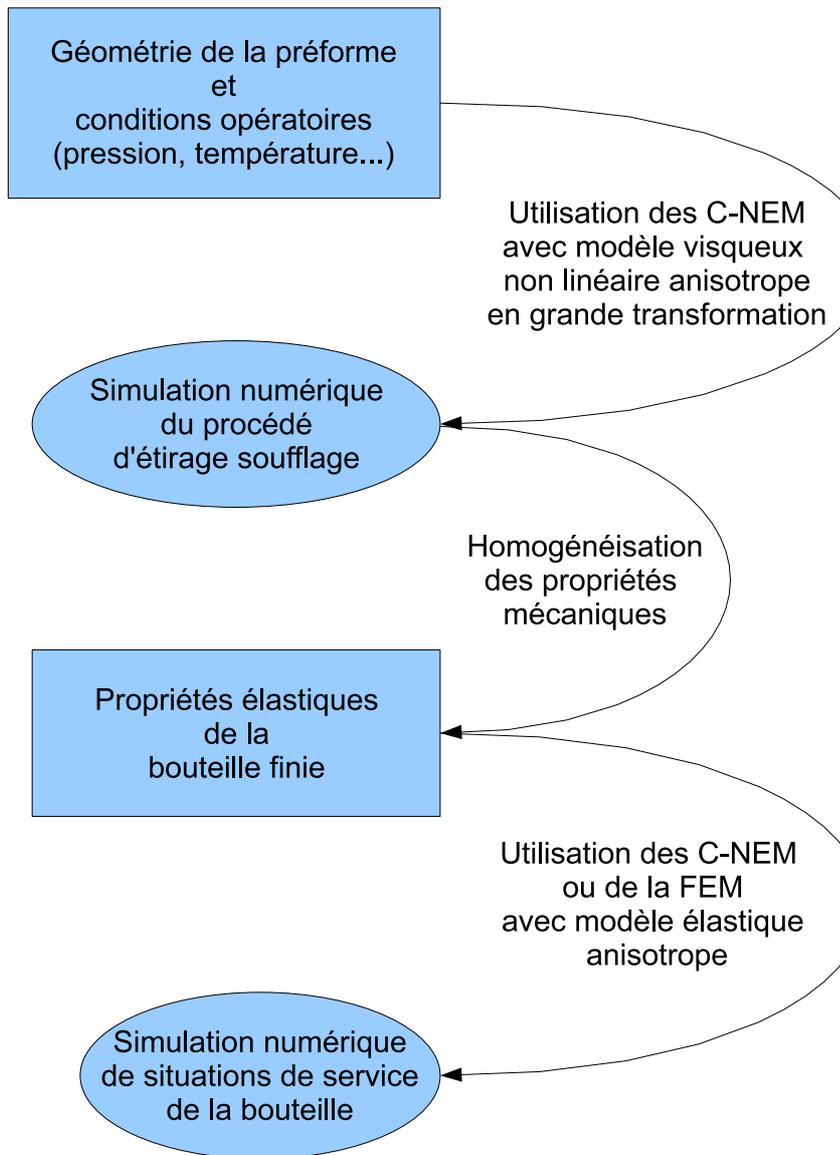


FIGURE III.24 – Conception de bouteilles.

Au début de ce chapitre, nous avons fait l'hypothèse que le PET était constitué de deux phases homogènes. Mais la phase amorphe contenue entre les lamelles cristallines (mésophase) a certainement un comportement mécanique différent de celui de la phase amorphe qui se trouve à l'extérieur des sphérolites. Les résultats ne prennent pas en compte la présence de cette mésophase (phase amorphe rigide) entre les lamelles cristal-

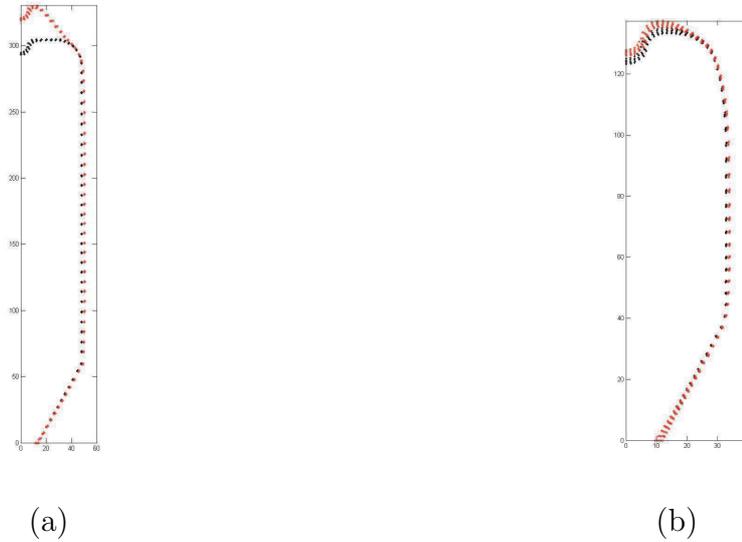


FIGURE III.25 – Résistance à une pression interne pour (a) la bouteille de 2 L, (b) la bouteille de 0,33 L.

lines. Son introduction peut se faire aisément dans les modèles différentiel, auto-cohérent et orthotrope si on utilise la microstructure avec multicouche biphasé. Ceci en remplaçant la phase amorphe molle par la phase amorphe rigide dans le multicouche (Fig.III.5). Androsch *et al.* [AND 05] donnent les concentrations de cette mésophase en fonction du taux de cristallinité (Fig.III.26). Une prochaine étape dans l'homogénéisation des propriétés mécaniques du PET est de prendre en compte la mésophase.

