Table des matières

Liste des figures…… 7

Introduction générale……...… 13
1. Fabrication des bouteilles en PET …..…… 13
1.1 Le polyéthylène téréphtalate (PET)….....…… 13
1.2 Présentation du procédé de mise en forme.....…… 14
2. Evolution des propriétés……...…… 15
2.1 Propriétés microscopiques……..…….. 15
2.2 Propriétés macroscopiques……..…….. 17
3. Simulation du procédé….…… 18
3.1 Loi de comportement……..…….. 18
3.2 Simulation du soufflage……..…….. 20
4. Objectifs et présentation de la thèse….……...…… 21
Bibliographie……...…….. 22

I. Modélisation du comportement viscoélastique thermo dépendant du PET…… 27
I.1 Introduction……. 27
I.2 Modèle viscoélastique classique…….. 30
I.2.1 Maxwell surconvecté…….. 30
I.2.2 Oldroyd B…….. 31
I.2.3 Giesekus…….. 31
I.2.4 Phan Thien Tanner…….. 32
I.2.5 Larson……. 33
I.3 Un modèle viscohyperélastique proposé…… 34
I.3.1 Modèle présentation…… 34
I.3.2 Elongations uniaxiale et équi-biaxiale…… 36
I.4 L'identification le modèle à partir des essais expérimentaux…….. 40
I.4.1 Identification du module de cisaillement G…… 41
I.4.2 Identification de la viscosité η..... 43
I.4.3 Identification de l'effet de température…….. 45
I.5 Comparaison…… 47
I.6 Conclusion partielle……. 48
Bibliographie……. 49

II. Identification des propriétés thermiques et modélisation 3D du chauffage infrarouge (IR)…….. 51
II.1 Introduction……..…….. 51
II.2 Dispositif expérimental de chauffage IR…….. 53
II.2.1 Mesure locale par thermocouple….…….. 53
II.2.2 La caméra IR….……..…….. 54
II.2.3 L'influence du fond……..…….. 55
II.3 Étude expérimentale du chauffage IR d'une plaque…….…… 56
II.3.1 Le champ de température de la surface arrière de la plaque….…… 57
II.3.2 La température mesurée par thermocouple et par la caméra……...…….. 58

II.4 Identification des propriétés thermiques……..…….. 58
II.4.1 Modélisation numérique 1D…… 58
II.4.2 Identification des propriétés thermiques……..……..…….. 60
II.4.3 Modélisation du flux radiatif incident……..…… 62
II.4.4 Modélisation 3D et validation du cas de la plaque…..…….. 64
II.5 Étude expérimentale du chauffage IR d'une préforme……..……... 66
II.6 Étude numérique du chauffage IR d'une préforme……... 68
II.6.1 Calcul du flux imposé sur la surface extérieure……..…… 68
II.6.1.a Calcul du flux de la partie cylindrique de la préforme…..…… 68
II.6.1.b Calcul du flux de la partie hémisphérique cylindrique de la préforme….. 71
II.6.2 Approximation des valeurs du flux imposé sur la préforme……..……..... 72
II.6.3 Solution numérique et comparaison avec les mesures expérimentales pour température de la préforme…… 74
II.7 Conclusion partielle……..…… 75
Bibliographie…… 76

III. Implémentation numérique, recalage et premières simulations…… 77
III.1 Introduction…… 77
III.2 Formulation du problème thermique en cas 2D contrainte plane…….. 78
III.2.1 Formulation faible……..……..……..…… 78
III.2.2 Discrétisation par éléments finis……..……..…….. 79
III.3 Formulation du problème mécanique en cas 2D contrainte plane…….. 80
III.3.1 Formulation faible……..……..……..…….. 80
III.3.2 Discrétisation par éléments finis……..…..……..…….. 82
III.3.3 Implémentation numérique et validation……..…….…….. 83
III.4 Formulation du problème thermo-mécanique en cas 2D contrainte plane...…… 84
III.5 Optimisation des propriétés en prenant en compte l'effet d'auto-échauffement…….. 85
III.5.1 Optimisation des propriétés…..……..……..…….. 85
III.5.2 Les résultats numériques du cas 2D contrainte plane…….. 86
III.6 Formulation du problème axisymétrique……... 88
III.6.1 Formulation faible de la partie mécanique..……..…….. 88
III.6.2 Validation numérique……..……..…….. 89
III.6.2.a Extension axiale……..…… 89
III.6.2.b Extension radiale…..……..…… 90
III.6.3 Formulation du modèle thermo-mécanique..……..…… 91
III.6.4 Les résultats numériques du cas axisymétrique……....…….. 92
III.7 Simulation du soufflage de préforme…….. 94
III.7.1 Implémentation du modèle visco-hyperelastique dans ABAQUS……... 94
III.7.2 Comparaison avec les résultats de la programmation réalisée dans Matlab… 96
III.7.3 Cas d'un cylindre mince soumis à une pression interne……..……..…….. 97
III.7.3.a Solution analytique……..…… 98
III.7.3.b Validation de la programmation dans le cas où G et η sont des constantes…… 99
III.7.4 Cas d'une sphère mince sous la pression……..……..……... 100

III.7.4.a Solution analytique……..……. 100
III.7.4.b Validation avec des propriétés constantes..……..……. 101
III.7.5 Simulation du soufflage libre……... 102
III.7.5.a La partie expérimentale……. 102
III.7.5.b Maillage de la préforme……...……..……. 105
III.7.5.c Résultats numériques……. 106
III.8 Conclusion partielle……...……... 107
Bibliographie……. 107

IV. Détermination des propriétés induites par homogénéisation micromécanique (chapitre de transition)……. 109
IV.1 Introduction…….……. 109
IV.2 Une viscosité anisotrope……... 109
IV.3 Simulation de soufflage…… 110
IV.3.1 Simulation du soufflage……... 110
IV.3.2 Simulation de l'essai d'élongation plane……. 111
IV.4 Couplage avec la microstructure……. 113
IV.5 De la microstructure aux propriétés en service……. 115
IV.6 Conclusion partielle…….. 118
Bibliographie……. 118

V. Identification les caractéristiques élastiques orthotropes et hétérogènes sur des fonds de bouteilles soufflées……. 119
V.1 Introduction partielle……. 119
V.2 Procédure expérimentale……... 121
V.2.1 Contexte de l'étude : deux fonds de bouteilles comparés au travers du test ESC…….. 121
V.2.2 Méthode utilisant la stéréo corrélation……..…… 124
V.2.3 Validation sur deux cas particuliers : le rayon d'un cylindre et la mesure d'un angle…… 127
V.2.3.a Valider les dimensions……... 128
V.2.3.b Valider l'angle droit du bloc…….. 129
V.2.4 Évolution d'épaisseur…… 131
V.3 Détermination numérique des déformations et des contraintes…… 132
V.3.1 Détermination du champ de déformation…….. 132
V.3.1.a Calcul du champ de déformation membranaire…..…… 132
V.3.1.b Application aux fonds de bouteilles…….. 135
V.3.2 Calcul par éléments finis des fonds de bouteille……... 138
V.4 Résultats et discussion…… 141
V.4.1 Post-traitement pour le champ de déformations…… 141
V.4.2 Principe de l'identification……...……. 143
V.4.3 Procédure d'identification des propriétés orthotropes…….. 145
V.4.4 Le cas VL…….. 146
V.5 Conclusion partielle……... 148
Bibliographie……. 149

Conclusion et perspective
De la simulation viscoélastique du soufflage aux propriétés induite……..…. 151
1. Conclusion…….. 151
2. Perspectives……. 152
2.1 Validation par les effets de retour élastique…….. 152
2.2 Couplage avec l'évolution de la microstructure…… 152
2.3 Prédiction des propriétés induites par homogénéisation micromécanique……... 153
Annexe…… 154
A. Contraintes en élongation par différents modèles viscoélastiques…….…..... 154
A.1 Maxwell surconvecté…….……... 154
A.2 Giesekus……... 154
A.3 Phan Thien Tanner……... 154
B. Calcul des doubles contractions…….……. 155
C. Dérivées de Gâteaux……..... 157

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Liste des tableaux

Tableau I.1 La valeur initiale du module de cisaillement G_0……..... 41
Tableau I.2 Les paramètres identifiés de la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v, T)$ pour chaque température... 45
Tableau I.3 Les paramètres identifiés quand K, N et h_0 sont constants…….. 45
Tableau I.4 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats de ce modèle... 48
Tableau II.1 Les paramètres thermiques identifiés…….. 61
Tableau II.2 Les valeurs des flux radiatif incident…….……..... 64
Tableau III.1 Les caractéristiques identifiées du PET…….… 80
Tableau III.2 Les caractéristiques du PET ajustées……..... 86
Tableau III.3 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats numériques… 88
Tableau III.4 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats numériques axisymétriques……. 94
Tableau V.1 Comparaison des résistances au test ESC entre les fonds VE et VL…….. 123
Tableau V.2 Les modules de Young premières identifiés et après 50 itérations du fond VE…… 146

Liste des figures

Introduction générale

Figure 1 Le marché de l'emballage plastique alimentaire aux Etats-Unis, 2003-2008….. 13
Figure 2 Motif de répétition du polyéthylène téréphtalate [MAR 03]…… 13
Figure 3 Illustration du procédé de mise en forme des bouteilles en PET [DEL 06]……. 15
Figure 4 Principe du procédé et microstructure associée aux différentes étapes [MAR 03]……... 15
Figure 5 Prédiction de la cristallinité pour (a) une préforme de 40 g, (b) une préforme de 25 g [COS 08]……...……. 17
Figure 6 Equi-biaxial tension test results [CHE 06]……... 18
Figure 7 Schéma global de la simulation du procédé en relation avec les différents chapitres du mémoire…….. 22

Chapitre I

Figure I.1 Le rhéomètre de Meissner…….. 30
Figure I.2 L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Maxwell surconvecté……... 31
Figure I.3 L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Giesekus : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0.4…. 32
Figure I.4 L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de P.T.T. : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0,4…….… 33
Figure I.5 L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Larson : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0,4….. 33
Figure I.6 Représentation rhéologique du modèle…….. 34
Figure I.7 Réponses uniaxiale (a) et equi-biaxiale (b) de la forme linéaire du modèle viscoélastique…….. 38

Figure I.8 Machine d'essai multiaxial……. 39
Figure I.9 L'éprouvette initiale et déformée (l'allongement $\lambda = 3$)…….. 39
Figure I.10 Evolution de la contrainte pour différentes vitesses de déformation pour une température de 90°C…… 40
Figure I.11 Evolution de la contrainte à différentes températures pour une vitesse de déformation 8 s^{-1}……. 40
Figure I.12 Evolution de λ_e (a) et évolution de $\dot{\varepsilon}_v$, $\dot{\varepsilon}_e$ et $\dot{\varepsilon}$ (b) pour un taux de déformation de 1 s^{-1} avec G=8 MPa…… 42
Figure I.13 Evolution de λ_e pour un taux de déformation de 1 s^{-1} à partir du modèle G... 42
Figure I.14 Evolution de $\dot{\varepsilon}_v$, $\dot{\varepsilon}_e$ et $\dot{\varepsilon}$ pour un taux de déformation de 1 s^{-1} à partir du modèle G……. 43
Figure I.15 (a)La fonction h identifiée par équation I.57 ; (b) Illustration des paramètres dans la fonction h…… 44
Figure I.16 L'évolution de η_0 et $1/ln(aT)$ VS $1/(T-T_{ref})$…….. 46
Figure I.17 L'évolution de $\varepsilon_{v\lim}$ et $(\varepsilon_{vlim}-\varepsilon_{vlim_ref})/\varepsilon_{vlim_ref}$ VS $1/(T-B_2)$……..……. 47
Figure I.18 Résultats semi-analytiques du modèle viscohyperélastique à la température 90°C pour différentes vitesses de déformation…… 47
Figure I.19 Résultats semi-analytiques du modèle viscohyperélastique à la vitesse de déformation 8 s^{-1} pour différentes températures……. 48

Chapitre II

Figure II.1 Le banc de soufflage……. 53
Figure II.2 Les sondes et la visualisation Testo…….. 54
Figure II.3 Caméra IR Flir et schéma de mesure générale thermographique
1: Environnement; 2: Objet; 3: Atmosphère; 4: Camera……...……. 54
Figure II.4 Essais avec fond noir et fond carton : (a) fond aluminium (b) fond carton (c) fond noir…….. 56
Figure II.5 Évaluation de l'influence du fond noir et du fond carton……...…….. 56
Figure II.6 (a) La plaque ;(b) Position des lampes et de la plaque…….. 57
Figure II.7 Essais de mesure du champ de température de la surface arrière de la plaque. 57
Figure II.8 L'évolution de la température expérimentale au point central de la surface arrière et de la surface avant…… 58
Figure II.9 L'évolution de la température de l'air ambiant……. 59
Figure II.10 La capacité calorifique C_p en fonction de la température et l'illustration de la fonction proposée…… 60
Figure II.11 Les résultats expérimentaux (points) et les solutions numériques avec les paramètres identifiés (courbes), (a) d=11cm; (b) d=12cm; (c) d=13cm……. 61
Figure II.12 L'évolution de C_p avec les paramètres identifiés……... 62
Figure II.13 (a) La géométrie de la plaque et des lampes; (b) position des lampes……... 62
Figure II.14 Le flux radiatif incident calculé (a) d=11cm; (b) d=12cm; (c) d=13cm……. 64
Figure II.15 (a) Le flux radiatif incident calculé en d = 13cm ; (b) Le flux radiatif incident approximé…….. 65
Figure II.16 La température de la surface arrière de la solution numérique (a) et expérimentale ; (b) en régime stationnaire ; (c) le profil d'intensité interne radiative ; (d) le profil de température dans l'épaisseur…….. 66
Figure II.17 Température au point central de la surface avant et de la surface arrière par

la solution numérique et par mesure expérimentale…… 66
Figure II.18 L'essai avec une préforme en rotation…… 67
Figure II.19 Champ de la température expérimentale en régime stationnaire sur la surface mesurée…… 67
Figure II.20 L'évolution de la température expérimentale au point central de la surface mesurée…… 68
Figure II.21 Configuration géométrique des lampes et de la préforme…… 69
Figure II.22 Flux radiatif incident calculé sur la surface extérieure de la préforme (Visualisé par Matlab)…… 72
Figure II.23 Représentation du flux en coordonnées cylindriques…….... 73
Figure II.24 Comparaison entre le flux calculé et le flux approximé (1)…… 73
Figure II.25 Comparaison entre le flux calculé et le flux approximé (2)…… 74
Figure II.26 Représentation géométrique du modèle de préforme…… 74
Figure II.27 (a) La température sur la surface extérieure de la préforme de la solution numérique en régime stationnaire ; (b) les résultats expérimentaux……... 75

Chapitre III

Figure III.1 Le domaine 2D rectangulaire avec des conditions aux limites……... 82
Figure III.2 Résultats numériques et semi-analytiques à 90°C pour la vitesse de déformation $8s^{-1}$…….. 83
Figure III.3 Résultats numériques et expérimentaux à la température 90°C pour différentes vitesses de déformation……... 84
Figure III.4 Résultats numériques et expérimentaux à la vitesse de déformation $8s^{-1}$ pour différentes températures……. 84
Figure III.5 Résultats numériques thermo-mécaniques et expérimentaux…… 85
Figure III.6 (a) Résultats thermo-mécaniques et expérimentaux ; (b) L'évolution de température pour différentes vitesses de déformation ; (c) La viscosité pour différentes vitesses de déformation sous l'effet de température……... 88
Figure III.7 Cylindre soumis à une vitesse de déplacement suivant l'axe e_z …… 89
Figure III.8 Cylindre soumis à une vitesse de déplacement suivant l'axe e_r et e_θ ……. 90
Figure III.9 Cylindre avec les conditions aux limites……. 91
Figure III.10 Résultats numériques axisymétrique et semi-analytiques à 90°C pour la vitesse de déformation $8s^{-1}$…….. 91
Figure III.11 (a) Résultats thermo-mécaniques axisymétrique et expérimentaux ; (b) L'évolution de température pour différentes vitesses de déformation ; (c) La viscosité pour différentes vitesses de déformation sous l'effet de température……. 94
Figure III.12 L'algorithme pour implémenter le modèle viscohyperelastiaue dans ABAQUS…… 95
Figure III.13 Le sous-programme pour trouver les variables $\underline{\underline{B}}_e$ ……... 96
Figure III.14 La comparaison des résultats d' ABAQUS et les résultats dans Matlab…... 97
Figure III.15 Cylindre mince soumis une pression interne……. 97
Figure III.16 Comparaison l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ (a) et du rayon (b) à partir des solutions analytiques et numériques du cas cylindrique……... 99
Figure III.17 Sphère mince soumis une pression interne…… 100
Figure III.18 Comparaison de l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ (a) et du rayon (b) à partir des solutions analytiques et numériques pour le cas de la sphère……. 102

Rapport-Gratuit.com

Figure III.19 Vue ensemble de la station de soufflage…… 102
Figure III.20 Schéma de principe d'une machine du procédé [NAG 12]……... 103
Figure III.21 L'évolution de la forme de préforme dans le procédé de soufflage libre : (a) Essais expérimentaux ; (b) Entrée de la pression ; (c) Entrée de débit d'air [TAN 08] 104
Figure III.22 Débit d'air en fonction du facteur de pression [SAL 09]…….. 105
Figure III.23 Maillage de la préforme et de la canne…….. 106
Figure III.24 Les résultats de simulation (a) soufflage libre ; (b) d'étirage soufflage…… 106