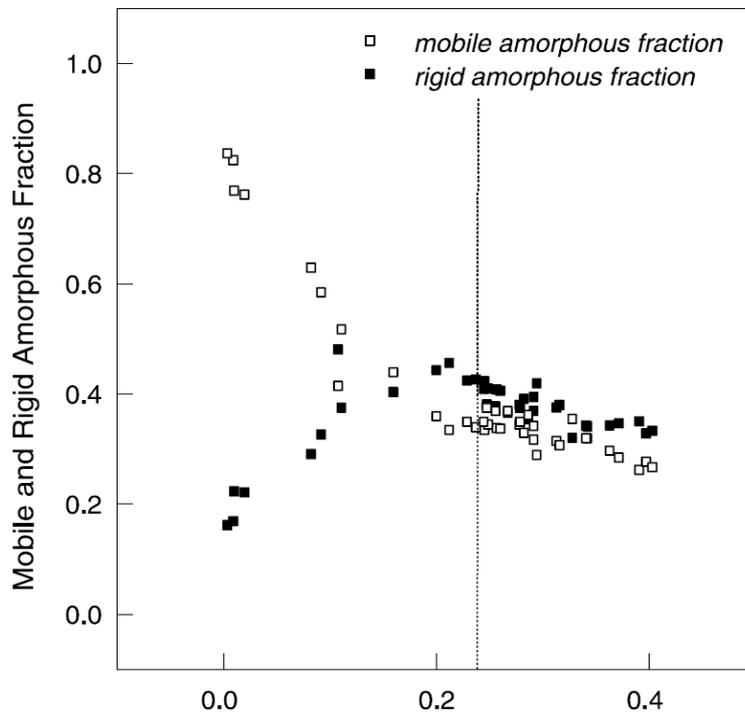


FIGURE III.26 – Mésophase et phase amorphe en fonction du taux de cristallinité Androsch et al..

Chapitre IV

Conclusions et Perspectives

IV.1 Conclusions

Pendant cette thèse, les recherches sur le comportement mécanique du PET se sont orientées vers une application à la simulation numérique du procédé d'étirage-soufflage. Pour cela nous avons utilisé et développé un logiciel de simulation numérique. Ce logiciel utilise une technique dite "meshless" particulièrement adapté à la simulation des procédés de fabrication en grande déformation : les C-NEM. Le logiciel nous permet de réaliser la simulation complète du procédé d'étirage-soufflage avec des déformations supérieures à 300% dans chacune des directions longitudinale et axiale. La gestion du contact avec le moule et la tige d'étirage et les échanges thermique ont été implémentés. Bien que 2D, les simulations sont donc très réalistes.

Le modèle de comportement mécanique utilisé dans le logiciel prend en compte l'anisotropie du matériau et l'évolution de sa microstructure. En effet, nous sommes capable de prédire en tous points d'une bouteille le taux de cristallinité et l'orientation de sa microstructure. Avec la connaissance de la microstructure du matériau, nous pouvons calculer la résistance mécanique de la bouteille dans diverses conditions d'utilisation et ainsi valider sa conception. Les calculs de rigidité mécanique ont été réalisés en utilisant un modèle élastique anisotrope issue de la micromécanique. Ce modèle tient compte de l'orientation et du taux de cristallinité obtenue pendant la simulation du procédé d'étirage-soufflage.

À chaque étape :

1. soufflage de la préforme
2. homogénéisation des propriétés élastiques
3. rigidité de la bouteille

la modélisation est comparée avec succes à des résultats expérimentaux. Nous avons effectué des essais (à $T > T_g$) de traction interrompus, cela nous à donné l'information sur la microstructure tout au long de la déformation. Nous avons relié l'état de déformation à la microstructure et proposé un modèle de cristallisation induite qui tient compte d'un taux de cristallinité initiale. Sur les mêmes échantillons nous avons mesuré le module d'Young ($T=20^\circ\text{C}$) pour connaître l'effet de la cristallisation induite sur les propriétés mécaniques du PET à température ambiante. L'anisotropie des bouteilles est montrée et comparée avec des mesures optiques.

Chacune des trois étapes pourrait faire l'objet de 3 thèses à venir. Il y a du travail de développement pour rendre l'outil encore plus fiable.

IV.2 Perspectives

Le modèle mécanique viscoplastique pour le PET reproduit très bien le comportement des bouteilles lors du procédé d'étirage-soufflage et nous donne des informations sur la microstructure du PET à la fin des procédés de fabrication.

Nous proposons ici les pistes pour une modélisation viscoélastique, plus réaliste pour un polymère, et capable de prendre en compte les effets de retour élastique que l'on observe expérimentalement lorsqu'on stoppe brutalement la pression.

IV.2.1 Vers une modélisation plus fine (viscoélastique)

Pour la suite nous utilisons un modèle de Maxwell en grande transformation. Bien que la dérivée d'Oldroyd soit couramment utilisée dans la description du comportement des polymères, elle ne permet pas de décrire celui du PET dans le cas de la traction uniaxiale dans la plage des vitesses parcourues. Nous utilisons plutôt la dérivée de Jaumann, qui rend mieux compte des phénomènes observés (notamment de l'effet rhéofluidifiant en cisaillement). Le modèle utilisé est donc le suivant :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2G} \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \frac{1}{2\eta} \underline{\underline{S}} &= \underline{\underline{D}} \\ \underline{\underline{S}} &= \underline{\underline{\sigma}} + p \underline{\underline{I}} \\ \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} &= \frac{d \underline{\underline{S}}}{dt} + \underline{\underline{S}} \underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}} \underline{\underline{S}} \end{aligned} \quad (\text{IV.1})$$

Où $\underline{\underline{S}}$, $\underline{\underline{\Omega}}$ sont respectivement les tenseurs des extra-contraintes et des taux de rotation. En observant les résultats de la figure II.1, on remarque que la vitesse a peu ou pas d'influence sur les essais réalisés à 80°C, alors que pour les températures plus élevées le comportement est fortement dépendant de la vitesse de traction. L'identification du modèle viscoélastique non linéaire se fait en deux étapes. Premièrement nous identifions la partie élastique du modèle en exploitant les résultats expérimentaux trouvés à 80°C, puis nous utilisons les résultats des températures supérieures à 80°C pour identifier la partie visqueuse.

IV.2.1.1 Identification de la partie élastique

Pour l'identification de la partie élastique, nous supposons que la viscosité du PET tend vers l'infini lorsque la température du matériau se rapproche de 80°C. Le modèle viscoélastique (Eq.IV.1) devient le modèle élastique suivant :

$$\frac{\delta \underline{S}}{\delta t} = 2G \underline{D} \quad (\text{IV.2})$$

Dans le cas de la traction uniaxiale le tenseur des taux de rotation est nul et le système précédent se ramène à l'équation suivante :

$$\frac{d\sigma}{dt} = 3G \frac{d\varepsilon}{dt} \quad (\text{IV.3})$$

Ce qui nous donne directement l'expression de G en fonction de la déformation logarithmique ε :

$$G = \frac{1}{3} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \quad (\text{IV.4})$$

Afin de déterminer G nous postulons la forme de σ en fonction de ε .

$$\sigma = A(e^\varepsilon - 1)^3 + B(e^\varepsilon - 1)^2 + C(e^\varepsilon - 1) \quad (\text{IV.5})$$

Avec $A = 2,7074$, $B = -5,5511$, et $C = 6,7916$, afin de coller au mieux aux résultats expérimentaux.

Nous supposons maintenant que la partie élastique du comportement du PET dépend peu de la température, c'est-à-dire que la rigidité des chaînes macromoléculaires varie peu sur la plage des températures retenues (de 80°C à 105°C).

IV.2.1.2 Identification de la partie visqueuse

Pour l'identification de la partie visqueuse, nous prenons une forme de viscosité (η) identique à celle décrite dans Chevalier et al. (2007). Les paramètres sont identifiés sur les essais réalisés à 100°C.

$$\begin{aligned} \eta &= K \dot{\gamma}^{m-1} \\ K &= K_0 e^{a\varepsilon^3 + b\varepsilon^2 + c\varepsilon} e^{a_T} \\ \dot{\gamma} &= (2\underline{D} : \underline{D})^{\frac{1}{2}} \\ a_T &= \alpha T + \beta \end{aligned} \quad (\text{IV.6})$$

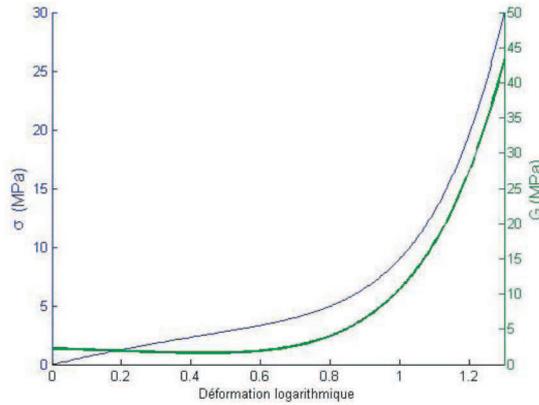


FIGURE IV.1 – Module de cisaillement et contrainte en fonction de la déformation logarithmique.

Où a_T est un coefficient lié à la température, il vaut 0 pour $T = 100^\circ\text{C}$. Dans le cas viscoélastique les paramètres optimaux sont $m = 0,66$, $K_0 = 0,33$ MPa, $a = 5,0444$, $b = -10,8265$, $c = 7,8542$, $\alpha = -0,2303$ et $\beta = 23,0259$. La figure IV.2 montre les résultats obtenus avec le modèle précédemment identifié pour la simulation des essais de traction uniaxiale dans le cadre de l'hypothèse des déformations et contraintes uniformes. On remarque que le modèle rend compte de l'influence de la vitesse de sollicitation et de la température.

Comme pour le modèle viscoplastique, nous proposons une validation de l'identification du comportement viscoélastique dans le cas de la traction uniaxiale.

IV.2.1.3 Validation du modèle viscoélastique

Le problème à résoudre est le même que précédemment, la seule différence réside dans les modèles de comportement.

– Formulation du problème

Le problème à résoudre est donc le problème de l'équation II.12 couplé à la loi de comportement viscoélastique (Eq.IV.1) décrite précédemment. En utilisant la forme faible de l'équation II.14 et le modèle constitutif de l'équation IV.1, nous arrivons au problème 3D en vitesse et pression suivant :