Chapitre IV

Figure IV.1 Soufflage libre de bouteille (a) $\beta=0$; (b) $\beta=0,5$ (c) $\beta=1$……..... 110
Figure IV.2 (a) Soufflage libre de la préforme ; (b) Soufflage libre de la bouteille pour $\beta=0,9$……. 111
Figure IV.3 L'essai d'élongation plane……... 112
Figure IV.4 L'évolution expérimentale des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} à la température 90°C pour une vitesse de déformation 2 s^{-1} ……. 112
Figure IV.5 Les résultats numériques à la température 90°C pour une vitesse de déformation 2 s^{-1} : (a) Evolution des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} pour β=0 et 1 ; (b) Evolution des viscosités η_{xx} et η_{yy} pour β=0 et 1…… 113
Figure IV.6 (a) Elliptical inclusion location defined by angles θ and φ, (b) Various inclusion shape factors……... 116
Figure IV.7 Density distribution of inclusion orientation $\psi(\theta)$ for various values of strain level χ..... 117
Figure IV.8 Estimation of Young's modulus for various values of inclusion shape factor [COS 08]……. 117
Figure IV.9 Young modulus versus (a) crystallinity and (b) strain level…… 118

Chapitre V

Figure V.1 Fonds pétaloïdes VL et VE ayant été réchauffés vers 150°*C* (entre *Tg* et *Tm*) où on voit apparaître des zones blanches lorsque le comportement était préalablement amorphe……... 119
Figure V.2 Vallée étroite (VE) entre les pieds ou vallée large (VL) entre les pieds…….. 122
Figure V.3 Fissuration des pieds lors du test ESC…….. 123
Figure V.4 Fonction de densité de probabilité pour le temps avant cracking. Le fond VL résiste beaucoup mieux que VE…….. 124
Figure V.5 Principe de la stéréo corrélation, deux caméras CCD sont utilisées et les déplacements apparents δU et δV servent à la détermination de la profondeur *z*……... 125
Figure V.6a Illustration des paramètres : zone d'étude, le masque et le pas des grilles….. 126
Figure V.6b La grille rouge a un pas de 32 pixels, et le masque bleu une taille de 64 pixels……... 126
Figure V.7 Visualisation de la surface avant et après le lissage……. 127
Figure V.8 Un cylindre et un bloc pour valider la construction d'une surface 3D……. 127
Figure V.9 Visualisation des surfaces du cylindre…….. 128
Figure V.10 Facteur '*d*' de la transformation en '*Z*'……. 129
Figure V.11 Visualisation des surfaces du pavé……. 130
Figure V.12 Le meilleur choix des paramètres……... 130
Figure V.13 La visualisation du champ de déplacement dans une zone circulaire autour du point d'injection (PI) du fond lorsque les bouteilles sont sous la pression interne, (a)

fond VE ; (b) fond VL……. 131
Figure V.14 Evolution de l'épaisseur……..… 132
Figure V.15 La géométrie de la surface (a)……. 133
Figure V.15 La géométrie de la surface (b)……..... 133
Figure V.16 Zone d'étude……... 135
Figure V.17 (a) Les déformations principales I ; (b) les déformations principales II ; (c) la direction principale 1 sous pression 5 bar du fond VE……... 136
Figure V.18 (a) Les déformations principales I ; (b) les déformations principales II ; (c) la direction principale 1 sous pression 5 bar du fond VL……... 137
Figure V.19 L'évolution de la déformation sous la pression au PI , ε_{xx} (points cercles) et ε_{yy} (points étoiles), gauche, fond VE ; droite, fond VL……... 138
Figure V.20 Maillage de la bouteille avec 48567 nœuds……...……. 139
Figure V.21 Résultats des simulations numériques de la bouteille, (a) les contraintes principales maximales σ_1 ; (b) les minimales σ_2……. 139
Figure V.22 Maillage du fond pétaloïde avec 24000 nœuds. (a) Les conditions aux limites $u_\theta = u_z = 0$ imposées sur le cercle supérieur. (b) Visualisation de l'évolution d'épaisseur…….. 140
Figure V.23 Résultats des simulations numériques au cas VE, (a) les contraintes principales maximales σ_1 ; (b) les minimales σ_2 dans la peau extérieure du fond ; (c) la direction principale I…..... 141
Figure V.24 La symétrisation des déformations principales, (a) le fond décompose en 10 parties identiques ; (b) les données sur cette partie représentative…… 142
Figure V.25 Le champ de déformations sur la 1/10 surface après le lissage ……. 142
Figure V.26 Une surface du fond parfaitement symétrique…… 142
Figure V.27 (a) Déformation principale I du fond VE après le post-traitement ; (b) Déformation principale II du fond VE après le post-traitement……. 143
Figure V.28 les directions principales et les directions d'orthotropie…… 143
Figure V.29 Identification sur le point *M* et la taille du voisinage de ce point *T*…… 144
Figure V.30 Module de Young E_1 et E_2 du fond de VE…….…… 145
Figure V.31 Module de Young E_1 et E_2 du fond de VE après 50 itérations……... 146
Figure V.32 Evolution des valeurs de module E_1 et E_2 au PI. En ce point les 2 valeurs sont identiques……. 146
Figure V.33 Evolution des déformations sous l'effet de la pression dans la zone du point d'injection, les deux figures du haut présentent le cas VE, celles du bas, le cas VL. 147
Figure V.34 Evolution des contraintes dans la zone du point d'injection au cas VE (à gauche) et au cas VL (à droite)……... 148

Introduction générale

1. Fabrication des bouteilles en PET

Le polyéthylène téréphtalate (PET) découvert en 1941 par J. R. Whinfield et J. Dickson, est un polymère possédant de bonnes caractéristiques mécaniques et une bonne résistance thermique et chimique. En conséquence, ce matériau est utilisé dans des applications très variées pour l'industrie ou les produits du quotidien : fibres textiles, emballages, récipients pour boissons et aliments, etc. Après la découverte, on a commencé à fabriquer du PET en film alimentaire pendant les années 50. Pepsi fut le premier à utiliser le PET dès les années 70 pour les boissons carbonatés. Ensuite, grâce à la recherche sur ce matériau, l'industrie des bouteilles plastiques a progressivement remplacé le PVC par le PET qui est mieux adapté aux contraintes sanitaires pour les bouteilles d'eau. Le passage du PVC au PET a permis de réduire de 30% le poids des bouteilles tout en devenant plus résistantes. Pour toutes ces raisons, le PET est utilisé commercialement dans certains pays industrialisés dès le début des années 80 et sur le marché français. En 1992, Valvert a été le premier à lancer une bouteille PET pour l'eau minérale. Depuis 1996, le taux de croissance pour la consommation mondiale d'eau en bouteille s'élève à peu près de 12% par an. La figure 1 illustre que le matériau PET est très utilisé pour les produits d'emballage plastique. Les recherches continuent sur la maîtrise des procédés de mise en forme afin d'optimiser le contenant.

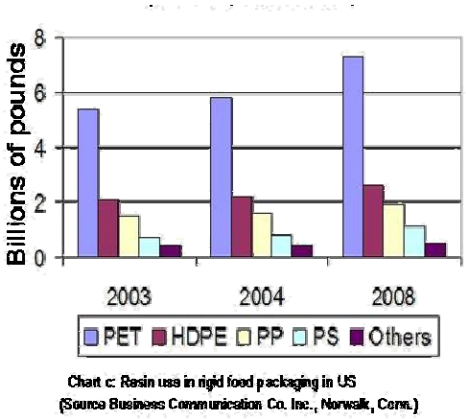


Figure 1 : *Le marché de l'emballage plastique alimentaire aux Etas Unis, 2003-2008*

1.1 Le polyéthylène téréphtalate (PET)

Le PET est un polyester dont l'unité de répétition est représentée par la Figure 2 suivante. Il est constitué de longues chaînes moléculaires. La cohésion entre ces chaînes est assurée par la liaison des forces Van der Walls.

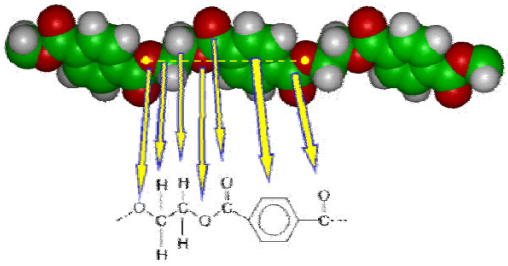


Figure 2 : *Motif de répétition du polyéthylène téréphtalate [MAR 03]*

Le PET est un polymère semi-cristallin, il est donc composé d'une phase amorphe et d'une phase cristalline qui peut atteindre jusqu'à 50% du volume. Pour une température en dessous de la température de transition vitreuse Tg (Tg ≈ 80 °C), le PET est plutôt rigide avec des chaînes de très faible mobilité ; entre Tg et la température de fusion Tm (Tm ≈ 250 °C), le PET devient plus souple et les chaînes, mobiles, peuvent changer de configuration et faire évoluer la microstructure ; au dessus de la température de fusion, les liaisons entre les chaînes sont détruites, le PET devient un fluide très visqueux. C'est le deuxième état qui est intéressant pour beaucoup de procédés de fabrication, notamment le procédé de soufflage par bi-orientation, car il permet à la fois de déformer le matériau avec peu d'efforts et de faire évoluer sa microstructure : orientation et cristallisation [MAR 03].

La cristallisation du PET peut se produire de deux façons : thermiquement ou induite par une sollicitation. La cristallisation thermique peut être obtenue par refroidissement du matériau depuis l'état fondu, ou par son chauffage depuis l'état vitreux. Le développement de lamelles cristallines est réalisé par la croissance de type sphérolitique [BAR 70, BAL 81, COM 05]. Chaque sphérolithe continue indépendamment des autres, à croître au cours de l'étape de cristallisation jusqu'à ce qu'il atteigne les frontières d'autres sphérolithes [COM 05]. La cristallisation thermique rend le matériau opaque et donne un PET semi-cristallin qui a un comportement mécanique isotrope. Au contraire, la cristallisation induite par l'effet de la déformation donne des zones cristallines multiples et de petites dimensions ainsi qu'une forte orientation au comportement global du PET [SMI 74, FIS 76]. Les sphérolites ont en fait une taille caractéristique de l'ordre du micromètre [MAR 03] et laisse le matériau translucide. La forte orientation des chaînes macromoléculaires et la cristallisation induite impactent fortement la rigidité du matériau. Cette phase cristalline donne un renforcement des propriétés mécaniques du PET et c'est une des raisons pour que ce matériau soit beaucoup utilisé dans la fabrication des bouteilles [GOR 01].

1.2 Présentation du procédé de mise en forme

La Figure 3 représente les étapes du procédé de mise en forme des bouteilles en PET. Dans ce procédé, au cours de la première étape, les granulés de PET sont étuvés et injectés pour obtenir des préformes de quelques millimètres d'épaisseur et de plusieurs centimètres de longueur en fonction du volume, de la bouteille finale. Elles sont ensuite refroidies à température ambiante de manière à pouvoir être stockée [DEN 89]. Les vitesses de refroidissement (environ 300°C.min^{-1}) sont suffisamment élevées pour limiter la cristallisation thermique du PET [MAR 03]. Donc, la structure du PET reste amorphe dans cette étape (un taux de cristallinité inférieur à 5%) [GOR 01]. Dans un deuxième temps, les préformes sont chauffées par rayonnement infra-rouge (IR) avec les températures légèrement supérieures à la transition vitreuse Tg et placées dans des moules où elles sont étirées par une canne d'élongation et soufflées par une pression interne. Il existe une corrélation forte entre les vitesses et pression du procédé et l'orientation moléculaire et la cristallisation induite par le procédé. Il existe aussi une corrélation entre ce changement de microstructure et augmentation des modules élastiques ou de résistance à la traction. Durant cette étape de soufflage par bi-orientation, les déformations finales sont de l'ordre de 300% dans les directions radiale et axiale [COS 08] : ces grandes déformations induisent l'évolution microstructure considérable.

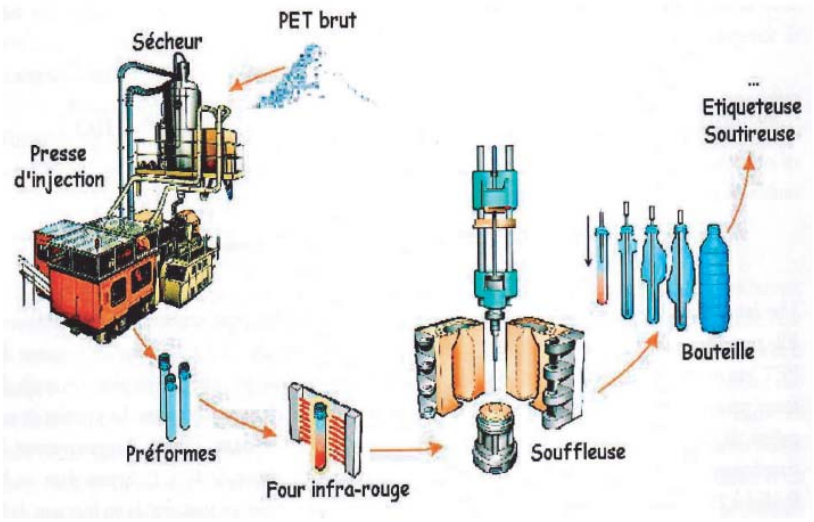


Figure 3 : *Illustration du procédé de mise en forme des bouteilles en PET [DEL 06]*

2. Evolution des propriétés

2.1 Propriétés microscopiques

Comme nous l'avons illustré dans la section 1.2, le soufflage des bouteilles plastiques à partir de préformes injectées en PET implique des étirages de grande amplitude et génère des modifications importantes de propriétés mécaniques associées à des modifications de microstructures durant la mise en forme. La microstructure évoluant durant le soufflage, la viscosité η et la rigidité (représentée par le temps de relaxation θ) du PET évoluent aussi entre celles de l'état amorphe et celle de l'état final. La Figure 4 illustre les changements de microstructure associés aux différentes étapes du procédé. La structure du PET peut-être cristallisé partiellement (jusqu'à 50 %) lors du bi-étriage subit pendant (ou après) le soufflage. Le phénomène de durcissement dû au changement de microstructure (cristallisation, orientation…) sous déformation au cours du procédé permet de stabiliser la mise en forme du matériau mais également d'obtenir des caractéristiques mécaniques proches de matériaux thermoplastiques renforcés de fibres, sans le surcoût ni les hétérogénéités générés [CHE 99a, CHE 99b].

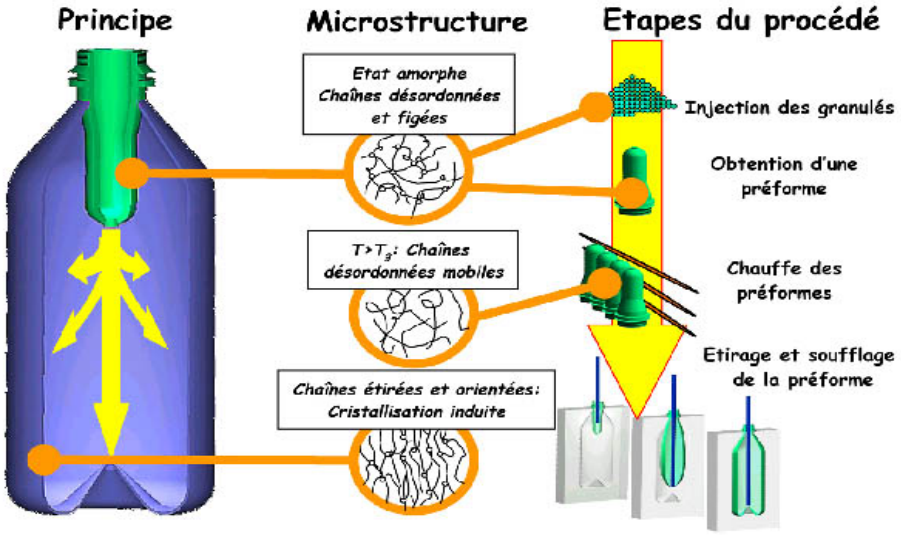


Figure 4 : *Principe du procédé et microstructure associée aux différentes étapes [MAR 03]*

Différents états de déformation induisent la cristallisation, notamment le cisaillement simple [TIT 97, POP 00], la traction uniaxiale ou la traction biaxiale [CAK 86, CHA 93, MAR 02a]. La cristallisation induite par la déformation va engendrer une forte orientation cristalline et donc des anisotropies mécaniques. De nombreux travaux [LEB 86, LEB 90, VIG 97, SAL 98, CHE 01, MAR 02a, MAR 02b, MAR 04] ont porté sur la caractérisation de la cristallisation induite pour chaque type d'étirage : à force constante, à vitesse constante et à vitesse de déformation constante. Ces travaux se sont principalement attachés à la description la cristallisation induite et à la description cinématique de la déformation.

Marco [MAR 03] a réalisé des essais de traction biaxiale dans des conditions de température proches de celles du procédé pour caractériser les interactions micro-macro du PET et valider des modèles de comportement qui tiennent compte des couplages entre microstructure et comportement. Les essais réalisés ont permis d'effectuer différentes observations de la microstructure, en particulier par la diffraction des rayons X afin de décrire et quantifier l'évolution microstructurale du matériau au cours des sollicitations. Les principaux paramètres observés sont le taux de cristallisation et l'orientation des chaînes moléculaires. La première variable (taux de cristallisation) permet de définir la répartition moyenne des chaînes macromoléculaires en phase amorphe ou cristalline et peut être reliée aux paramètres thermomécaniques de l'étirage. Par exemple des échantillons peuvent être découpés dans la zone centrale des éprouvettes bi-étirées ou des bouteilles soufflées puis le taux de cristallinité mesuré par densimétrie [MAR 03].

L'autre variable de l'évolution de la microstructure est l'orientation cristalline, ces mesures sont réalisées à partir des clichés de diffraction des rayons X. Cette technique permet de calculer une valeur moyenne par rapport à une direction de référence.

Chevalier et al. [CHE 06] ont pris en compte cet effet de l'orientation moléculaire du PET sur les modifications de comportement lors de sollicitations uniaxiale et biaxiale par un modèle en introduisant un paramètre d'anisotropie (β). A partir de ces travaux, Cosson [COS 08] a modélisé le module d'Young qui dépend de l'orientation cristalline. Les estimations du module d'Young anisotrope sont quasiment égales aux mesures expérimentales.

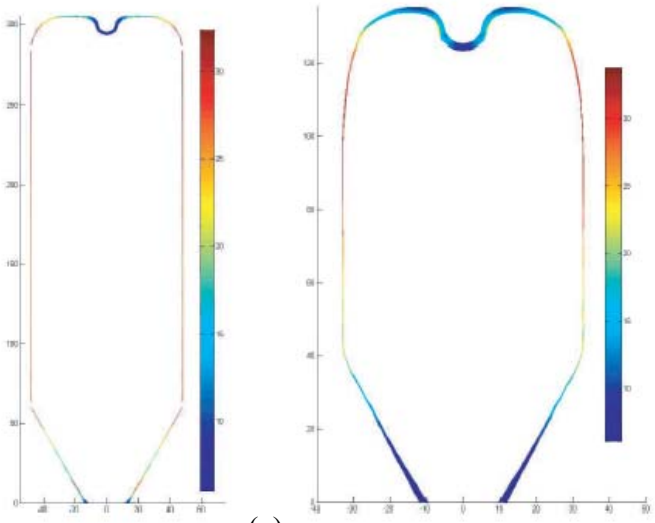
La connaissance de la microstructure dans des structures en PET nous permet de prédire le comportement des bouteilles en service et ainsi, couplé à la simulation du procédé, d'optimiser la conception des bouteilles. En effet, améliorer la connaissance et affiner les simulations nécessite de prendre en compte l'effet de la déformation sur la cinétique des chaînes macromoléculaires. De cette façon, les variables de microstructure ne seraient plus « intuitives » mais obtenues par une analyse de la déformation sur un paquet de chaînes macromoléculaires.

A l'échelle de la chaîne macromoléculaire, de nombreuses études [BAS 00, KRE 02, HES 06] permettent de simuler le comportement très local prenant en compte les mobilités des liaisons atomiques sur des échelles de temps de l'ordre de 10^{-14} s et de longueur de l'ordre du nanomètre. Un rapide calcul montre que le passage direct de cette échelle au comportement macroscopique élémentaire (Δt = 1s et d = 1 cm) n'est pas abordable avec les moyens de calcul actuels. Notre parti pris est plutôt de coupler une modélisation macroscopique avec des variables micros plus ou moins réalistes et permettant, *via* des techniques d'homogénéisation, de répondre au problème posé.

2.2 Propriétés macroscopiques

Les propriétés macroscopiques sont liées fortement avec l'évolution de la microstructure au cours de mise en forme des bouteilles. Pendant le procédé, le matériau est soumit dans les températures légèrement au dessus de sa température de transition vitreuse Tg. Dans cette condition, le PET possède un comportement visqueux non négligeable et une forte élasticité (les effets de retour élastique que l'on observe expérimentalement lorsqu'on stoppe la pression). Les principales propriétés macroscopiques du PET sont :

- Les déformations finales peuvent atteindre de l'ordre de 300% dans les directions radiale et axiale [COS 08].
- Le renforcement de ses propriétés mécaniques (augmentation de la contrainte) dû à la cristallisation induite et à l'orientation moléculaire développées sous l'effet de la déformation [MAR 03].
- Une dépendance à la vitesse de déformation sur la viscosité.
- Le durcissement structural dû à la cristallisation induite et à l'orientation moléculaire permet de réguler les épaisseurs des bouteilles [MAH 00, GOR 01, DUP 05].
- Une fortement dépendance à la température sur l'effet du durcissement des propriétés mécaniques.



(a) (b)

Figure 5 : *Prédiction de la cristallinité pour (a) une préforme de 40 g, (b) une préforme de 25 g [COS 08]*

Munis d'un modèle de comportement couplé à la microstructure on peut simuler le procédé. La Figure 5 montre la répartition du taux de cristallinité dans les bouteilles de 0,33L et 2 L obtenu par calcul [COS08] et comparé avec les mesures. On peut constater que le taux de cristallinité est fort dans la zone cylindrique et conforme aux mesures mais plus faible sur les fonds de bouteilles comme ils sont plus épais que les autres endroits. La mesure dans cette zone 3D est plus délicate mais accessible néanmoins (voir chapitre V) comme le montre les résultats dans [CHE 10a, CHE 10b, LUO 11].

3. Simulation du procédé

3.1 Loi de comportement

Pendant le procédé de mise en forme des bouteilles en PET, le matériau est soumis, dans une plage de températures légèrement au dessus de sa température de transition vitreuse Tg, à des grandes vitesses de sollicitation et de très grandes déformations. Dans ces conditions sévères, la réponse mécanique est caractérisée par :
(i) une viscosité prononcée, illustrée par une forte sensibilité à la vitesse de déformation ;
(ii) une élasticité illustrée par une relaxation des contraintes, visible dès la fin de la sollicitation ;
(iii) un effet de durcissement important à partir d'un taux d'étirage "critique". Cet effet dépend des conditions de température et de vitesse.

La Figure 6 présente la réponse du PET sous une sollicitation equi-biaxiale pour différentes températures et vitesses d'étirage. Les résultats expérimentaux d'essais d'élongation biaxiaux réalisés sur du PET font apparaître des courbes de comportement qui présentent un durcissement (augmentation de la contrainte) lorsque l'élongation atteint environ 2,5.

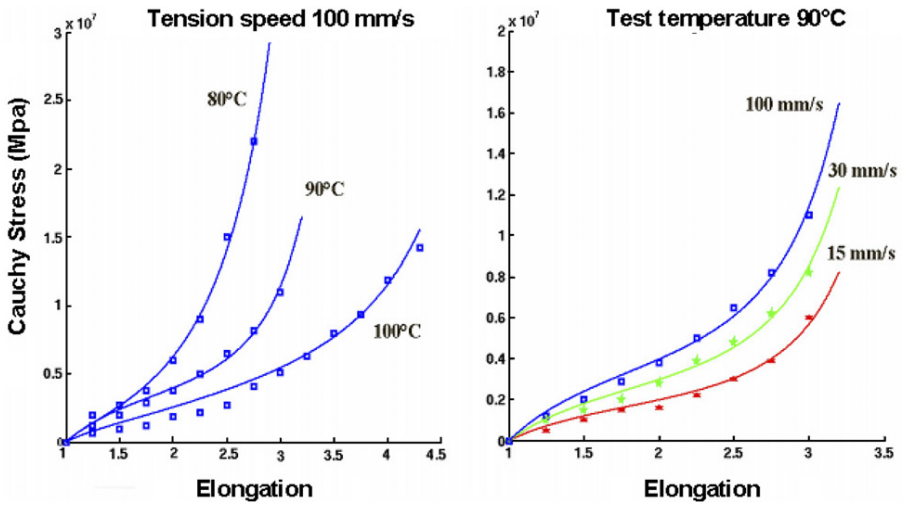


Figure 6 : *Equi-biaxial tension test results [CHE 06]*

De nombreuses études mécaniques et physiques ont été faites pour la caractérisation rhéologique du PET. Au cours des quarantaines dernières années, de nombreux modèles ont été choisis pour décrire correctement le comportement macroscopique rhéologique non-linéaire du PET. A partir des caractéristiques des réponses du PET, le modèle hyperélastique s'est premièrement imposé pour la modélisation [PIN 66, GOR 94, VER 97, MAR 99, YUA 00]. Les deux modèles hyperélastiques les plus utilisées pour la simulation du procédé sont les lois d'Ogden ([MAR 99, MEN 01, LAR 01]), et de Mooney-Rivlin ([YUA 00, CHA 07]) qui présentent un effet de durcissement important. Mais ce modèle n'est pas apte à représenter l'effet de la vitesse de déformation ni la dissipation visqueuse (qui induisent les auto-échauffements du matériau lors de sa déformation). De plus, le modèle hyperélastique non-linéaire incompressible pose des difficultés pendant le calcul numériques, stabilité, blocage... ([CHE 02, CHA 07]).

D'autres auteurs, considérant l'évolution monotone de la déformation au cours du procédé de soufflage et le refroidissement rapide lorsque le matériau atteint le moule, proposent un modèle viscoplastique pour la simulation du procédé d'étirage soufflage ([WAN 00, CHE 06,

BOR 09a, COS 09]). Il est plus facile à implémenter dans les codes de calcul et plus stable que le modèle hyperélastique. Chevalier et Marco [CHE 06, MAR 08] ont proposé un modèle viscoplastique non linéaire identifié par des essais uniaxiaux et biaxiaux. Ce modèle a été utilisé par Bordival *et al.* [BOR 09a] pour simuler le procédé d'étirage soufflage. Dans son travail, ce modèle qui généralise la loi G'Sell-Jonas en 3D, prend en compte l'effet du durcissement et l'influence de la vitesse de déformation. Par la suite, Cosson *et al.* [COS 09] ont proposés une version anisotrope de ce modèle viscoplastique. L'identification des caractéristiques des matériaux peut être gérés à partir des données expérimentales des essais. L'effet du durcissement observé au cours des essais peut être lié avec les modifications de la microstructure induites par la déformation.

Cette famille de modèle ne peut pas représenter la phase de relaxation après la tension car le comportement viscoplastique ne prend pas en compte l'élasticité du PET : toute déformation est considérée comme étant irréversible.

Un comportement viscoélastique est plus réaliste pour le PET, et capable de prendre en compte les effets de retour élastique que l'on observe expérimentalement lorsqu'on stoppe brutalement la pression mais outre les difficultés liées à l'identification du modèle, son implémentation numérique se révèle aussi délicate.

Des progrès ont été réalisés depuis les premières recherches des modélisations par les lois viscoélastiques ([LAU 86], [KHA 87], [BAR 95]). Deux types d'équations constitutives sont utilisées pour décrire un modèle viscoélastique : les équations constitutives intégrales, par exemple le modèle KBKZ ; les équations constitutives différentielles, telles que les modèles de Maxwell surconvecté, Giesekus, Phan-Thien-Tanner, Larson. Les modèles viscoélastiques classiques en grandes déformations peuvent s'écrire sous la forme générale :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + f\left(\underline{\underline{S}},\ \underline{\underline{D}}\right) = 2\eta \underline{\underline{D}}\ ,\ \eta = G\theta$$

avec :

$\frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} = \dot{\underline{\underline{S}}} + \underline{\underline{S}}\underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}}\underline{\underline{S}} - a\left(\underline{\underline{S}}\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}}\underline{\underline{S}}\right)$ et $a = 1$ dans le cas surconvecté, classiquement utilisé pour les polymères fondus. θ représente le taux de relaxation, $\underline{\underline{S}}$ le tenseur des extra-contraintes, $\delta/\delta t$ l'expression de la dérivée surconvectée, η la viscosité, $\underline{\underline{D}}$ le tenseur des vitesses de déformation,G le module d'élasticité en cisaillement et $f\left(\underline{\underline{S}},\ \underline{\underline{D}}\right)$ une fonction qui dépend du modèle choisi :

- Maxwell surconvecté :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \underline{\underline{S}} = 2\eta \underline{\underline{D}}$$

- Giesekus :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \underline{\underline{S}} + \frac{\alpha}{G}\underline{\underline{S}}^2 = 2\eta \underline{\underline{D}}$$

- Phan Thien et Tanner :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \left(1 + \frac{\alpha}{G} Tr\left(\underline{\underline{S}}\right)\right)\underline{\underline{S}} = 2\eta \underline{\underline{D}}$$

- Larson :

$$\frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \frac{1}{\theta}\left(\underline{\underline{S}} - G\underline{\underline{I}}\right) + \frac{2\alpha}{3G}\left(\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{S}}\right)\underline{\underline{S}} = 0$$

Les limites pour les modèles viscoélastiques classiques sont la description du durcissement et le problème d'instabilité sur la valeur de vitesse de déformation. Schmidt *et al.* [SCH 98] ont utilisé la viscoélasticité avec les lois de Johnson-Segalman et d'Oldroyd pour modéliser le procédé d'étirage soufflage. Les résultats ont montré que ces lois sont capables de prédire l'état de contrainte dans la préforme. En revanche, les cinématiques de mise en forme ne sont pas représentatives de la réalité.

Buckley *et al.* [BUC 95] ont proposé un modèle viscoélastique avec une approche qui est basée sur l'addition du tenseur de gradient de la vitesse de déformation de la partie élastique et de celui de la partie visqueuse : $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D_e}} + \underline{\underline{D_v}}$. Yang *et al.* [YAN 04] a utilisé un modèle 3D viscoélastique non-linéaire proposé par Buckley et montré que ce modèle représente très bien le comportement du PET pour différentes conditions de température ou de vitesse de sollicitation.

Inspiré du modèle de Buckley et al. [BUC 95], nous proposons une modélisation viscoélastique qui rend compte de l'effet du durcissement et de l'influence de la température et du taux de déformation [CHE 12].

3.2 Simulation du soufflage

La simulation du procédé de mise en forme des bouteilles en PET reste difficile du fait des couplages forts entre sollicitations thermomécaniques complexes et évolution de la microstructure du matériau. De nombreux travaux ont été faits pour la simulation du procédé : Khayat *et al.* [KHA 94] a implémenté le modèle hyperélastique (Mooney-Rivlin) dans une méthode élément finis dans le cas 2D axisymétrique pour réaliser la simulation du soufflage ; Schmidt *et al.* [SCH 96] ont utilisés la loi viscoélastique (Johnson-Segalman et Oldroyd) qui prend en compte l'effet durcissant par modification de la viscosité dans une méthode éléments finis avec le logiciel Forge 2 dans le cas 2D axisymétrique, ce modèle est aussi couplé avec l'effet de la température via une loi WLF ; McEvoy *et al.* [McE 98] ont fait la simulation numérique du procédé par le modèle de Buckley, il est réalisé par éléments finis avec le logiciel ABAQUS en cas 2D axisymétrique et isotherme ; Debbaut *et al.* [DEB 98] ont modélisé le procédé par le modèle hyperélastique (Mooney-Rivlin) en éléments finis 3D ; ensuite, Wang *et al.* [WAN 00] présentent aussi des simulations numériques en 3D avec le modèle viscoplastique ; Laroche *et al.* [LAR 01] se sont consacrés à la simulation du procédé avec le modèle hyperélastique (Ogden) couplé avec la loi WLF et l'approche membrane, il est réalisé par éléments finis en 2D axisymétrique, il faut noter qu'il est un des premiers travaux qui fait la prédiction du taux de cristallisation et de l'orientation moléculaire ; Menary *et al.* [MEN 00] ont examiné trois différents modèles de comportement : le modèle hyperélastique (Ogden), le modèle de fluage et le modèle viscoélastique (modèle Buckley) pour la simulation du procédé, ils ont constaté que le modèle Buckley donne un meilleur résultat que les deux autres modèles en termes de prédiction de la distribution de l'épaisseur de bouteille ; Yang *et al.* [YAN 04a, YAN 04b] ont continué le travail de Menary *et al.* [MEN 00] en passant de la simulation 2D isothermique à une simulation 2D non-isothermique avec le modèle Buckley ; Plus récemment, Cosson [COS 08] a utilisé le modèle viscoplastique version anisotrope identifiée par les essais multiaxiaux réalisés par Chevalier *et al* [CHE 06] pour réaliser la simulation numérique du procédé d'étirage-soufflage, il a utilisé la technique sans maillage (C-NEM) ; Bordival [BOR 09b] a développé une procédure d'optimisation numérique qui permet de calculer automatiquement les paramètres de réglage du four infrarouge, et il a modélisé le comportement mécanique du PET avec le modèle de G'sell couplé à une

thermodépendance de type WLF et la simulation a été réalisée par éléments finis avec le logiciel ABAQUS.

4. Objectifs et présentation de la thèse

La Figure 7 illustre les différentes étapes pour une simulation du procédé qui permettrait de prédire les propriétés physiques, et notamment mécaniques, de la bouteille soufflée. Cette prédiction doit s'appuyer sur l'homogénéisation de la description du matériau et implique que la simulation prennent en compte l'évolution de la microstructure lors du soufflage. Dans la thèse de Cosson [COS 08] cette démarche a été menée pour la 1ère fois en s'appuyant sur un modèle viscoplastique. Dans le travail proposé ici, on souhaite étendre cette démarche à une modélisation visco-élastique.

Dans le cadre du schéma de la figure 7, les travaux de cette thèse s'inscrivent dans les thématiques du laboratoire MSME, la modélisation et la simulation multi-échelle. L'objectif de la thèse est de décrire le comportement du PET durant le soufflage par un modèle viscohyperélastique en grandes déformations, d'identifier ce modèle couplé à la thermique à partir des données expérimentales très récentes de tension biaxiale à des conditions de vitesse et de température proches du procédé issues des travaux de Menary *et al.* [MEN 12] et enfin d'implanter ce modèle pour la simulation numérique du procédé.