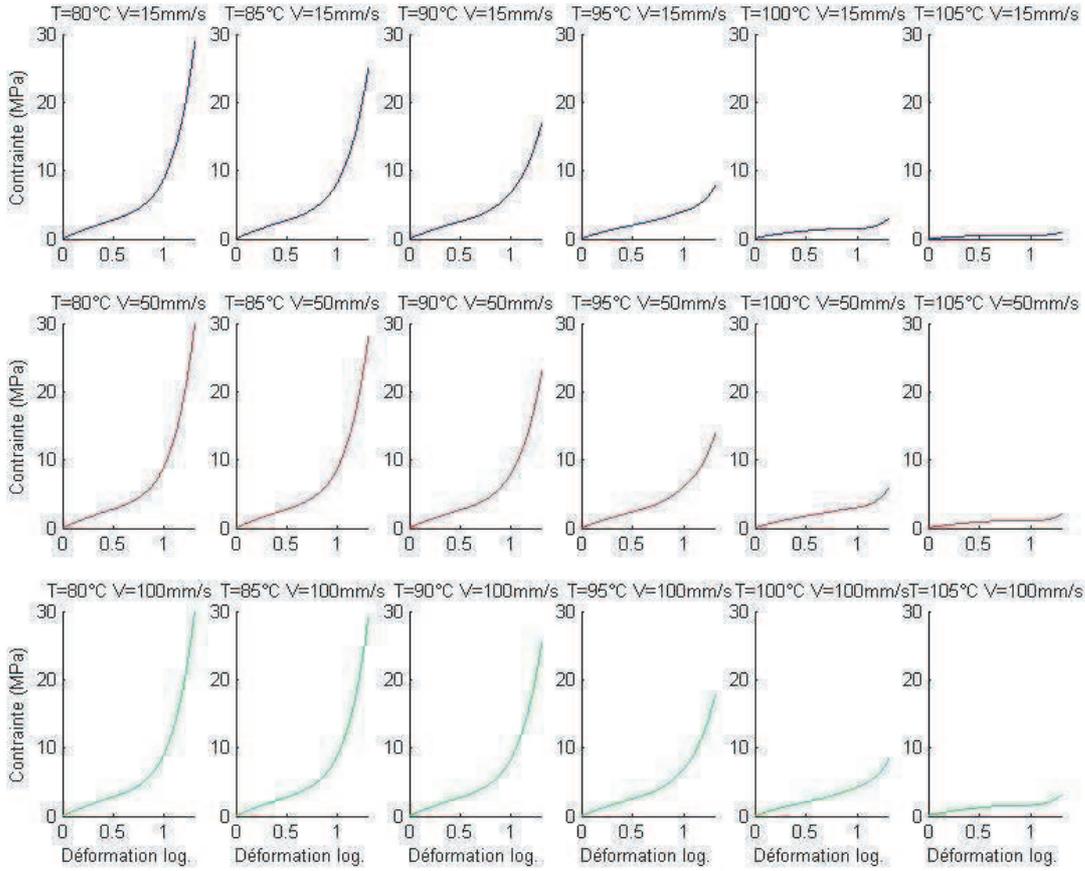


FIGURE IV.2 – Simulations de l'essai de traction uniaxiale avec le modèle viscoélastique.

$$\begin{cases} - \int_{\Omega} 2\eta \underline{D} : \underline{D}^* dV + \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\underline{v}^*) dV + \int_{\partial\Omega_F} \underline{F} \cdot \underline{v}^* dS + \int_{\Omega} \frac{\eta}{G} \frac{\delta S}{\delta t} : \underline{D}^* dV = 0 \\ \int_{\Omega} p^* \operatorname{div}(\underline{v}) dV = 0 \end{cases} \quad (\text{IV.7})$$

Ce problème ne peut pas se résoudre directement comme le problème visqueux de l'équation II.17 en utilisant la méthode de Newton-Raphson. Dans l'équation IV.7 nous avons un terme supplémentaire qui est dû à la partie élastique du modèle (dérivée de Jaumman). Néanmoins, il sera possible d'utiliser la méthode de Newton-Raphson en découplant la résolution numérique en deux étapes.

- Résolution numérique du problème viscoélastique

Pour la résolution numérique du problème viscoélastique, nous gardons la même discrétisation des variables que celle utilisée dans le problème visqueux (Eq.II.23-II.27). Pour pouvoir utiliser la méthode de Newton-Raphson comme dans le problème précédent, nous

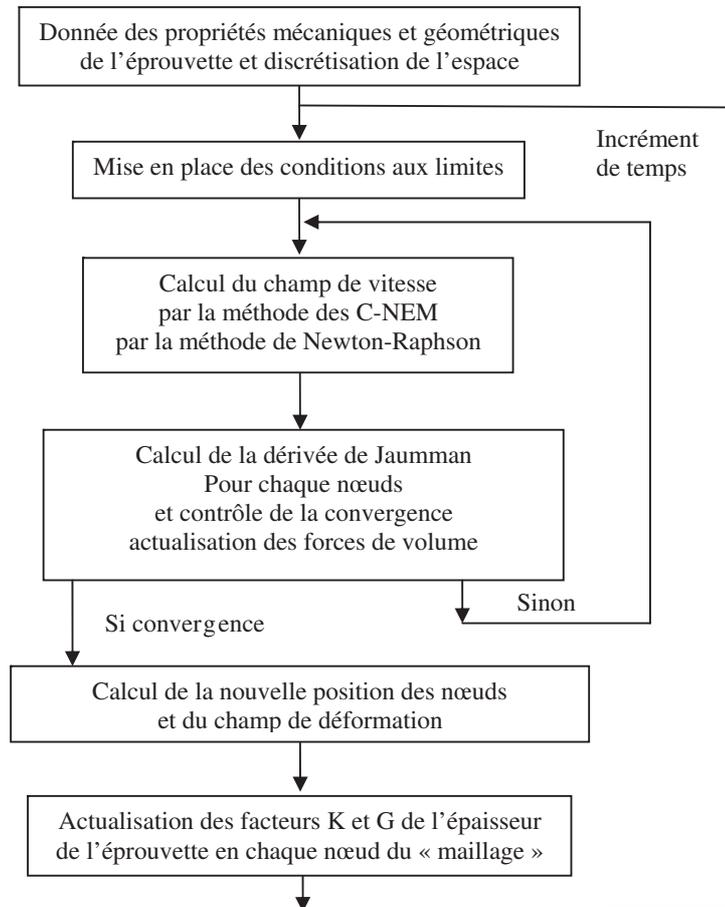
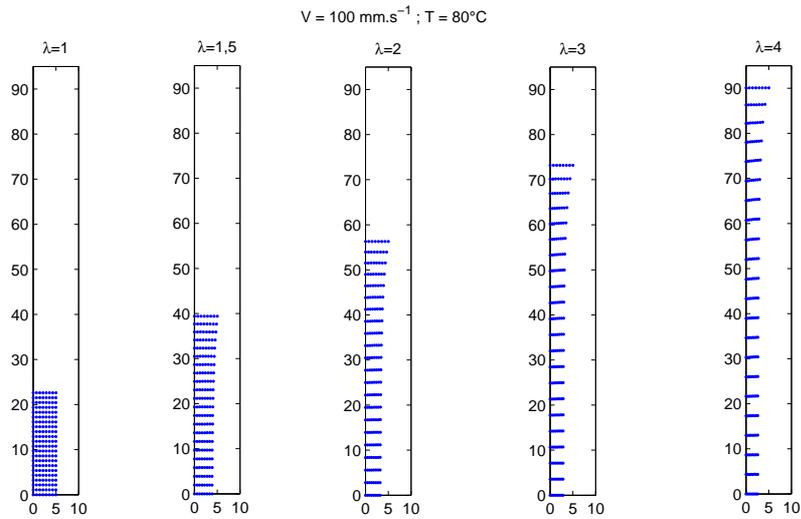


FIGURE IV.3 – *Algorithme pour la simulation d'un essai de traction sur un fluide viscoélastique.*