Dans le chapitre I on propose une modélisation viscohyperélastique réaliste (prenant en compte l'effet de durcissement, l'effet de la vitesse de déformation et l'influence de la température) inspirée par le modèle de Figiel et Buckley [FIG 09]. Ce modèle plus stable que les modélisations viscoélastiques classiques pour les forts taux de déformation. L'identification de cette modélisation par les essais expérimentaux réalisés par Menary *et al.* [MEN 12] à Queen's University Belfast montre que la partie visqueuse présente une allure non linéaire proche du modèle viscoplastique de Cosson [COS 08]. Compte tenu de cette similitude, le passage du modèle présenté ici à une version couplée à la microstructure sera assez simple.

Le chapitre II concerne les aspects thermiques qui s'avèrent fondamentaux pour le procédé de soufflage. En effet, la proximité de Tg rend les propriétés mécaniques très sensibles aux moindres variations de température. Par ailleurs, la très forte viscosité du polymère à ces températures génère une dissipation importante et qui contribue à l'autoéchauffement du matériau. Ces aspects sont explorés via une identification des propriétés thermiques réalisée à partir d'une étude expérimentale de chauffage de plaques en PET par des lampes infrarouge.

Le chapitre III est dédiée à la formulation du problème et à l'implémentation numérique en 2D, en axisymétrique et à la validation du code *via* quelques exemples en isotherme : traction simple et biaxiale essentiellement. Pour le couplage thermo-mécanique, les propriétés thermiques sont identifiées par les essais expérimentaux infra-rouge et implantés dans le code de calcul ce qui permet d'évaluer les effets d'auto-échauffements. Enfin, on simule le soufflage libre et on compare avec les visualisations des bulles soufflées sur le banc et les champs de température visualisés par caméra thermique.

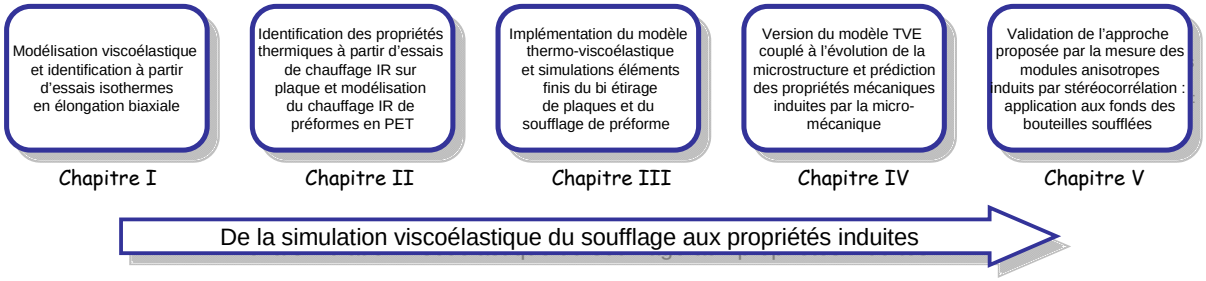


Figure 7 : *Schéma global de la simulation du procédé en relation avec les différents chapitres du mémoire*

Dans le chapitre III, on confronte les résultats de ce nouveau modèle viscoélastique à ceux développés au Queen's Université Belfast dans l'équipe de Gary Menary, en présentant des simulations de soufflage réalisées sous ABAQUS lors de mon stage dans cette équipe en Irlande. Cette confrontation nous amène à proposer une déformation équivalente légèrement différente de ce qui se pratique généralement afin de mieux rendre compte des effets biaxiaux quand la sollicitation biaxiale n'est pas équilibrée. Des soufflages de préformes ont été aussi réalisés expérimentalement afin de comparer la prédiction de l'évolution de la forme et la répartition finale des épaisseurs avec celles mesurée pendant et après le soufflage. Les résultats des simulations montrent qu'il est nécessaire d'introduire une viscosité anisotrope dans le modèle.

Le chapitre IV présente les grandes lignes du travail de Benoit Cosson et la façon de l'appliquer au modèle viscoélastique. Notamment, la construction d'une version anisotrope du modèle et le couplage avec la microstructure sont présentés. Néanmoins, parce qu'il s'agit d'un travail de grande ampleur et faute de temps, il n'a pas été réalisé de simulations numériques avec le modèle couplé à la microstructure. On ne présente donc pas de résultats de propriétés mécaniques induites.

Dès lors, le chapitre V apparait un peu découplé des précédents. On y présente l'importance des propriétés induites en revenant sur les mesures de modules élastiques sur les bouteilles soufflées. Notamment, on présente une étude par stéréo corrélation faite sur les fonds de bouteilles pétaloïdes afin d'estimer les propriétés induites par comparaison essais calculs sur des zones difficilement accessibles à des découpages d'éprouvettes comme cela se pratique classiquement dans les zones régulières de la bouteille soufflée. Il est cependant impossible en l'état de faire une comparaison avec le résultat de la modélisation du procédé.

Le chapitre "perspectives" présentera les pistes du prochain travail envisagé pour introduire l'évolution de la microstructure dans la partie visqueuse du modèle afin de combler le chainon manquant entre les chapitres IV et V. Les techniques d'homogénéisation permettront alors de passer de l'état de la microstructure aux coefficients d'élasticité et de viscosité du matériau devenu anisotrope.

Bibliographie

[BAL 81] R.C. Ball, M. Doi, S.F. Edwards, M. Warner, "Elasticity of entangled networks", Polymer 22, p.1010-1018, 1981.
[BAR 70] V.G. Baranov, A.V. Kenarov, T.I. Volkov, Morphology and kinetics studies of spherulitization of polyethylene terephthalate. J. Polymer Sci., Part C, 30, p.271-282, 1970.

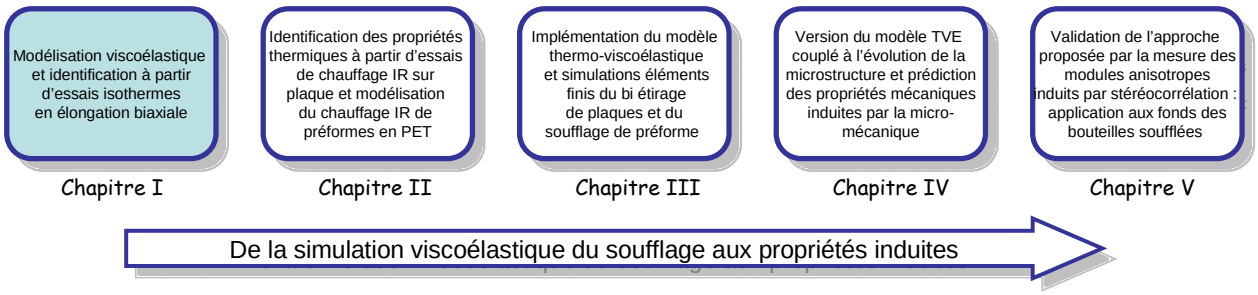
[BAR 95] G. Barakos, E. Mitsoulis, A convergence study for numerical simulation of IUPAC-LDPE extrusion experiments, J. Non-Newt. Fluid Mech., 58, 315-329, 1995.
[BAS 00] J. Baschnagel, K. Binder, P. Doruker, A. A. Gusev, O. Hahn, K. Kremer, W. L. Mattice, F. Müller-Plathe, M. Murat, W. Paul, S. Santos, U. W. Suter et V. Tries; Bridging the gap between atomistic and coarse-grained models of polymers: Status and perspectives, Adv. Polymer Sc. 152, 41-156, 2000.
[BOR 09a] M. Bordival, Modélisation et optimisation numérique de l'étape de chauffage infrarouge pour la fabrication de bouteilles en PET par injection-soufflage, Thèse de doctorat, 2009.
[BOR 09b] M. Bordival, F.M. Schmidt, Y. Le Maoult, V. Velay, Optimization of preform temperature distribution for the stretch-blow moulding of PET bottles: infrared heating and blowing modelling. Pol Eng Sci 49(4):783–793, 2009.
[BUC 95] C.P. Buckley, D.C. Jones. Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition Polymer, 36, 3301-3312, 1995.
[CAK 86] M. Cakmak, J.L. White, J.E. Spruiell. Structural characterization of crystallinity and crystalline orientation in simultaneously biaxially stretched and annealed polyethylene terephthalate films. Journal of Polymer Engineering, 37, 291-312, 1986.
[CHA 93] H. Chang, J.M. Schultz, R.M. Gohil. Morphology of Biaxially Stretched Poly (ethylene terephthalate) Films. Journal Macromoecular Science–Physics, B32 (1), 99-123, 1993.
[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, ENSMP, 2006.
[CHE 99a] L. Chevalier, C. Linhone, G. Régnier, Induced Crystallinity During Stretch-blow Molding Process and its Influence on Mechanical Strength of Poly(Ethylene Terephtalate) Bottles Plastics Rubber & Composites, Processing & application, vol.28 n°8 pp 393-400, 1999.
[CHE 99b] L. Chevalier. Influence of microstructure evolution on mechanical strength of blown polyethylene terephthalate, Plastics Rubber & Composites, Processing & application, vol.28 n°8 pp 385-392, 1999.
[CHE 01] L. Chevalier, Y. Marco, G. Régnier, Modification des propriétés durant le soufflage des bouteilles plastiques en PET, Mécanique & industries 2, p. 229-248, 2001.
[CHE 02] N. Chevaugeon, Contribution à l'étude des membranes hyperélastiques en grandes déformations, Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 2002.
[CHE 06] L. Chevalier and Y. Marco. Identification of a Strain Induced Crystallization Model for PET Under Uni- and Bi-Axial Loading: Influence of Temperature Dispersion, Mech. Mater. 39, 596–609, 2006.
[CHE 10a] L. Chevalier, Y.M. Luo, E. Monteiro. Strain Field Measurement on 3D Surfaces, International Journal of Material Forming, Volume 3(1), p611-614, 2010.
[CHE 10b] L. Chevalier, Y.M. Luo, E. Monteiro, B. Plantamura. Strain Field Measurement on 3D Surfaces: Application to Petaloid Base of PET Bottles under Pressure, International Polymer Processing, Volume XXV, No2, p98-108, 2010.
[CHE 12] L. Chevalier, Y.M. Luo, E. Monteiro, G. Menary. On Visco-elastic Modelling of the Poly Ethylene Terephthalate Behaviour during Multiaxial Elongations Slightly over the Glass Transition Temperature, Mechanics of Material, Volume 52, p103 - 116, 2012.
[COM 05] P. ComBette, I. Ernoult, Physique des polymères, Isabelle Ernoult, Editions Herman, Paris, 2005.
[COS 08] B. Cosson, Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement Thèse de doctorat, 2008.

[COS 09] B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Optimization of the thickness of PET bottle during stretch-blow molding by using a mesh-free (numerical) method. Int Polymer Process 24(3):223–233, 2009.
[COS 10] B. Cosson, L. Chevalier, G. Régnier. Simulation of the stretch blow moulding process: from the modelling of the microstructure evolution to the end-use elastic properties of polyethylene terephthalate bottles. International Journal of Material Forming, 1-15, 2010.
[DEB 98] B. Debbaut, T. Marchal, 3D technology in blow moulding : A numerical simulation, J. Reinforced Plastics Composites, 17(10), pp.882–892, 1998.
[DEL 06] E. Deloy, Effet de l'architecture de chaîne sur le comportement en injection soufflage de copolyesters PET - étude expérimentale-, thèse de doctorat, Ecole de Mines de Paris, 2006.
[DEN 89] G. Denis, Extrusion-soufflage et injection-soufflage. Techniques de l'ingénieur. Ref AM3700, 1989.
[DUP 05] R.B. Dupaix, M.C. Boyce, "Finite strain behavior of poly(ethylene terephthalate) (PET) and poly(ethylene terephthalate)-glycol (PETG)", Polymer 46, p. 4827-4838, no 13, 2005.
[FIG 09] L. Figiel, C.P. Buckley. On the modeling of highly elastic flows of amorphous thermoplastic. International Journal of Non-linear Mechanics, 44, 389-395, 2009.
[FIS 76] E.W. Fischer, S. Fakirov, Structure and properties of polyethylene terephthalate crystallized by annealing in the highly oriented state. J. Mater. Sci., 11,p.1041-1046, 1976.
[GOR 94] D.H. Gordon, R.A. Duckett, I.M. Ward , Polymer, 35, p.2554, 1994.
[GOR 01] E. Gorlier, Caractérisation rhéologique et structurale d'un pet. application au procédé de bi-etirage soufflage de bouteilles, Thèse de Doctorat, ENSMP, 2001.
[HES 06] B. Hess, S. León, N. van der Vegt et K. Kremer; Long time atomistic polymer trajectories from coarse grained simulations: bisphenol-A polycarbonate, Soft Matter 2, 409 – 414, 2006.
[KHA 87] S.A. Khan and R.G. Larson, Comparison of Simple Constitutive Equations for Polymer Melts in Shear and Biaxial and Uniaxial Extensions, J. of Rheology, 31(3),207-234, 1987.
[KHA 94] R.E. Khayat, A. Derdouri, Inflation of hyperelastic cylindrical membranes as applied to blow moulding. Part 1 and 2, Int. J. Numer. Methods Engng., 37, pp. 3773–3791, 1994.
[KRE 02] K. Kremer et F. Müller-Plathe; Multiscale simulation in polymer science, Mol. Sim. 28, 729-750, 2002.
[LAR 01] D. Laroche, R. Diraddo, Thermomechanical modeling, microstructure development and part performance in stretch blow molding, ANTEC'01, 2001.
[LAU 86] H.M. Laun, Prediction of elastic strains of polymer melts in shear and elongation, J. Rheol. 30, 459, 1986.
[LEB 86] G. Le Bourvellec, L. Monnerie, J.P. Jarry. Amorphous orientation and induced crystallization in uniaxially stretched poly(ethylene terephthalate glycol). Polymer, 27, 856-860, 1986.
[LEB 90] G. Le Bourvellec, J. Beautemps. Stretching of PET films under constant load. II. Structural analysis. Journal of Applied Polmer Science, 39, 329-339, 1990.
[LUO 11] Y.M. Luo, L. Chevalier et E. Monteiro. Identification des propriétés élastiques orthotropes par couplage « expérimentation – simulation numérique » : application aux fonds de bouteilles soufflées en PET, Matériaux & Techniques, Volume 99(4), p437 - 448, 2011.
[MAH 00] A. Mahendrasingam, D. J. Blundell, C. Martin, W. Fuller, D. H. Mackerron, J. L. Harvie, R. J. Oldman, R. C. Riekel, "Influence of temperature and chain orientation on the crystallization of poly(ethylene terephtalate) during fast drawing", Polymer 41, p. 7803-7814, 2000.

[MAR 99] L. Martin, D. Stracovsky, D. Laroche, A. Bardetti, R. Ben-Yedder, R. Diraddo, Modeling and experimental validation of the stretch blow molding of PET, ANTEC'99 (NY, USA), 1999.
[MAR 01] Marckmann G, Verron E, Peseux B, Finite element analysis of blow molding and thermoforming using a dynamic explicit procedure. Polymer Eng Sci 41(3):426–439, 2001.
[MAR 02a] Y. Marco, L. Chevalier, G. Régnier, A. Poitou, Induced crystallisation and orientation in poly(ethylene terephthalate) during uniaxial and biaxial elongation, Macromol. Symp., 185, p. 15-34, 2002.
[MAR 02b] Y. Marco, L. Chevalier, M. Chaouche, WAXD study of induced crystallization and orientation in poly(ethylene terephthalate) during biaxial elongation, Polymer 43, p. 6569–6574, 2002.
[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, ENS Cachan, 2003.
[MAR 04] Y. Marco, L. Chevalier et M. Chaouche, Cristallisation et orientation induites du PET sous sollicitations biaxiales, Mécanique & Industries 5, p. 497–505, 2004.
[MAR 08] Y. Marco, L. Chevalier. Microstructure changes in Poly(ethylene terephthalate) in thick specimens under complex biaxial loading, Polymer Engineering and Sciences, Vol. 48, 3, 530-542; 2008.
[McE 98] J.P. McEvoy, C.G. Armstrong, R.J. Crawford, Simulation of the stretch blow molding process of PET bottles, Adv. Polymer Technol., 17(4), pp.339–352, 1998.
[MEN 00] G. H. Menary, C. G. Armstrong, R. J. Crawford, and J. P. McEvoy, Modelling of poly(ethylene terephthalate) in injection stretch-blow moulding. Plastics, Rubber and Composites Processing and Applications, 29, 360-370, 2000.
[MEN 01] G.H. Menary, Ph.D. Thesis, Queen's University Belfast, 2001.
[MEN 12] G.H. Menary, C.W. Tan, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, P.J. Martin. Biaxial Deformation of PET at Conditions Applicable to the Stretch Blow Molding Process. Polymer Engineering & Science, vol. 52, no3, pp. 671-688, 2012.
[PIN 66] P.R. Pinnock, I.M. Ward, Trans. Faraday Soc., 62, p.1308, 1966.
[POP 00] J.A. Pople, G.R. Mitchell, S.J. Sutton, A.S. Vaughan, C.K. Chai. The Development of Organized Structures in Polyethylene Crystallized from a Sheared Melt, Analyzed by WAXS and TEM. Polymer, 40, 2769-2777, 2000.
[SAL 98] D.R. Salem. Microstructure development during constant-force drawing of poly(ethylene terephthalate) film. Polymer, 39, 26, 7067-7077, 1998.
[SCH 96] F.M. Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, L. Dessouter, Viscoelastic simulation of PET stretch/blow molding process, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 64, pp.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 Engineering and Science 38, p. 1399-1412, 1998.
[SMI 74] F. S. Smith, R. D. Steward, The crystallization of oriented poly(ethylene terephthalate), Polymer,15, p.283-286, 1974.
[TIT 97] G. Titomanlio, V. Speranza, V. Brucato. On the simulation of thermoplastic injection moulding process. International Polym. Processing, 12, 45-53, 1997.
[VER 97] E. Verron, Contribution expérimentale et numérique aux procédés de moulage par soufflage et de thermoformage, Thèse de Docorat, Ecole Centrale de Nantes, 1997.
[VIG 97] M. Vigny, J.F. Tassin, A. Gibaud, G.J. Lorentz. Study of the molecular structure of PET films obtained by an inverse stretching process. Part I: Constant speed drawing of amorphous films. Polymer Engineering and Science, 37, 11, 1785-1794, 1997.
[WAN 00] S. Wang, A. Makinouchi, T. Nakagawa, 3D viscoplastic FEM simulation of a stretch blow molding process, International Journal for Numerical Methods in Engineering 48, p. 501-521, 2000.

[YAN 04a] Z. J. Yang, E. Harkin-Jones, G. H. Menary and C. G. Armstrong, “A Non-Isothermal Finite Element Model for Injection Stretch-Blow Molding of PET Bottles With Parametric Studies ”. Polymer Engineering and Science. Vol 44, n°7, pp 1379-1390. July, 2004.
[YAN 04b] Z.J. Yang, E. Harkin-Jones, G.H. Menary, and C.G.Armstrong, Coupled temperature-displacement modelling of injection stretch-blow moulding of PET bottles using Buckley model, Journal of Materical Processing Technology 153-154, 20-27, 2004.
[YUA 00] J.Z. Yuan, Improving accuracy of blow molding simulation, ANTEC’00, 2000.

Chapitre I
Modélisation du comportement viscoélastique thermo dépendant du PET



I.1. Introduction

Pendant le procédé d'étirage soufflage, le matériau PET est soumis à des vitesses de déformation élevées et à de grandes déformations multiaxiales dans une plage de température légèrement au dessus de la température de transition vitreuse Tg et suffisamment en dessous de la température de cristallisation Tc permettant ainsi au matériau de rester translucide. Dans ces conditions sévères, la réponse mécanique du PET est caractérisée par :

(i) une viscosité prononcée, illustrée par une forte sensibilité à la vitesse de déformation ;

(ii) une élasticité mise en évidence par une relaxation des contraintes, visible dès la fin de la sollicitation ;

(iii) un effet de durcissement important à partir d'un taux d'étirage "critique". Cet effet dépend des conditions de température et de vitesse.

Afin de simuler précisément le procédé et d'avoir une bonne prédiction des effets thermiques et des évolutions de géométrie, il est nécessaire de représenter ce comportement mécanique dans un modèle constitutif. L'essai de traction uniaxiale peut fournir des informations pour l'identification et la validation du modèle, mais, en raison de la forte anisotropie des chaînes moléculaires et en raison des chemins de déformation complexes qui apparaissent dans le polymère lors de la fabrication, il est plus fiable d'identifier la réponse mécanique du PET sous des sollicitations proches de celles rencontrées durant l'étape de production de bouteilles par soufflage par bi-orientation. C'est la raison pour laquelle l'identification sera faite sur des résultats expérimentaux de traction biaxiale à forte vitesse de déformation. Le modèle constitutif construit doit être capable de reproduire ces expériences durant lesquelles le polymère est soumis à des modes de déformation plus représentatifs du procédé que la traction simple.

L'identification des caractéristiques du matériau peut être faite à partir des données expérimentales d'essais de traction uniaxiale et biaxiale réalisés sur un échantillon de PET à une température légèrement supérieure à la température de transition vitreuse Tg. Dans une des dernières versions du modèle viscoplastique proposé par Chevalier et Marco [CHE 06], Cosson couple l'effet de durcissement observé au cours de la tension aux modifications de la microstructure du PET induites par la déformation via des variables : taux de cristallisation et facteur d'orientation.

Néanmoins ce modèle viscoplastique n'est pas apte à représenter la phase de relaxation après la tension. Seul un comportement viscoélastique pour le PET, est capable de prendre en

compte les effets de retour élastique que l'on observe expérimentalement lorsque l'on stoppe brutalement la pression.

Certains auteurs [LAU 86], [KHA 87], [BAR 95] ont utilisé les lois viscoélastiques. Deux types d'équations constitutives sont généralement utilisées pour décrire un modèle viscoélastique : les équations constitutives intégrales (par exemple le modèle KBKZ) ; les équations constitutives différentielles (par exemple les modèles de Maxwell surconvecté, Giesekus, Phan-Thien-Tanner, Larson). La principale limitation des modèles viscoélastiques classiques est qu'ils ne permettent pas de modéliser le durcissement constaté. Schmidt *et al.* [SCH 96] par exemple, ont simulé le procédé d'étirage soufflage à l'aide d'une loi viscoélastique. Même si le modèle Maxwell est modifié par l'utilisation d'une dérivée convective, ce comportement n'est pas capable de modéliser l'effet de durcissement et ne reproduit pas l'évolution de la forme de la préforme au cours du soufflage. De plus, les modèles viscoélastiques classiques (Maxwell surconvecté [BAR 95] etc.) montrent des limites (instabilité) lorsque la vitesse de déformation devient aussi élevée que celle rencontrée lors du procédé. Cette vitesse est typiquement supérieure à 50 s^{-1}, elle génère les problèmes de stabilité pour la simulation numérique. Nous illustrerons plus particulièrement les limites des modèles classiques de la viscoélasticité dans la première partie de ce chapitre.

Afin d'améliorer ce modèle de comportement, Buckley *et al.* [BUC 95] ont proposé un modèle viscoélastique avec une approche classique qui est basée sur l'addition du tenseur de gradient de la vitesse de déformation de la partie élastique et de celui de la partie visqueuse. La partie élastique étant liée à la microstructure et présentant un effet durcissant. Menary *et al.* [MEN 00] ont examiné trois différents modèles de comportement : le modèle hyperélastique (Ogden), le modèle de fluage et le modèle viscoélastique (modèle Buckley) pour la simulation du procédé, ils ont constaté que le modèle Buckley donne un meilleur résultat que les deux autres modèles en termes de prédiction de la distribution de l'épaisseur de bouteille.

Plus récemment, Figiel et Buckley [FIG 09] on posés le cadre de famille de modèles viscoélastiques adaptés aux matériaux présentant une forte élasticité. Inspiré de cette famille de modèle, l'hypothèse d'une décomposition additive des tenseurs gradients des vitesses de déformations élastiques et visqueuses est adoptée pour décrire la structure cinématique des modèles constitutifs. Ce choix, avec l'hypothèse du tenseur des taux de rotation visqueux égale à zéro, conduit à l'équation Leonov [LEO 76] et ne génère pas singularités quand le taux de déformation est élevé pendant la tension uniaxiale ou biaxiale. Avec ce modèle, la vitesse de déformation visqueuse et de la déformation élastique ne sont pas proportionnels à la déformation globale et la vitesse de déformation globale. La base de cette approche viscohyperélastique est présentée dans la deuxième section de ce chapitre.

Afin d'identifier le modèle que nous proposons, il est nécessaire de disposer de résultats expérimentaux de tests de tension multiaxiaux réalisés sur des échantillons de PET sous condition de vitesse de déformation et de température proches de celles du procédé d'étirage soufflage. De nombreuses solutions techniques ont été proposées pour réaliser des essais de traction biaxiale et afin de récolter des données pour caractériser le comportement des polymères. Un premier type d'essai est basé sur des machines industrielles afin d'obtenir des conditions expérimentales très proches du procédé industriel : étirage biaxial de films ([FAI 97], [VIG 97], [MIC 11]), avec la vitesse constante ou la force d'étirage constante ; soufflage d'un échantillon plat généralement circulaire (feuille de polymère) en utilisant une pression hydraulique ou pneumatique. Dans ce genre de test, la zone polaire est principalement observée car elle présente un comportement proche d'élongation equi-biaxiale.

De nombreux auteurs ont développés leur propres installations expérimentales ([TRE 44], [HAR 66], [ODG 72], [FEN 76], plus récemment [VER 97]). Dans le cas de l'étirage et soufflage d'un cylindre, les premiers tests ont été tentés par Alexander [ALE 71], les mêmes principes ont été utilisés plus récemment par Benjeddou *et al.* [BEN 93] pour caractériser de nombreux caoutchoucs. Certains essais d'étirage et soufflage ont été réalisés, sur les machines industrielles ([SCH 95], [ROD 97]), ou sur des installations expérimentales ([CAK 85], [HAE 93], [GOR 01]). Des tests ont été réalisés dans un moule ou en laissant gonfler librement la préforme. L'avantage principal de ces tests est que les données sont obtenues à des conditions qui sont proches au procédé industriel. L'inconvénient majeur est qu'il peut être difficile d'obtenir des données fiables en raison de la complexité du champ de déformation sur l'échantillon. De plus, il n'est pas facile de contrôler et de mesurer les paramètres d'entrée importants, tels que la température et la vitesse de déformation.

D'autres méthodes consistent à étirer une éprouvette dans une machine spéciale conçue afin d'imiter le mode de déformation du procédé industriel. L'échantillon plan peut être étiré dans une ou l'autre des deux directions principales, avec des forces et des vitesses indépendantes. L'échantillon peut être épais ([OBA 70], [MEI 87], [SWE 97], [MAR 03]) ou mince ([CHA 93a], [CHA 93b], [BUC 96], [MAT 97]). Il n'y a pas beaucoup d'installations développées pour ces essais, car il est difficile d'assurer des déformations homogènes et les pinces sont complexes à concevoir et à utiliser. L'avantage principal de ce type de test est que les données expérimentales peuvent être bien maîtrisées. Le pilotage de la vitesse donne une vitesse de déformation homogène et d'évolution connue au cours du temps. La température est également homogène mais la puissance dissipée par la déformation conduit à un auto-échauffement dont on ne connait pas bien l'évolution. Ce dernier point nous amènera (Chapitre III) à effectuer un ajustement de l'identification (chapitre I).

Les essais de compression plane peuvent aussi également être effectués afin de générer des déformations complémentaires aux tractions uniaxiales et aux tractions biaxiales. Le principe consiste à compresser le long d'une direction un échantillon prismatique en maintenant constante la longueur d'origine le long d'une des directions orthogonales. Ces tests ont été utilisés pour les élastomères [ARR 93], mais aussi pour le PET ([BEL 93], [BOY 00]). L'essai de traction plane (ou cisaillement pur) est largement utilisé et très commun pour les caoutchoucs, car il est facile à réaliser. Le principe consiste à utiliser un échantillon avec une faible hauteur par rapport à sa largeur et à imposer un étirement dans le sens de la hauteur. Il est généralement supposé que la sollicitation est proche de déformation plane (ou cisaillement pur), même si cette hypothèse n'est plus acceptable pour des allongements trop élevés [CHE 02].

Menary *et al.* [MEN 12], ont récemment mis au point une machine d'essai multiaxiale à Queen's University of Belfast. Elle permet de réaliser les essais de traction biaxiale (équibiaxiale ou séquentielle) sous de vitesses de déformation élevées (jusqu'à $32s^{-1}$) avec différentes températures et vitesses de déformation. Ces essais sont utilisés dans la dernière partie de ce chapitre pour enrichir le modèle présenté dans la deuxième partie et gérer l'identification de l'effet de durcissement. Les formes non linéaires des caractéristiques élastiques G (le module de cisaillement) et visqueux η (la viscosité) sont proposées et identifiées. Nous avons également modélisé et identifié l'effet de la température sur le comportement de PET.

I.2. Modèle viscoélastique classique

Les études récentes mécaniques du comportement du PET apportent une connaissance macroscopique de l'effet de l'étirage soufflage à des températures proches de Tg. Sous ces conditions, le PET peut être décrit par une loi de comportement macroscopique viscoélastique. Nous présentons ici quelques uns de ces modèles classiques et leurs limitations.

I.2.1 Maxwell surconvecté

La loi de comportement du modèle de Maxwell s'écrit :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \underline{\underline{S}} = 2\eta \underline{\underline{D}} \tag{I.1}$$

avec θ représente le temps caractéristique de relaxation tel que $\theta = \eta / G$, G le module de cisaillement, $\underline{\underline{S}}$ le tenseur des extra-contraintes, η la viscosité, $\underline{\underline{D}}$ le tenseur des vitesses de déformation. Compte tenu de la condition d'incompressibilité, le tenseur des contraintes de Cauchy $\underline{\underline{\sigma}}$ est obtenu en ajoutant un terme de pression p :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{S}} - p\underline{\underline{I}} \tag{I.2}$$

La dérivée $\delta / \delta t$ est une dérivée convective nécessaire compte tenu des grandes transformations générées par le procédé. La forme la plus générale est donnée par Johnson et Segalman :

$$\frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} = \dot{\underline{\underline{S}}} + \underline{\underline{S}}\underline{\underline{\Omega}} - \underline{\underline{\Omega}}\underline{\underline{S}} - a\left(\underline{\underline{S}}\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}}\underline{\underline{S}}\right) \tag{I.3}$$

Lorsque le paramètre a est nul, la dérivée porte le nom de dérivée de Jaumann, pour a = -1, on obtient la dérivée sous convectée et pour a = 1 on trouve la dérivée surconvectée d'Oldroyd qui est classiquement utilisé pour les polymères fondus.

Lors de soufflage, le polymère est fortement étiré, on s'intéresse donc plus particulièrement à son comportement en traction. Pour réaliser de façon standard un essai au cours duquel la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ reste constante, il convient d'imposer aux mors de l'éprouvette une loi de vitesse bien déterminée. L'utilisation d'un rhéomètre de Meissner [COU 02] (voir la figure I.1) développé par Meissner par les années 1970 peut résoudre cette difficulté en réalisant l'étirage entre des rouleaux de rayon R tournant à vitesse constante. La longueur L est fixe entre les rouleaux ce qui conduit à une vitesse de déformation :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{R\Omega}{L} = cst \tag{I.4}$$

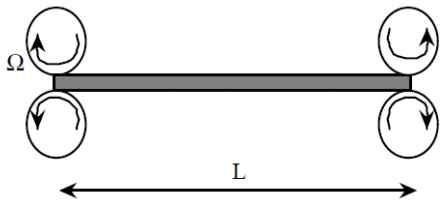


Figure I.1 : *Le rhéomètre de Meissner*

Dans le cas d'une élongation uniaxiale à vitesse de déformation constante β suivant l'axe $\underline{X}$, quand on fait la simulation la régime stationnaire, on en déduit la contrainte longitudinale (le détail des calculs se trouve dans l'Annexe A.1) :

$$\sigma = \frac{3\eta\beta}{(1-2a\theta\beta)(1+a\theta\beta)} \tag{I.5}$$

Ce qui donne la viscosité élongationnelle $\overline{\eta}$ normée par 3η :

$$\frac{\overline{\eta}}{3\eta} = \frac{1}{(1-2a\theta\beta)(1+a\theta\beta)} \tag{I.6}$$

Ce modèle devient instable lorsque la vitesse de déformation β passe à la valeur limite de $1/2a\theta$. La figure I.2 illustre que ce modèle est limité en vitesse de déformation admissible par l'atteinte d'une asymptote. Dans le cas a=1, $\theta = 0{,}02s$, β doit être inférieur à $25s^{-1}$. En outre, ce modèle montre un effet de rhéo épaississement mais pas d'effet de durcissement avec la déformation, ce qui est en contradiction avec les résultats expérimentaux.

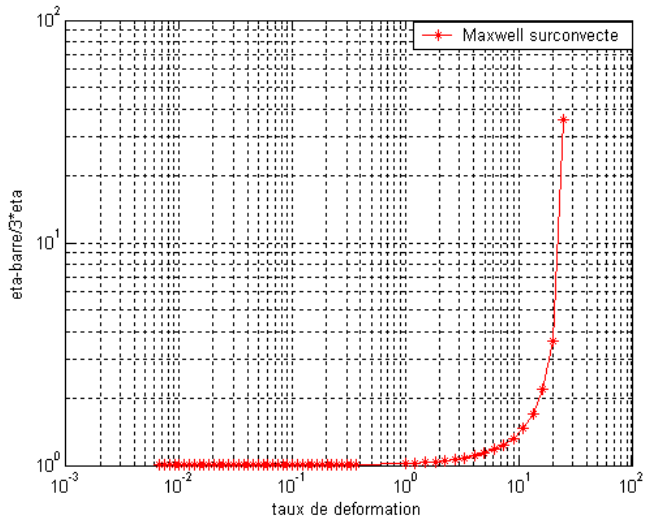


Figure I.2 : *L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Maxwell surconvecté*

I.2.2 Oldroyd B

Oldroyd [OLD 50] a proposé le modèle Oldroyd B qui peut être considéré comme une extension du modèle Maxwell surconvecté :

$$\underline{\underline{S}} = 2\eta_s \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{\tau}} \tag{I.7}$$

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{\tau}}}{\delta t} + \underline{\underline{\tau}} = 2\eta_p \underline{\underline{D}} \tag{I.8}$$

où η_s et η_p sont deux viscosités qui s'appellent la 'viscosité du solvant' et la 'viscosité du polymère'. Lorsque η_s = 0, on trouve le modèle de Maxwell surconvecté. Dans ce cas là, l'évolution de la viscosité élongationnelle dépend les deux valeurs de viscosité.