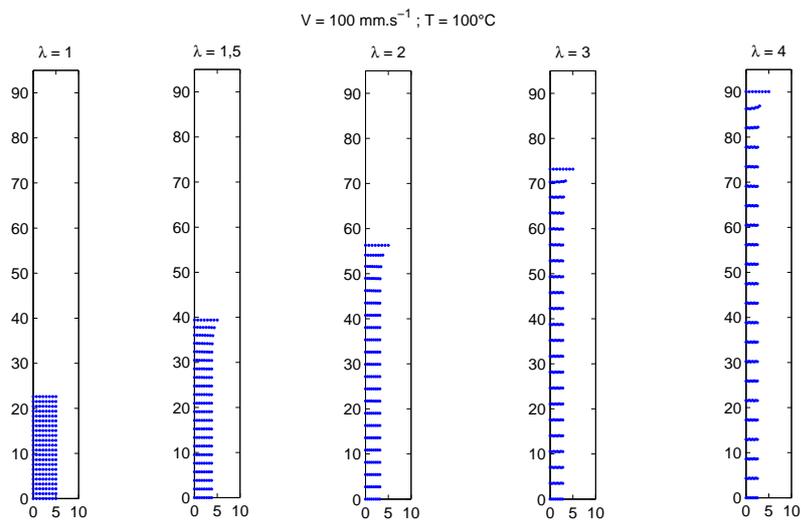
devons considérer le problème comme un problème visqueux avec des forces de volume. En effet, la seule différence avec le problème visqueux est le terme supplémentaire qui contient la dérivée de Jaumman du tenseur des extracontraintes ($\frac{\delta \underline{S}}{\delta t}$). Ce terme sera considéré comme un terme de force de volume dans la résolution d'un problème visqueux. Nous aurons donc deux boucles itératives pour résoudre le problème viscoélastique (voir la figure IV.3).

– Résultat des simulations de traction uniaxiale

Afin de valider le modèle viscoélastique nous avons réalisé des simulations à différentes températures sur la figure IV.4 on peut voir les résultats obtenu pour deux températures (80°C et 100°C). On remarque que la forme finale de l'éprouvette dépend de la température. En effet, sur la figure IV.4.a la déformation est essentiellement élastique alors que sur la figure IV.4.b la déformation est essentiellement visqueuse. Sur la figure IV.5 nous comparons les simulations C-NEM avec les simulations 1D nous pouvons voir que l'erreur



(a)



(b)

FIGURE IV.4 – Simulation viscoélastique (a) $V = 100 \text{ mms}^{-1}$ et $T = 80^\circ\text{C}$, (b) $V = 100 \text{ mms}^{-1}$ et $T = 100^\circ\text{C}$.

est faible (environ 5%), cela valide la méthode d'identification.

IV.2.2 Homogénéisation de la viscosité

Dans cette partie nous appliquons les modèles d'homogénéisation présentés dans le chapitre III aux propriétés visqueuses du PET, dans le cas où le PET est considéré comme

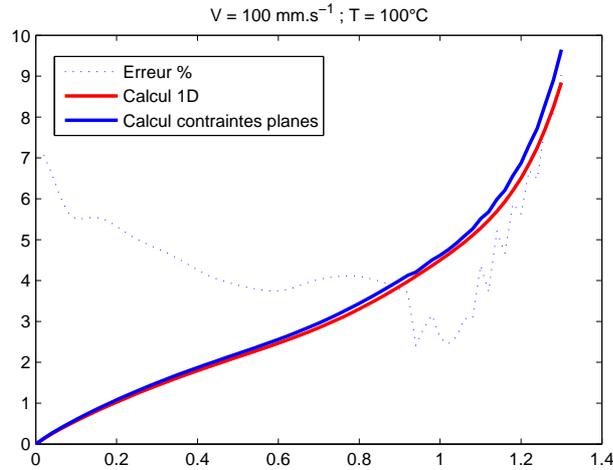


FIGURE IV.5 – Comparaison entre la simulation 1D et l’hypothèse des contraintes planes (2D).

un fluide visqueux. Cette approche est purement qualitative. Elle nous permet de justifier les formes exponentielles de la viscosité proposées précédemment. Dans ce paragraphe nous ne regardons que les résultats donnés par le schéma différentiel et auto-cohérent dans le cas de la structure lamelle. On suppose que les cristaux de PET ont une viscosité très élevée par rapport au PET amorphe. Les résultats donnés figure IV.6 sont normalisés, ils montrent aussi le caractère durcissant de la cristallisation et l’importance du facteur de forme. Numériquement, la viscosité de la phase cristalline ne peut être infinie, nous avons pris une viscosité pour la phase cristalline 10^6 fois supérieure à la viscosité de la phase amorphe.

IV.2.3 Vers un design 3D

Dans la simulation du procédé d’étirage-soufflage nous avons fait l’hypothèse d’axisymétrie, cette hypothèse est valable dans une large zone de la bouteille mais les fonds pétaloïdaux par exemple ne peuvent pas être étudiés de cette façon. Les techniques de vente actuelles imposent aux designers de bouteilles des formes de plus en plus complexes. Ces formes sont de moins en moins souvent axisymétrique et demande des simulations en 3D. Les simulations 3D pourront être confrontées à des mesures faites par Corelli 3D (Fig.IV.7) sur des fonds de bouteilles et ainsi optimiser cette zone complexe.

En définitive, c’est grâce à une collaboration industrielle permettant d’accéder à des données de pression, de soufflage, de profil de température, de température de régulation