I.2.3 Giesekus

La loi de comportement du modèle de Giesekus qui est un peu modifiée à partir du modèle de Maxwell s'écrit :

$$\theta \frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \underline{\underline{S}} + \frac{\alpha}{G}\underline{\underline{S}}^2 = 2\eta \underline{\underline{D}} \tag{I.9}$$

où α est un paramètre adimensionnel.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{S}} - p\underline{\underline{I}} \tag{I.10}$$

Dans le cas d'une élongation uniaxiale (le détail des calculs se trouve dans l'Annexe A.2), la viscosité élongationnelle $\overline{\eta}$ normée par 3η :

$$\frac{\overline{\eta}}{3\eta} = \frac{3a\theta\beta + \sqrt{(1-2a\theta\beta)^2 + 8\alpha\theta\beta} - \sqrt{(1+a\theta\beta)^2 - 4\alpha\theta\beta}}{6\alpha\theta\beta} \tag{I.11}$$

D'après équation I.11, on montre que l'existence de la solution dépend d'une condition mathématique :

$(1+a\theta\beta)^2 - 4\alpha\theta\beta > 0 \Rightarrow$

$$\beta > \frac{\theta(2\alpha - a) + \sqrt{(a-2\alpha)^2\theta^2 - a^2\theta^2}}{a^2\theta^2} \text{ ou } \beta < \frac{\theta(2\alpha - a) - \sqrt{(a-2\alpha)^2\theta^2 - a^2\theta^2}}{a^2\theta^2} \tag{I.12}$$

A partir de cette condition sur la vitesse de déformation β (Eq. I.12), on peut distinguer deux cas sur le choix des paramètres a et α :

(i) $(a-2\alpha)^2 - a^2 > 0 \Rightarrow \alpha > a$

Dans ce cas là, la vitesse de déformation β doit respecter les conditions de Eq. I.12, si non, ce modèle devient instable. La figure I.3a montre dans le cas a=1, α=1,2, $\theta = 0{,}02s$, il y a évidemment une zone interdite pour la valeur de β.

(ii) $(a-2\alpha)^2 - a^2 < 0 \Rightarrow \alpha < a$

Sous cette condition là, Eq. I.12 nous donne les résultats complexes. Cela veut dire qu'il n'y a pas de condition imposée dans l'espace réel. Au contraire du premier cas, quand $\alpha < a$, il n'y a pas des valeurs limites pour la vitesse de déformation β. La figure I.3b illustre quand a=1, α=0,4, $\theta = 0{,}02s$, il n'y a pas les valeurs interdites pour β.

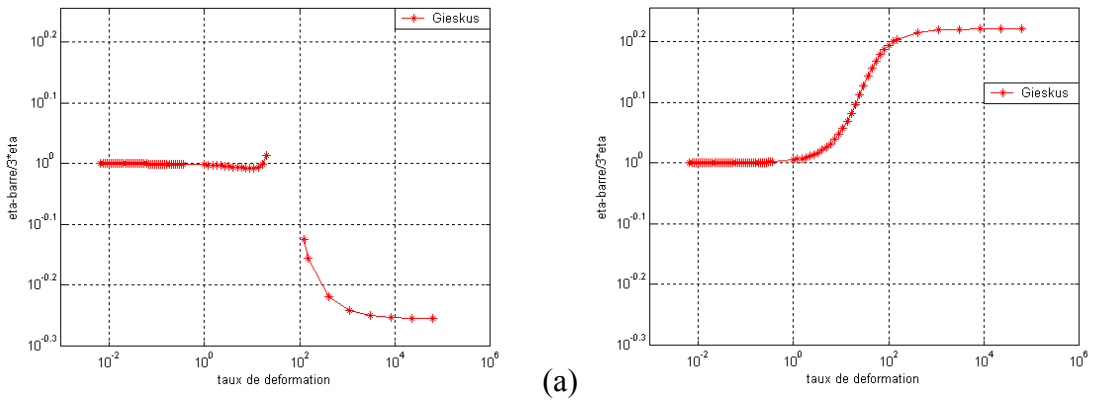


Figure I.3 : *L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par 3η_0 en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Giesekus : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0.4*

I.2.4 Phan Thien et Tanner

On ajoute un terme quadratique en extra contrainte $(tr(\underline{\underline{S}})\underline{\underline{S}})$ sur le modèle de Maxwell surconvecté pour obtenir le modèle de Phan Thien et Tanner (P.T.T.), où tr est l'opérateur de trace sur le tenseur. Ce modèle peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\theta\frac{\delta\underline{\underline{S}}}{\delta t} + \left(1 + \frac{\alpha}{G}tr(\underline{\underline{S}})\right)\underline{\underline{S}} = 2\eta\underline{\underline{D}} \tag{I.13}$$

Après les calculs (détaillés dans Annexe A.3), on trace l'évolution de la viscosité élongationnelle normée par 3η_0 en fonction de la vitesse de déformation dans la figure I.4 avec les valeurs de paramètres :

a=1, $\eta_0 = 1000 Pa \cdot s$, $\theta = 0{,}02 s$, $\alpha = 1{,}2$ (Fig. I.4a), $\alpha = 0{,}4$ (Fig. I.4b).
On voit qu'il n'y a pas les limites sur β.

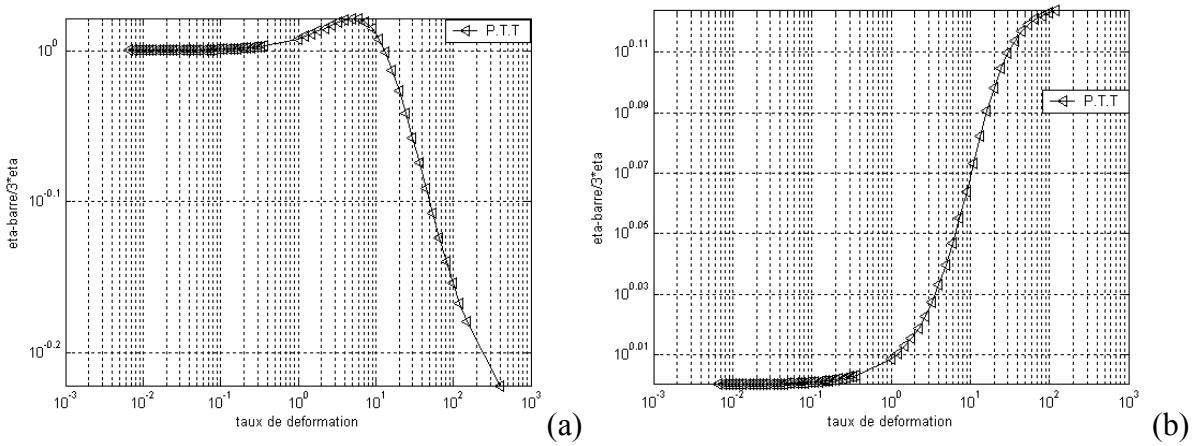


Figure I.4 : *L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de P.T.T. : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0,4*

I.2.5 Larson

La loi de comportement du modèle de Larson s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} + \frac{1}{\theta}\left(\underline{\underline{S}} - G\underline{\underline{I}}\right) + \frac{2\alpha}{3G}\left(\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{S}}\right)\underline{\underline{S}} = 0 \qquad \text{(I.14)}$$

On a testé le même cas : l'état stationnaire d'une élongation uniaxiale. Figure I.5 nous montre qu'avec $\alpha = 0{,}4$, il n'y a pas de limites pour le taux de déformation, cependant la viscosité élongationnelle est négative, alors que dans le cas où $\alpha = 1{,}2$, la viscosité est positive.

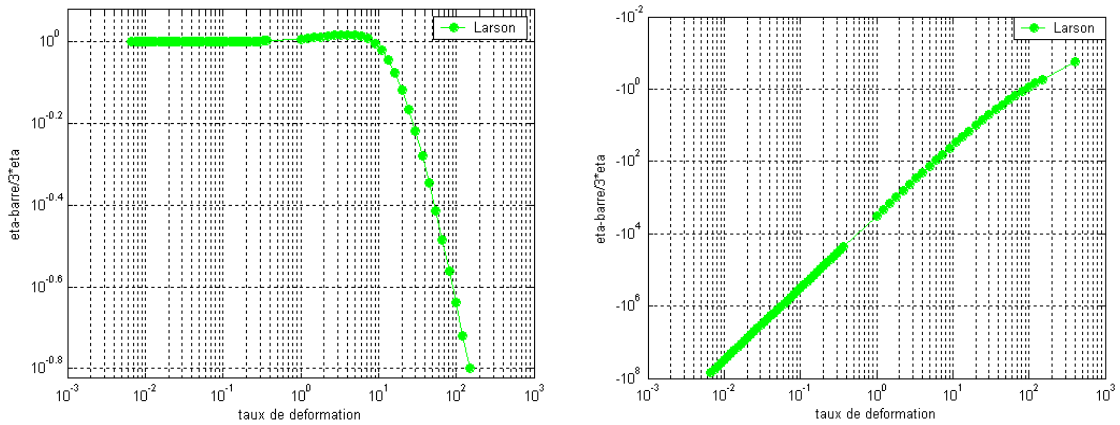


Figure I.5 : *L'évolution de la viscosité élongationnelle normée par $3\eta_0$ en fonction de la vitesse de déformation pour le modèle de Larson : (a) a=1, α =1,2 ; (b) a=1, α =0,4*

Ces modèles viscoélastique classiques sont séduisants, notamment Giesekus, PTT ou Larson, par leur simplicité et possèdent *a priori* des propriétés intéressantes pour décrire le comportement du PET (ils permettent de décrire aisément la dépendance à la vitesse) mais certains sont limités en vitesse de déformation admissibles et ne rendent pas compte de l'effet durcissant. Dans la partie suivante, nous proposerons un modèle viscohyperélastique inspiré par le modèle de Figiel et Buckley bien adapté à la modélisation des polymères fortement élastiques.

I.3. Un modèle viscohyperélastique proposé

I.3.1 Modèle présentation

Figiel et Buckley [FIG 09] ont construit un modèle viscoélastique adapté pour les polymères hautement élastiques associés à une partie visqueuse. Ils ont proposé deux voies pour représenter le modèle viscoélastique. Une approche est basée sur l'addition du tenseur de gradient de la vitesse de déformation de la partie élastique et celui de la partie visqueuse : $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D_e}} + \underline{\underline{D_v}}$; l'autre est basée sur la multiplication du gradient de la transformation de la partie élastique et celui de la partie visqueuse : $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F_e}}\,\underline{\underline{F_v}}$. Dans une première approche, la partie élastique est considérée comme une partie de Neo Hookéenne solide et compressible ; la partie visqueuse est considérée comme un fluide Newtonien. Dans leur proposition, seule la partie visqueuse est considérée incompressible, la variation de volume sous pression est supposée être purement élastique. Dans notre étude et les développements qui suivent, compte tenu de la difficulté à obtenir des données pour identifier la variation de volume, nous considérons que les deux parties sont incompressibles.

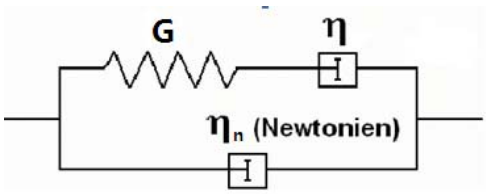


Figure I.6 : *Représentation rhéologique du modèle*

Dans cette étude, le comportement mécanique du PET est caractérisé par un modèle visco hyperélastique dont la représentation rhéologique peut être donnée par la figure I.6. Il se compose d'une branche de type "Maxwell" en parallèle avec un élément visqueux newtonien (comme dans le modèle d'Oldroyd B en grandes transformations). En supposant que chaque partie est incompressible, dans le cas linéaire (le module de cisaillement G et la viscosité η sont constantes), la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ est donnée par l'une des relations suivantes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \left(2\eta_n \underline{\underline{D}} - p\underline{\underline{I}}\right) + \left(2G\underline{\underline{\varepsilon_e}} - p_e \underline{\underline{I}}\right) \tag{I.15}$$

$$\underline{\underline{\sigma}} = \left(2\eta_n \underline{\underline{D}} - p\underline{\underline{I}}\right) + \left(2\eta \underline{\underline{D_v}} - p_v \underline{\underline{I}}\right) \tag{I.16}$$

où G est le module de cisaillement tandis que η et η_n représentent les viscosités. Les tenseurs $\underline{\underline{D}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ sont les parties symétriques du gradient de vitesse et du gradient de vitesse visqueux de la partie "Maxwell". Le tenseur $\underline{\underline{\varepsilon_e}}$ représente la déformation Eulérienne de la partie élastique défini par :

$$\underline{\underline{\varepsilon_e}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{B_e}} - \underline{\underline{I}}\right) \tag{I.17}$$

avec $\underline{\underline{B_e}}$ qui est la partie élastique du tenseur de déformation de Cauchy gauche :

$$\underline{\underline{B_e}} = \underline{\underline{F_e}}\,\underline{\underline{F_e}}^T \tag{I.18}$$

$\underline{\underline{F_e}}$ désigne la partie élastique du gradient de déformation. Les fonctions scalaires p, p_e et p_v désignent les pressions hydrostatiques associées à l'incompressibilité de l'ensemble, de la partie élastique et de la partie visqueuse de la branche "Maxwell", c'est-à-dire :

$$\begin{cases} \det \underline{\underline{B_e}} = 1 \\ div\vec{V}_v = trace\underline{\underline{D_v}} = 0 \\ div\vec{V} = trace\underline{\underline{D}} = 0 \end{cases} \tag{I.19}$$

Dans ce qui suit, nous allons nous concentrer sur l'hypothèse de l'additivité des vitesses de déformation élastiques et visqueuses :

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D_e}} + \underline{\underline{D_v}} \tag{I.20}$$

En introduisant les équations I.17 et I. 20 dans l'Eq. I.15 et I.16, on obtient :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\eta_n \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{\hat{\sigma}}} - p\underline{\underline{I}} - q\underline{\underline{I}} \tag{I.21}$$

avec $q = p_e + G + trace(B_e) = p_v$

et $\underline{\underline{\hat{\sigma}}} = G\underline{\underline{\hat{B}_e}} = 2\eta \underline{\underline{D_v}} \quad \Rightarrow \underline{\underline{D_v}} = \dfrac{G}{2\eta}\underline{\underline{\hat{B}_e}}$ (I.22)

où l'indice "^" désigne la partie déviatorique du tenseur.

A ce stade, il est nécessaire de compléter ces équations par une relation entre les tenseurs de déformations et les tenseurs cinématiques. En grandes déformations, la simple dérivée temporelle (dérivée particulaire) n'est pas objective. Si on privilégie la dérivée d'Oldroyd parmi les dérivées convectives, on peut écrire :

$$\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} = \underline{\underline{\dot{B}_e}} - \underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{B_e}} - \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{L^T}} \tag{I.23}$$

où $\underline{\underline{L}}$ est le tenseur gradient des vitesses de déplacement :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\dot{F}}}\,\underline{\underline{F}}^{-1} \tag{I.24}$$

Compte tenu de la définition de $\underline{\underline{B_e}}$ (Eq. I.18), la dérivée temporelle écrit :

$$\underline{\underline{\dot{B}_e}} = \overbrace{\underline{\underline{F_e}}\,\underline{\underline{F_e^T}}}^{*} = \underline{\underline{\dot{F}_e}}\,\underline{\underline{F_e^{-1}}}\,\underline{\underline{F_e}}\,\underline{\underline{F_e^T}} + \underline{\underline{F_e}}\,\underline{\underline{F_e^T}}\,\underline{\underline{F_e^{-T}}}\,\overbrace{\underline{\underline{F_e^T}}}^{*} = \underline{\underline{L_e}}\,\underline{\underline{B_e}} + \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{L_e^T}} \tag{I.25}$$

où $\underline{\underline{L_e}}$ est le tenseur gradient des vitesses élastique.