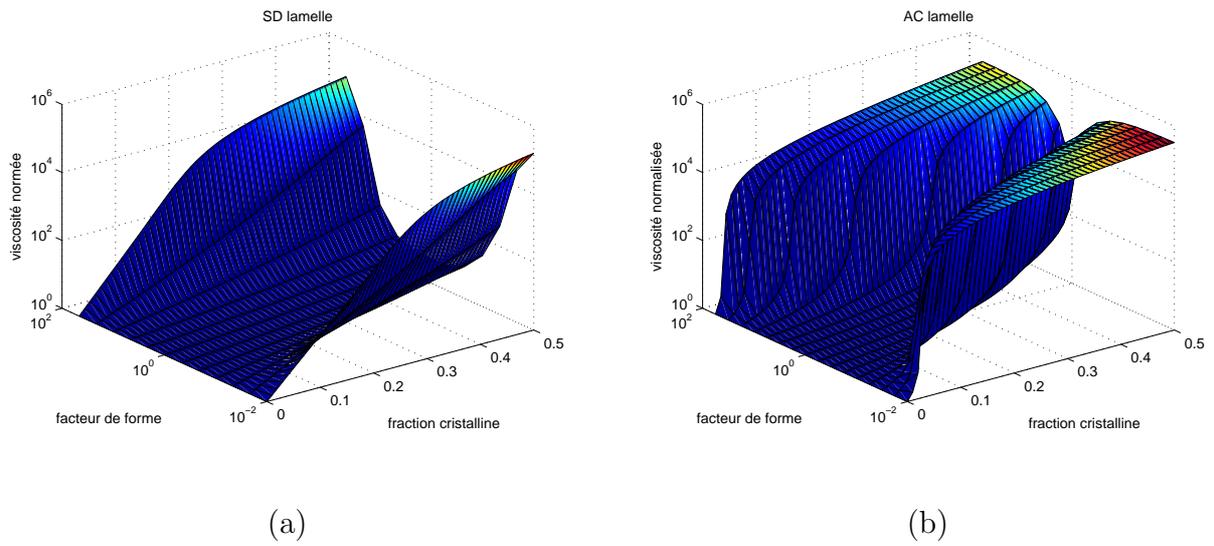


FIGURE IV.6 – Estimation de la viscosité du PET.

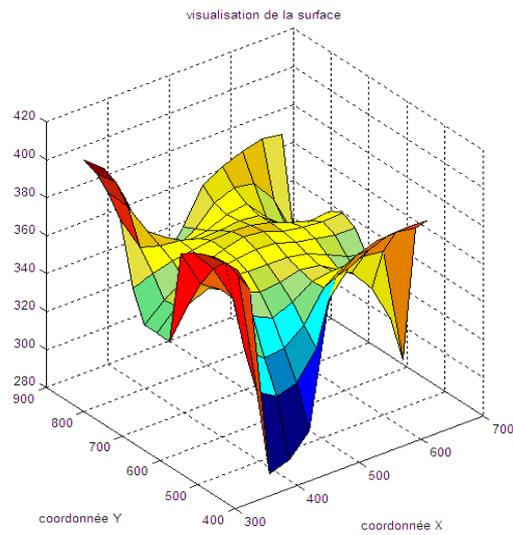


FIGURE IV.7 – Reconstitution d'un fond de bouteille par stéréo-corrélation d'images.

de moule etc... que le travail pourra être finalisé.

Bibliographie

- [AJJ 96] A. Ajji, J. Guévremont, K.C. Cole, M.M. Dumoulin, Orientation and structure of drawn poly(ethylene terephthalate), *Polymer*, 37, 3707-3714 (1996)
- [AHZ 03] S. Ahzi, A. Makrady, R.V. Gregory, D.D. Edie, Modeling of deformation behavior and strain-induced crystallization in poly(ethylene terephthalate) above the glass transition temperature, *Mechanics of materials*, 35, 1139-1148 (2003)
- [AMM 02] A. Ammar, A. Poitou, Cristallisation induite par l'écoulement d'un polymère. Cas d'un polymère viscoélastique décrit par des variables moléculaires, *Mécanique et industrie*, 3, 525-534 (2002)
- [AND 05] R. Androsch, B. Wunderlich, The link between rigid amorphous fraction and crystal perfection in cold-crystallized poly(ethylene terephthalate), *Polymer*, 46, 12556-12566 (2005)
- [BED 05] F. Bédoui, Étude du comportement élastique et viscoélastique linéaire des polymères semi-cristallins par approche micromécanique, thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Arts et Métiers (2005)
- [BED 06] F. Bédoui, J. Diani, G. Régnier, W. Seiler, Micromechanical modeling of isotropic elastic behavior of semicrystalline polymers, *Acta Materialia*, 54, 1513-1523 (2006)
- [BEL 94] T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free-Galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 37, 229-256 (1994)
- [BEL 95] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, W.K. Liu, Smoothing and accelerated computations in the element-free Galerkin method, *J. Comput. Appl. Math.* (1995)
- [BEL 96] T. Belytschko, Are finite elements passé?, *USACM Bulletin*, 7 (1996)
- [BOR 01] M. Bornert, T. Bretheau, P. Gilormini, Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques, *Hermes science* (2001)

- [BOY 00] M.C. Boyce, S. Socrate, P.G. Llana, Constitutive model for the finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition, *Polymer*, 41, 2183-2201 (2000)
- [BRE 91] F. Brezzi, M. Fortin, *Mixed and hybrid Finite Element Methods*, Springer : New York (1991)
- [BUC 95] C.P. Buckley, D.C. Jones, Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition, *Polymer*, 36, 3301-3312 (1995)
- [CAR 99] L. Carpaneto, G. Lesage, R. Pisino, V. Trefiletti, Blends of new, all-aromatic liquid-crystalline polymers and poly(ethylene terephthalate), *Polymer*, 40, 1781-1789 (1999)
- [CHA 07] C. Champin, *Modélisation 3D du chauffage par rayonnement infrarouge et de l'étirage soufflage de corps creux en P.E.T.*, thèse de doctorat, École des Mines de Paris (2007)
- [CHE 99] L. Chevalier, C. Linhone, G. Régnier, Induced crystallinity during stretch-blow moulding process and its influence on mechanical strength of poly(ethylene terephthalate) bottles *Plastics Rubber & Composites*, 28, 393-400 (1999)
- [CHE 05] L. Chevalier, S. Maamar, Y. Marco, G. Racineux, Simulation of Free Blowing of Polyethylene terephthalate Using a Thermodynamic Induced Crystallisation model, *International Journal of Forming Processes*, 9, 29-59 (2006)
- [CHE 06] L. Chevalier, Y. Marco, Identification of a strain induced crystallisation model for PET under uni and bi-axial loading : influence of temperature dispersion, *Mechanics and Materials*, 39, 596-609 (2006)
- [COS 08] B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Simulation du procédé de soufflage par la méthode des éléments naturels contraints (C-NEM) : application à l'optimisation du procédé, *Matériau et Technique*, 95, 1-9 (2008)
- [CUE 03] E. Cueto, N. Sukumar, B. Calvo, J. Cegoñino, M. Doblaré, Overview and recent advances in Natural Neighbour Galerkin Methods. *Archives of computational methods in engineering*, 10, 307-384 (2003)
- [DEL 34] B. Delaunay, Sur la Sphère Vide. *Bulletin of academy of sciences of the USSR*, 7, 793-800 (1934)
- [DEL 06] E. Deloy, Effet de l'architecture de chaîne sur le comportement en injection soufflage de copolyesters PET -étude expérimentale-, thèse de doctorat, École de Mines de Paris (2006)