En introduisant l'équation I.25 dans I.23, on obtient :

$$\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} = \left(\underline{\underline{L_e}} - \underline{\underline{L}}\right)\underline{\underline{B_e}} + \underline{\underline{B_e}}\left(\underline{\underline{L_e^T}} - \underline{\underline{L^T}}\right) = -\underline{\underline{L_v}}\,\underline{\underline{B_e}} - \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{L_v}} \tag{I.26}$$

où $\underline{\underline{L_v}}$ est le tenseur gradient des vitesses élastique. L'approche utilisée est celle de l'additivité des vitesses de déformation élastique et visqueuse. Comme il est expliqué dans [FIG 09] la partition du taux de rotation n'a pas de sens physique : il est supposé purement élastique :

$$\underline{\underline{\Omega}} = \underline{\underline{\Omega_e}}\,,\ \underline{\underline{\Omega_V}} = 0 \tag{I.27}$$

où $\underline{\underline{\Omega}}$, $\underline{\underline{\Omega_e}}$ et $\underline{\underline{\Omega_v}}$ désignent respectivement les taux de rotation global, élastique et visqueux :

$$\underline{\underline{\Omega}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L}} - \underline{\underline{L^T}}\right),\ \underline{\underline{\Omega_e}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L_e}} - \underline{\underline{L_e^T}}\right),\ \underline{\underline{\Omega_v}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L_v}} - \underline{\underline{L_v^T}}\right) \tag{I.28}$$

Le taux de déformation est la partie symétrique du tenseur gradient des vitesses $\underline{\underline{L}}$:

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L^T}}\right),\ \underline{\underline{D_e}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L_e}} + \underline{\underline{L_e^T}}\right),\ \underline{\underline{D_v}} = \frac{1}{2}\left(\underline{\underline{L_v}} + \underline{\underline{L_v^T}}\right) \tag{I.29}$$

Si on prend aussi en compte l'hypothèse du taux de rotation visqueux nul, on a :

$$\underline{\underline{L_V}} = \underline{\underline{D_V}} \tag{I.30}$$

L'utilisation de l'équation I.30 dans I.26 conduit à :

$$\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} = -\underline{\underline{D_v}}\,\underline{\underline{B_e}} - \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{D_v}} \tag{I.31}$$

En introduisant équation I.22 dans I.31, on obtient finalement :

$$\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} + \frac{G}{\eta}\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\hat{B}_e}} = 0 \tag{I.32}$$

I.3.2 Elongations uniaxiale et équi-biaxiale

Dans les cas d'élongations uniaxiale et équi-biaxiale homogènes sur le plan de l'éprouvette, on peut résoudre l'équation I.15 et I.16 en substituant dans l'équation I.32. L'évolution de la contrainte σ_U ou σ_B en fonction du temps est montrée dans la figure I.7. Afin d'être cohérent avec les résultats expérimentaux en traction biaxiale présentés plus tard, la vitesse de déformation nominale β est considérée comme constante. Par conséquent, la vitesse de déformation vraie est égale à :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\beta}{1+\beta t} \tag{I.33}$$

Dans le cas d'une élongation uniaxiale à vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ suivant l'axe $\underline{X}$ (problème de contraintes planes de normale $\underline{Z}$), le taux de déformation total $\underline{\underline{D}}$, le tenseur de déformation de Cauchy gauche $\underline{\underline{B}}$ et la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ sont de la forme :

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon}/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\varepsilon}/2 \end{bmatrix},\ \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1/\lambda \end{bmatrix},\ \underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{I.34}$$

où λ désigne l'étirage. Il convient de noter que les tenseurs de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ ne sont pas nécessairement proportionnels aux tenseurs globaux $\underline{\underline{B}}$ et $\underline{\underline{D}}$. On peut écrire le tenseur de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ sous les formes suivantes :

$$\underline{\underline{B_e}} = \begin{pmatrix} \lambda_e^2 & 0 & 0 \\ 0 & \mu_e^2 & 0 \\ 0 & 0 & \dfrac{1}{\lambda_e^2\mu_e^2} \end{pmatrix},\ \underline{\underline{D_v}} = \begin{pmatrix} \dot{\alpha}_v & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\beta}_v & 0 \\ 0 & 0 & -\left(\dot{\alpha}_v + \dot{\beta}_v\right) \end{pmatrix} \tag{I.35}$$

où λ_e et μ_e sont respectivement les allongements élastiques dans des directions $\underline{X}$ et $\underline{Y}$.

L'élongation élastique dans la direction $\underline{Z}$ est obtenue par la condition incompressibilité de la partie élastique. La vitesse de déformation visqueuse dans la direction $\underline{Z}$ est donnée par la condition incompressibilité de la partie visqueuse. Dans le cas d'élongation uniaxiale, à partir de l'équation I.21 et I.34, on a :

$$\begin{cases} \sigma_{22} = G\mu_e^2 - p - q + 2\eta_n \cdot \left(-\dot{\varepsilon}/2\right) = 0 \\ \sigma_{33} = G\dfrac{1}{\lambda_e^2\mu_e^2} - p - q + 2\eta_n \cdot \left(-\dot{\varepsilon}/2\right) = 0 \end{cases} \tag{I.36a}$$

$$\text{et} \begin{cases} \sigma_{22} = 2\eta\dot{\beta}_v - p - q + 2\eta_n \cdot \left(-\dot{\varepsilon}/2\right) = 0 \\ \sigma_{33} = -2\eta\left(\dot{\alpha}_v + \dot{\beta}_v\right) - p - q + 2\eta_n \cdot \left(-\dot{\varepsilon}/2\right) = 0 \end{cases} \tag{I.36b}$$

On obtient finalement :

$$\mu_e^2 = \frac{1}{\lambda_e^2 \mu_e^2} \text{ et } \dot{\beta}_v = -\left(\dot{\alpha}_v + \dot{\beta}_v\right) \quad \Rightarrow \mu_e^2 = 1/\lambda_e \text{ et } \dot{\beta}_v = -\dot{\alpha}_v/2 \tag{I.37}$$

On introduit cette relation dans l'équation de $\underline{\underline{B_e}}$, afin d'obtenir :

$$2\lambda_e\dot{\lambda}_e - 2\beta\lambda_e^2 + \frac{1}{\theta}\lambda_e^2\left(\lambda_e^2 - \frac{\mu_e^2 + \lambda_e^2 + 1/\left(\mu_e^2\lambda_e^2\right)}{3}\right) = 0 \tag{I.38a}$$

Après les simplifications, on obtient :

$$\frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e} + \frac{1}{3\theta}\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e\right) = \dot{\varepsilon} \tag{I.38b}$$

En l'absence de solution analytique simple, on utilise la méthode d'Euler implicite pour calculer numériquement la valeur de λ_e.

$$\frac{\lambda_e^{t+dt} - \lambda_e^{t}}{dt\lambda_e^{t+dt}} + \frac{1}{3\theta}\left(\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 - 1/\lambda_e^{t+dt}\right) = \dot{\varepsilon} \tag{I.39}$$

Une fois connue l'évolution de λ_e, celle de la contrainte σ est donnée par :

$$\sigma_U = 3\eta_n\dot{\varepsilon} + G\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e\right) \tag{I.40}$$

Bien que déterminée partiellement par une approche numérique, cette solution sera désignée comme semi-analytique en regard de celle obtenue par éléments finis *via* la formulation variationelle.

Dans le cas d'une élongation equi-biaxiale à vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ suivant les axes $\underline{X}$ et $\underline{Y}$, le taux de déformation total $\underline{\underline{D}}$, le tenseur de déformation de Cauchy gauche $\underline{\underline{B}}$ et la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ sont de la forme :

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -2\dot{\varepsilon} \end{bmatrix}, \ \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\lambda^4 \end{bmatrix}, \ \underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_B & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{I.41}$$

On peut aussi écrire le tenseur de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ sous les formes données dans l'équation I.35. Dans le cas d'élongation equi-biaxiale, on a donc :

$$\begin{cases} \sigma_{11} = G\lambda_e^2 - p - q + 2\eta_n\dot{\varepsilon} = \sigma_B \\ \sigma_{22} = G\mu_e^2 - p - q + 2\eta_n\dot{\varepsilon} = \sigma_B \end{cases}$$

$$\text{et} \begin{cases} \sigma_{11} = 2\eta\dot{\alpha}_v - p - q + 2\eta_n\dot{\varepsilon} = \sigma_B \\ \sigma_{22} = 2\eta\dot{\beta}_v - p - q + 2\eta_n\dot{\varepsilon} = \sigma_B \end{cases} \tag{I.42}$$

On en tire que :

$$\mu_e^2 = \lambda_e^2 \text{ et } \dot{\beta}_v = \dot{\alpha}_v \tag{I.43}$$

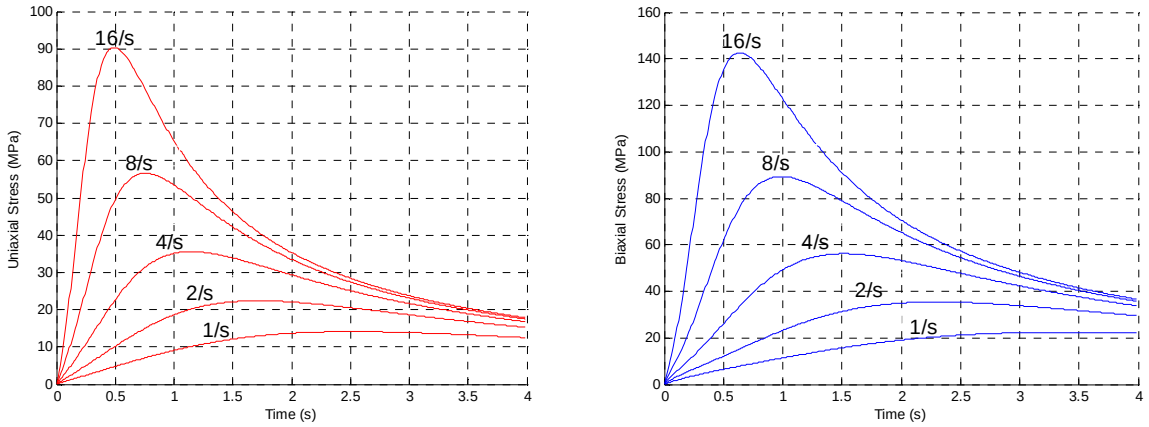
Et une fois introduite l'Eq. I.43 dans I.32, on a :

$$\frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e} + \frac{1}{6\theta}\left(\lambda_e^{\,2} - \frac{1}{\lambda_e^{\,4}}\right) = \dot{\varepsilon} \tag{I.44}$$

Que l'on résout pour déterminer λ_e. La contrainte σ est ensuite donnée par :

$$\sigma_B = 6\eta_n\dot{\varepsilon} + G\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e^4\right) \tag{I.45}$$

La figure I.7 présente l'évolution de la contrainte dans le cas d'une élongation uniaxiale (I.7a) et equi-biaxiale (I.7b). Le module de cisaillement G est égal à 3,29 MPa et la viscosité η est égale à 16,5 MPa.s [FIG 09]. Ce viscoélastique modèle ne produit pas une singularité lorsque la vitesse de déformation augmente.



(a) (b)

Figure I.7 : *Réponses uniaxiale (a) et equi-biaxiale (b) de la forme linéaire du modèle viscoélastique*

Menary *et al.* [MEN 12], ont mis au point une machine de traction multiaxiale (Fig. I.8) permettant de solliciter les polymères dans des conditions proches de celles du soufflage (température et taux de déformation). Des essais biaxiaux ont été effectués dans les gammes de température et la vitesse de déformation de 80-110°C et 1-32s^{-1}.

Les éprouvettes sont des plaques en PET TF9 avec une dimension initialement de 76 mm x 76 mm x 1,2 mm (Fig. I.9). Elles sont fixées à l'aide de 24 pinces pneumatiques. Avant d'étirer les échantillons, ils sont chauffés par deux convecteurs, un au dessus et l'autre en dessous de l'éprouvette. La température initiale de la plaque est régulée par un thermocouple qui est placé juste au-dessus de la surface de l'échantillon. L'échantillon est chauffé pendant 3 minutes afin de donner suffisamment de temps pour établir une température uniforme dans l'épaisseur. La figure I.9 présente la géométrie des échantillons avant et après les élongations équi-biaxiale tests.

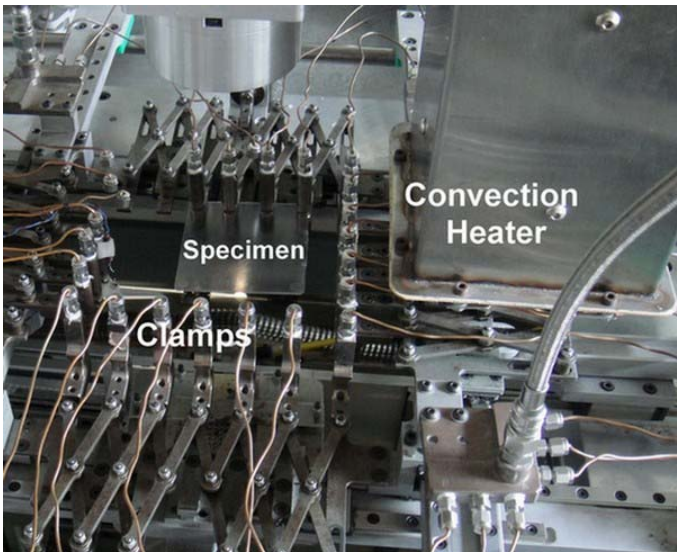


Figure I.8 : *Machine d'essai multiaxial*

Figure I.9 : *L'éprouvette initiale et déformée (l'allongement* $\lambda = 3$)

Les résultats d'essais de traction equi-biaxiale présentent l'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation nominale. Afin de garantir une analyse cohérente des échantillons après étirement, tous les échantillons ont été étirés jusqu'à une déformation nominale de 1,8 (taux d'étirage λ = 2,8). La figure I.10 montre qu'à une température de 90°C, la contrainte augmente avec la vitesse de déformation.

De plus, on peut observer l'effet d'un durcissement après une déformation nominale égale à 1,5. La figure I.11 montre l'effet de la température sur la réponse du matériau PET TF9 pendant l'élongation équi-biaxiale à la vitesse de déformation de 8s^{-1} : la contrainte diminue lorsque la température augmente. L'effet du durcissement varie avec la température, donc, il est nécessaire de prendre en compte l'influence de la température dans le modèle proposé.

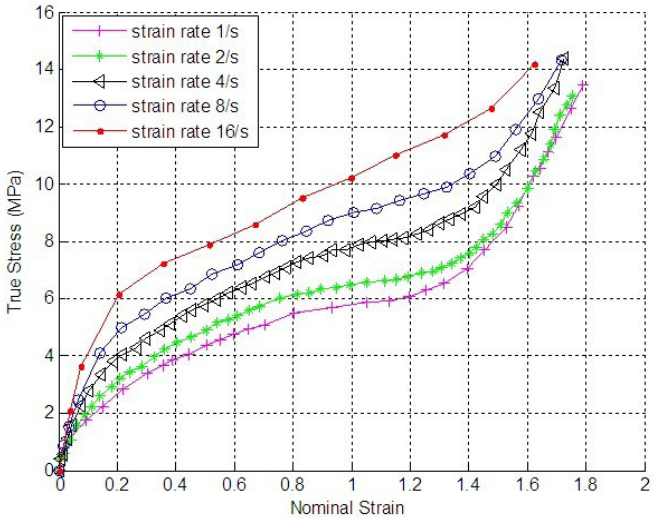


Figure I.10 : *Evolution de la contrainte pour différentes vitesses de déformation pour une température de 90°C*

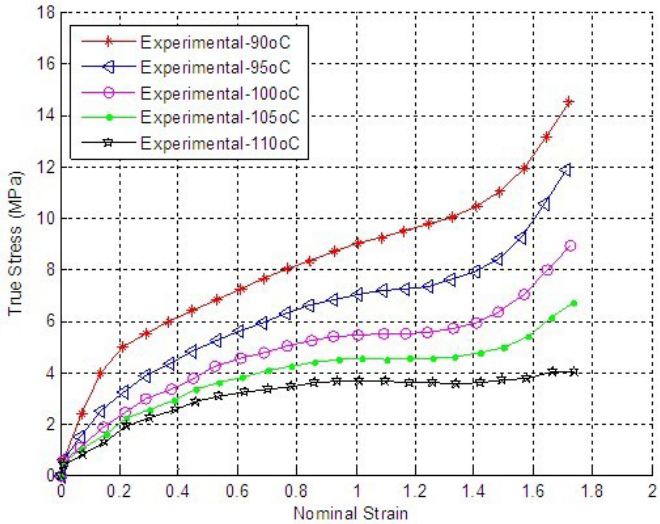


Figure I.11 : *Evolution de la contrainte à différentes températures pour une vitesse de déformation* $8s^{-1}$

Dans un premier temps, on a supposé que G et η sont des constantes caractéristiques du modèle viscoélastique. On peut voir de ce qui précède que quelle que soit la valeur de ces paramètres, l'allure de l'évolution de la contrainte (figure I.7b) ne correspond pas à celle observée expérimentalement (figure I.10). On propose alors d'enrichir le modèle en définissant des paramètres non linéaires pour les deux grandeurs G et η du modèle viscohyperélastique.

I.4 L'identification du modèle à partir des essais expérimentaux

La comparaison entre les résultats expérimentaux avec les réponses du modèle viscoélastique avec des caractéristiques constantes n'est pas satisfaisante. Le phénomène du durcissement met en évidence la nécessité d'une forme non linéaire des propriétés. Afin de modéliser cet effet, la première idée est de choisir un modèle hyperélastique pour la partie élastique. Les modèles de Hart-Smith, d'Ogden ou de Yeoh, par exemple, peuvent être considérés parce que leurs réponses à la tension uniaxiale ou biaxiale produisent un effet de durcissement. Cette

modification est nécessaire mais pas suffisante. En effet, à cause de la partie visqueuse, une vitesse de déformation constante conduit à une contrainte qui se stabilise : le durcissement ne peut pas être reproduit. Pire, puisque c'est la vitesse de déformation nominale qui est constante, une partie élastique modélisée par un module d'élasticité G constant pose problème : la vitesse de déformation élastique atteint des valeurs plus élevées que la vitesse de déformation globale, ce qui n'est pas réaliste et conduit à des valeurs négatives de la vitesse de déformation visqueuse. Par conséquent, les deux parties, élastique et visqueuse, de notre modèle doivent contribuer à l'effet de durcissement.

Dans la suite, on développe la loi de comportement viscoélastique proposée à un modèle viscohyperélastique par l'aide de deux fonctions rhéologiques *a priori* inconnues au lieu des valeurs constantes :

$$\begin{aligned} \hat{\underline{\underline{\sigma}}} &= G\left(tr\left(\underline{\underline{B_e}}\right)\right)\hat{\underline{\underline{B_e}}} \\ \hat{\underline{\underline{\sigma}}} &= \eta\left(\overline{\varepsilon_v}, \overline{\dot{\varepsilon}_v}, T\right)2\eta\underline{\underline{D_v}} \end{aligned} \quad , \quad \underline{\underline{\sigma}} = 2\eta_n \underline{\underline{D}} + \hat{\underline{\underline{\sigma}}} - p\underline{\underline{I}} - q\underline{\underline{I}} \tag{I.46}$$

où $\overline{\dot{\varepsilon}_v}$ est le taux de déformation visqueux équivalent.