-
- [DOU 00] A.K. Doufas, A.J. McHugh, C. Miller, Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization Part I. Model development and predictions, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 92 27-66 (2000)
- [ESH 57] J.D. Eshelby, The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, *Proc. of the Royal Society of London. Series A, Math. and Phys. Sc.*, 241, 376-396 (1957)
- [EVE 02] N. Everall, D. MacKerron, D. Winter, Characterisation of Biaxial Orientation Gradients in Poly(Ethylene Terephthalate) Films and Bottles Using Polarised Attenuated Total Reflection FTIR Spectroscopy, *Polymer*, 43, 4217-4223 (2002)
- [FED 04] S. Federico, A. Grillo, W. Herzog, A transversely isotropic composite with a statistical distribution of spheroidal inclusions : a geometrical approach to overall properties, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52, 2309-2327 (2004)
- [FLO 05] A. Flores, M. Pieruccini, N. Stribeck, S.S. Funari, E. Bosch, F.J. Baltá-Calleja, Structure formation in poly(ethylene terephthalate) upon annealing as revealed by microindentation hardness and X-ray scattering, *Polymer*, 46, 9404-9410 (2005)
- [GLO 84] R. Glowinski, *Numerical methods for nonlinear variational problems*, Springer, New-York, (1984)
- [GOR 01] E. Gorlier, J.M. Haudin, N. Billon, Strain-induced crystallisation in bulk amorphous PET under uniaxial loads, *Polymer*, 42, 9541-9549 (2001)
- [GOS 92] U. Göschel, Thermo-mechanical studies of highly oriented poly(ethylene terephthalate), *POLYMER*, 33 (1992)
- [GOS 96] U. Göschel, Thermally stimulated structural changes in highly oriented glassy poly(ethylene terephthalate), *Polymer*, 37, 4049-4059 (1996)
- [HIL 72] R. Hill, On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain, *R. Soc. Lond. A.*, 326, 131-147 (1972)
- [HIN 96] P.J. Hine, I.M. Ward, Measuring the elastic properties of high-modulus fibres, *J. of Mat. Sci.*, 31, 2, 371-379 (1996)
- [HUA 06] H.X. Huang, Z.S. Yin, J.H. Liu, Visualization Study and Analysis on Preform Growth in Polyethylene Terephthalate Stretch Blow Molding, *J. Appl. Polym. Sci.*, 103, 564-573 (2006)
- [JOH 98] B. Johannesson, O.B. Pedersen, Analytical Determination of the Average Eshelby Tensor for Transversely Isotropic Fiber Orientation Distributions, *Acta mater.*, 46, 3165-3173 (1998)

- [KAN 90] E.J. Kansa, Multiquadrics - A Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid-Dynamics. 1. Computers & Mathematics with applications, 19, 127-145 (1990)
- [KAR 03] G.P. Karayannidis, N. Papachristos, D.N. Bikiaris, G.Z. Papageorgiou, Synthesis, crystallization and tensile properties of poly(ethylene terephthalate-co-2,6-naphthalate)s with low naphthalate units content, Polymer, 44, 7801-7808 (2003)
- [KIN 02] D.P.R. Kint, E. Rudé, J. Llorens, S. Muñoz-Guerra, Crystallization and properties of poly(ethylene terephthalate) copolymers containing 5-tert-butyl isophthalic units, Polymer, 43, 7529-7537 (2002)
- [KUL 99] J.A. Kulkarni, A.N. Beris, Lattice-based simulations of chain conformations in semi-crystalline polymers with application to flow-induced crystallization, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 82, 331-366 (1999)
- [LIU 95] W.K. Liu, S. Jun, Y.F. Zhang, Reproducing Kernel Particle Methods, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 20, 1081-1106 (1995)
- [LIU 96] W.K. Liu, Y. Chen, S. Jun, J.S. Chen, T. Belytschko, Advances in multiple scale kernel particle methods, Computational Mechanics, 18, 73-111 (1996)
- [LOY 02] W. Loyens, G. Groeninckx, Ultimate mechanical properties of rubber toughened semicrystalline PET at room temperature, Polymer, 43, 5679-5691 (2002)
- [LU 01] X.F. Lu, J.N. Hay, Isothermal crystallization kinetics and melting behaviour of poly(ethylene terephthalate), Polymer, 42, 9423-9431 (2001)
- [LUC 77] L.B. Lucy, A numerical approach to the testing of fusion process, The astronomic Journal, 88, 1013-1024 (1977)
- [MAR 94] J.E. Marsden, T.J.R. Hughes, Mathematical Foundations of Elasticity, Dover, New York, (1994)
- [MAR 03] Y. Marco, Caractérisation multi-axiale du comportement et de la microstructure d'un semi-cristallin : application au cas du PET, Thèse de doctorat, LMT Cachan (2003)
- [MAT 90] M. Matsuo, C. Sawatari, Morphological and mechanical properties of poly(ethylene terephthalate) Gel and melt films in terms of the crystal lattice modulus, molecular orientation, and small angle X-ray scattering intensity distribution, Polymer Journal, 22, 6, 518-538 (1990)

-
- [MCE 98] J.P. McEvoy, C.G. Armstrong, R.J. Crawford, Simulation of the Stretch Blow Molding Process of PET Bottles, *Advances in Polymer Technology*, 17, 4, 339-352 (1998)
- [MEN 00] G.H. Menary, C.G. Armstrong, R.J. Crawford, J.P. McEvoy, Modelling of poly(ethylene terephthalate) in injection stretch-blow moulding, *Plas., Rub. and Comp. Proc. and Appl.*, 29, 360-370 (2000)
- [MEN 07] G.H. Menary, CW. Tan, M. Picard, N. Billon, C.G. Armstrong, E.M.A Harkin-Jones, Numerical Simulation of Injection Stretch Blow Moulding : Comparison with experimental free blow trials, CP907, 10 ESAFORM Conference on Material Forming (2007)
- [NAY 92] B. Nayroles, G. Touzot, P. Villon, Generalizing the finite element method : diffuse approximation and diffuse elements, *Computational mechanics* , 10, 307-318, (1992)
- [NEM 99] S. Nemat-Nasser, M. Hori, micromechanics : overall properties of heterogeneous materials, Elsevier (1999)
- [PER 99] D. Peric, M. Vaz, D.R.J. Owen, On adaptive strategies for large deformations of elasto-plastic solids at finite strains : computational issues and industrial applications, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 176, 279-312 (1999)
- [PIP 93] B. Piper, Properties of local coordinates based on Dirichlet tessellations, *Computing Suuppl.*, 8, 227-239 (1993)
- [RUT 97] G.C. Rutledge, Thermomechanical Properties of the Crystal Phase of Poly(ethylene terephthalate) by Molecular Modeling, *Macromolecules*, 30, 2785-2791 (1997)
- [SAM 95] M. Sambridge, J. Braun, M. McQueen, Geophysique parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbor. *Geophysics Journal International*, 122, 837-857 (1995)
- [SCH 96] F.M. Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, L. Dessoutter, Viscoelastic simulation of PET stretch/blow moulding process, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 64, 19-42 (1996)
- [SCH 98] F.M. Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, Experimental Study and Numerical Simulation of the Injection Stretch/Blow Molding Process, *Polymer Eng. and Sc.*, 38, 9 (1998)

- [SIB 80] R. Sibson, A Vector Identity for the Dirichlet tessellations. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 87, 151-155 (1980)
- [SID 82] F. Sidoroff, Les grandes déformations, Ecole d'été Sophia-Antipolis (1982)
- [SUK 98] N. Sukumar, B. Moran, T. Belytschko, The Natural Element Method in Solid Mechanics. *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 43, 839-887, (1998)
- [THI 07] F. Thibault, A. Malo, B. Lanctot, R. Diraddo, Preform Shape and Operating Condition Optimization for the Stretch Blow Molding Process, *Polymer Eng. and Sc.* (2007)
- [TOR 00] N. Torres, J.J. Robin, B. Boutevin, Study of thermal and mechanical properties of virgin and recycled poly(ethylene terephthalate) before and after injection molding, *European Polymer Journal*, 36, 2075-2080 (2000)
- [VOR 08] G.M. Voronoï, Nouvelles applications des paramè tres continus à la théorie des formes quadratiques. Deuxième mémoire : recherches sur les paralléloèdres primitifs, *J. Reine Angew. Math*, 134, 198-287 (1908)
- [WAL 81] L.J. Walpole, Elastic Behavior of Composite Materials : Theoretical Foundations, *Advances in Applied Mechanics*, 21, 169-242 (1981)
- [WIL 02] J. Willis, Mechanics of composites, cours de l'École Polytechnique (2002)
- [YAN 04a] Z.J. Yang, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, G.H. Menary, Finite element modelling of stretch-blow moulding of PET bottles using Buckley model : plant tests and effects of process conditions and material parameters, *Proc. Instn. Mech. Engrs.*, 218 (2004)
- [YAN 04b] Z.J. Yang, E. Harkin-Jones, G.H. Menary, C.G. Armstrong, Coupled temperature-displacement modelling of injection stretch-blow moulding of PET bottles using Buckley model, *Journal of Materials Processing Technology*, 153-154 (2004)
- [YVO 04] J. Yvonnet, D. Ryckelynck, P. Lorong, F. Chinesta, 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 (2004)
- [YVO 06] J. Yvonnet, P. Villon, F. Chinesta, Natural Element Approximations involving bubbles for treating incompressible media, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66, 1125-1152 (2006)

[ZAO 00] A. Zaoui, Matériaux hétérogènes et composites, cours de l'École Polytechnique
(2000)

Résumé :

Dans cette thèse, nous proposons de développer un outils de conception pour la mise en forme des bouteilles en PET par le procédé d'étirage-soufflage. Nous avons implémenté un logiciel de simulation numérique qui utilise une méthode meshless : la méthode des éléments naturels contraints (C-NEM). Pour alimenter le logiciel nous avons modélisé le comportement mécanique du PET par un modèle non linéaire anisotrope. Pour modéliser le comportement du PET nous avons réalisé une série d'essais qui nous a permis de lier les propriétés macroscopiques à l'état de la microstructure.

Une fois la simulation d'étirage-soufflage effectuée, nous connaissons la géométrie de la bouteille ainsi que la description de sa microstructure : orientation et cristallinité. À partir du calcul précédent nous pouvons, à l'aide de la micromécanique linéaire, calculer la résistance de la bouteille finie à diverses sollicitations.

Mots clés : PET, simulation numérique, meshless, modélisation, homogénéisation.

Modeling and numerical simulation of the stretch blow-molding process of PET bottles : evolution of microstructure, evolution of behavior

Abstract :

In this thesis, we propose to develop a tool to design the stretch blow-molding process of PET bottles. We have implemented a software of numerical simulation which uses a meshless method : the constrained natural element method (C-NEM). In order to provide this software, we modeled the mechanical behaviour of PET by a non linéaire anisotropic model. To model the behavior of PET we carried out a series of tests that allowed us to link the macroscopic properties to the state of the microstructure.

Once the simulation of the stretch blow made, we know the geometry of the bottle and the description of its microstructure : orientation and crystallinity. From the previous calculation we can, using linear micromechanic, calculate the resistance of the bottle over to various loads.

Key words : PET, numerical simulation, meshless, modeling, homogenisation.