I.4.1 Identification du module de cisaillement G

On peut d'abord identifier la valeur initiale du module de cisaillement G_0 : cette valeur peut être estimée à partir de la pente initiale des courbes expérimentales contrainte - déformation parce qu'il n'y a pas de déformation visqueuse au tout début de l'essai. En effet, si la vitesse de déformation est imposée instantanément, la réponse initiale est purement élastique. Le tableau I.1 montre que G_0 ne varient pas beaucoup d'un taux de déformation à l'autre. On retient la valeur G_0 = 8 MPa.

Tableau I.1. La valeur initiale du module de cisaillement G_0

Taux de déformation (s^{-1})	1	2	4	8	16
G_0 (MPa)	7,2	8,1	7,7	7,9	8,9
Min G_0 (MPa)	7,2				
Max G_0 (MPa)	8,9				

A partir de l'équation I.45 et des résultats expérimentaux à température constante, il est possible de déterminer λ_e en fonction du temps pour un G constant en résolvant :

$$\sigma_B = G\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e^4\right) \Rightarrow \lambda_e^6 - \lambda_e^4\left(\frac{\sigma_B}{G}\right) - 1 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_e^2 = \frac{S}{3} + \frac{1}{6}\left(108 + 8S^3 + 12\sqrt{81 + 12S^3}\right)^{1/3} + \frac{2S^2}{3\left(108 + 8S^3 + 12\sqrt{81 + 12S^3}\right)^{1/3}} \tag{I.47}$$

où $S = \sigma_B^{\exp}/G$.

Une approximation de cette évolution est réalisée à l'aide de fonctions polynomiales cubiques (fonction "csaps" dans matlab) comme le montre la figure I.12a pour un taux de déformation de 1 s^{-1}. Ensuite, le taux d'allongement élastique $\dot{\lambda}_e$ peut être calculé par la dérivée de λ_e par rapport au temps. La connaissance de $\dot{\lambda}_e$ permet de déterminer la vitesse de déformation élastique par :

$$\dot{\varepsilon}_e = \frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e} \tag{I.48}$$

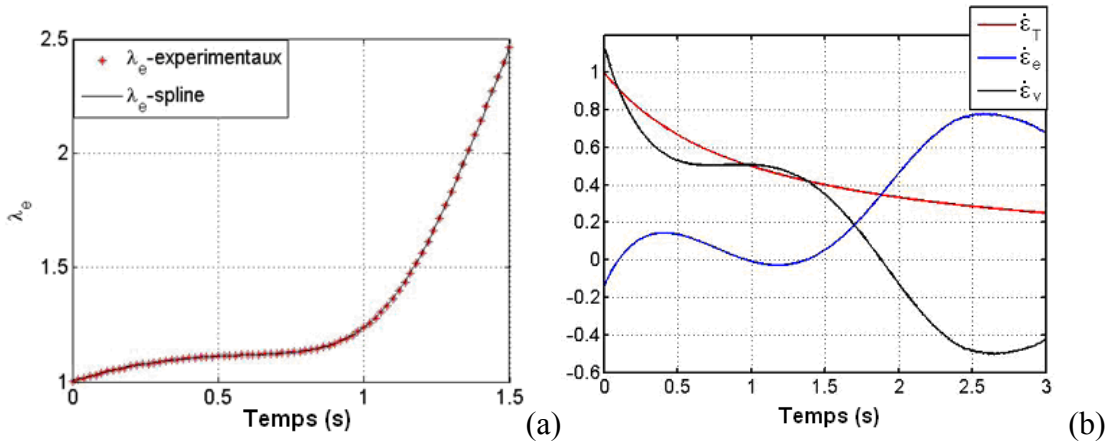


Figure I.12 : *Evolution de* λ_e (a) *et évolution de* $\dot{\varepsilon}_v$, $\dot{\varepsilon}_e$ *et* $\dot{\varepsilon}$ *(b) pour un taux de déformation de 1* s^{-1} *avec G=8MPa*

Ici, le taux de déformation global diminue en fonction du temps (équation I.33) et si le module de cisaillement G est constant, les résultats des simulations (figure I.12b) montrent que la vitesse de déformation élastique va dépasser le taux de déformation global. Dans ce cas, la vitesse de déformation visqueuse devient négative et produit des singularités. Par conséquent, il est nécessaire de considérer que le module de cisaillement est une fonction croissante de la déformation élastique au lieu d'une constante : nous choisissons une forme identique au modèle de Hart-Smith pour représenter la partie élastique:

$$G = G_0 \exp\left(\Lambda\left(I_1 - 3\right)^2\right),\ I_1 = trace\left(\underline{\underline{B_e}}\right) \tag{I.49}$$

où G_0 et Λ sont des constantes. Afin d'assurer que la déformation initiale est bien purement élastique et que les vitesses de déformation sont toujours positives pendant l'allongement, la valeur du paramètre Λ est choisie égale à $\Lambda = 0.1$. Avec cette valeur, on obtient les résultats tracés dans les figures I.13 et I.14. *Λ est la seule valeur du modèle qui présente un caractère arbitraire. Nous ne disposons pas de critère objectif pour optimiser cette valeur qui sera supposée constante quelle que soit la température et quelle que soit la vitesse.*

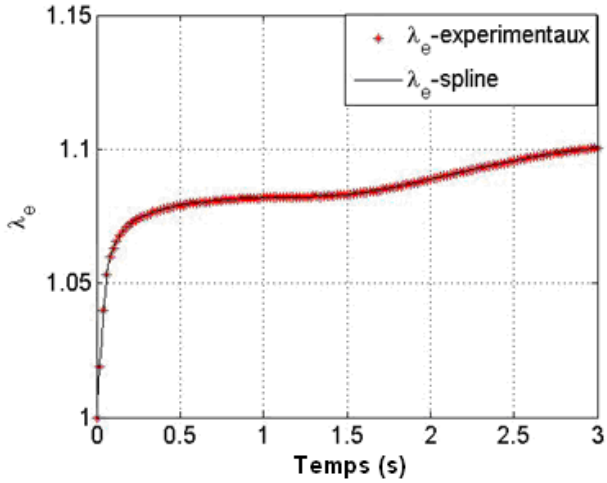


Figure I.13 : *Evolution de* λ_e *pour un taux de déformation de 1* s^{-1} *à partir du modèle G*

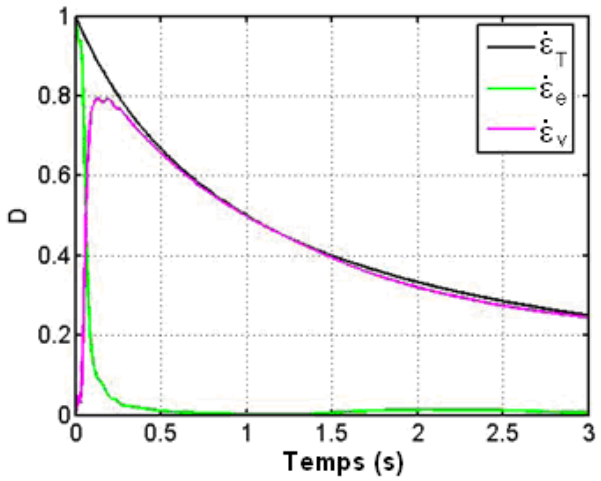


Figure I.14 : *Evolution de $\dot{\varepsilon}_v$, $\dot{\varepsilon}_e$ et $\dot{\varepsilon}$ pour un taux de déformation de 1 s^{-1} à partir du modèle G*

I.4.2 Identification de la viscosité η

Dans le travail de Cosson *et al.* [COS 09], un modèle non linéaire incompressible viscoplastique macroscopique qui représente l'effet du durcissement a été identifié. Inspiré de ce modèle et constatant sur la figure I.14 que le comportement devient assez vite piloté par la partie visqueuse, on propose une partie non-linéaire visqueuse de la forme suivante:

$$\eta\left(\overline{\varepsilon_v}, \overline{\dot{\varepsilon}_v}, T\right) = \eta_0 h\left(\overline{\varepsilon_v}\right) f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right) \tag{I.50}$$

où η_0 est la viscosité initiale, $h\left(\overline{\varepsilon_v}\right)$ désigne une fonction dépendant de la déformation visqueuse équivalent et $f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right)$ représente une fonction dépendant uniquement du taux de déformation visqueux équivalent $\overline{\dot{\varepsilon}_v}$ défini par :

$$\overline{\dot{\varepsilon}_v} = \sqrt{\frac{2}{3} tr\left(D_v^{\,2}\right)} \tag{I.51}$$

Plus précisément, on cherche $f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right)$ sous la forme d'une loi de Carreau-Yasuda :

$$f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right) = \frac{1}{\left(1 + \left(\lambda \frac{\overline{\dot{\varepsilon}_v}}{\dot{\varepsilon}_{ref}}\right)^a\right)^{\frac{1-m}{a}}} \tag{I.52}$$

où λ, m, a sont des constantes. $\dot{\varepsilon}_{ref}$ est une vitesse de déformation de référence qui est égal à 1 s^{-1} pour la simplicité.

η_0 est homogène à une viscosité et h est une fonction sans dimension. Afin d'identifier la fonction h, nous suivons les étapes suivantes :

1. Pour chaque taux de déformation $\dot{\varepsilon}$, à partir de la courbe contrainte - déformation de l'essai d'élongation équi-biaxiale, l'évolution des allongements élastiques liées λ_e permet obtenir de l'équation I.47. Après lissage et interpolation, on obtient la vitesse de déformation élastique par l'équation I.48. Donc, la vitesse de déformation visqueuse peut être obtenue par :

$$\dot{\varepsilon}_v = \dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e} \tag{I.53}$$

On remplace la forme retenue pour la viscosité (équation I.50) dans l'équation différentielle de λ_e (équation I.45), alors l'équation devient :

$$\frac{G\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e^4\right)}{6\eta_0 h\left(\overline{\varepsilon_v}\right) f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right)} = \dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e} = \dot{\varepsilon}_v \tag{I.54}$$

Dans le cas de traction équi-biaxiale, le taux de déformation visqueux équivalent $\overline{\dot{\varepsilon}_v}$ est :

$$\overline{\dot{\varepsilon}_v} = \sqrt{\frac{2}{3} tr\left(D_v{}^2\right)} = 2\left(\dot{\varepsilon} - \frac{\dot{\lambda}_e}{\lambda_e}\right) = 2\dot{\varepsilon}_v \tag{I.55}$$

Par conséquent, nous pouvons résoudre l'équation I.52, I.54 et I.55, pour chaque vitesse de déformation et pour différentes valeurs des constantes λ, m et a, la fonction h peut être calculée à partir de l'équation suivante :

$$\eta_0 h\left(\overline{\varepsilon_v}\right) = \frac{G\left(\lambda_e^2 - 1/\lambda_e^4\right)}{6\dot{\varepsilon}_v\left(1 + \left(\lambda\left(2\dot{\varepsilon}_v/\dot{\varepsilon}_{ref}\right)\right)^a\right)^{\frac{m-1}{a}}} \tag{I.56}$$

2. La fonction h ne dépendant pas de la vitesse de déformation, il faut que les valeurs des paramètres λ, m, a minimisent, au sens des moindres carrés, l'écart entre les différentes fonctions obtenues pour chaque vitesse. Les valeurs optimales des 3 paramètres sont $\lambda = 9{,}91$, $m = 0{,}2$, $a = 2$.

3. Une fois que nous avons la fonction h avec la valeur optimale des paramètre de $f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right)$, la dernière étape de l'identification est de proposer une forme mathématique pour représenter la courbe de la fonction h. Nous pouvons choisir la fonction sous la forme suivante :

$$\eta_0 h\left(\overline{\varepsilon_v}\right) = \frac{\eta_0\left(1 - \exp\left(-K\overline{\varepsilon_v}\right)\right)}{\left(1 - \overline{\varepsilon_v}/\varepsilon_{v\lim}\right)^N} \tag{I.57}$$

La figure I.15b illustre que ε_{vlim} est la valeur de déformation correspondant à l'asymptote verticale de la courbe h, η_0 est liée au niveau de la fonction sur le "plateau horizontal", K est une constante correspondant à la pente initiale de la courbe et N un exposant qui est lié à la courbure de l'effet du durcissement.

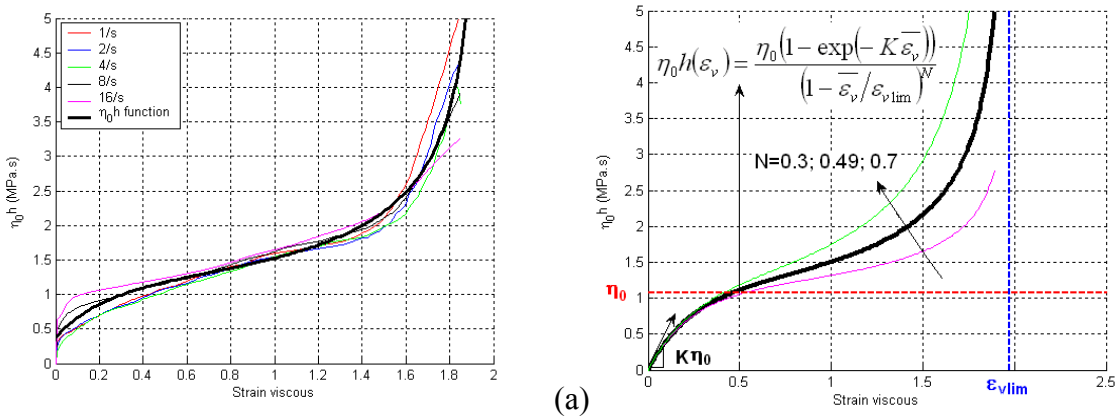


Figure I.15 : *(a)La fonction h identifiée par équation I.57 ; (b) Illustration des paramètres dans la fonction h*

Au tout début de la courbe h est égal à 0, mais la mise en œuvre numérique met en évidence certaines difficultés. Afin de les résoudre, nous avons légèrement modifié l'expression h qui devient :

$$\eta_0 h\left(\overline{\varepsilon_v}\right) = \frac{\eta_0\left(1-\exp\left(-K\overline{\varepsilon_v}+h_0\right)\right)}{\left(1-\overline{\varepsilon_v}/\varepsilon_{v\lim}\right)^N} \tag{I.58}$$

Une optimisation au sens des moindres carrés permet de déterminer les meilleurs paramètres : η_0 = 8,4MPa.s, K = 3,2, h_0 = -0,21, ε_{vlim} = 1,83, N = 0,42.

I.4.3 Identification de l'effet de température

Menary *et al.* [MEN 12] ont aussi réalisé des tests d'allongement équi-biaxiaux à des plusieurs températures différentes mais légèrement supérieures à la température de transition vitreuse pour un taux de déformation donné $8s^{-1}$ (Figure I.7). Pour identifier la dépendance de la température, nous exprimerons d'abord les propriétés en termes de fonction de la température et ensuite choisirons les meilleurs paramètres pour représenter les résultats expérimentaux.

L'effet du durcissement est présenté par la fonction h. Comme cet effet est influencé par la température, la fonction h dépend de la température. On utilise la même procédure présentée dans la partie I.4.2, la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v,T)$ peut être recherchée par chacune des températures. Les meilleurs paramètres déterminés sont récapitulés dans le tableau I.2.

Tableau I.2 Les paramètres identifiés de la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v,T)$ pour chaque température

Paramètres	η_0 (MPa.s)	K	h_0	ε_{vlim}	N
90 °C	8,4	3,2	-0,21	1,83	0,42
95 °C	6.34	3,31	-0,29	1.89	0,48
100 °C	5.1	3,29	-0,21	1,96	0,4
105 °C	4.22	3,05	-0,21	2,21	0,41
110 °C	3.67	3,22	-0,19	3,17	0,51

Considérant les résultats du tableau I.2, nous remarquons que les variables K et N varient très peu avec la température. Par conséquent, on ne prend pas en compte l'effet de la température pour ces deux paramètres : les valeurs de K et N sont des constantes K = 3,2 et N = 0,42. h_0 est le petit paramètre introduit afin de résoudre la difficulté numérique au début de la courbe. On peut fixer sa valeur h_0 arbitrairement égale à -0,21 pour chaque température. Les deux paramètres restants η_0 et ε_{vlim} montrent une dépendance significative à la température : la viscosité de référence η_0 diminue avec la température et ε_{vlim} augmente avec la température. On propose deux fonctions de la température pour déterminer ces deux paramètres.

Quand on fixe les valeurs de K, N et h_0, on ré-identifie la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v,T)$. Le tableau I.3 montre que dans ce cas là, les nouveaux meilleurs paramètres de η_0 et ε_{vlim} à chaque température sont légèrement changés.

Tableau I.3 Les paramètres identifiés quand K, N et h_0 sont constants

Paramètres	90 °C	95 °C	100 °C	105 °C	110 °C
η_0 (MPa.s)	8,4	6.3	5.1	4.22	3.68
ε_{vlim}	1,83	1,89	1,93	2,17	3,15

L'évolution du paramètre η_0 est tracée dans la Figure I.16 : il diminue rapidement lorsque la température augmente. Pour cela, on choisit d'exprimer cette évolution par Williams-Landel-Ferry (WLF) modèle [WIL 55].

$$\ln(a_T) = \frac{-C_1(T - T_{ref})}{C_2 + T - T_{ref}} \tag{I.59}$$

où C_1 et C_2 sont les paramètres WLF. On impose comme température de référence $T_{ref} = 90^o C$

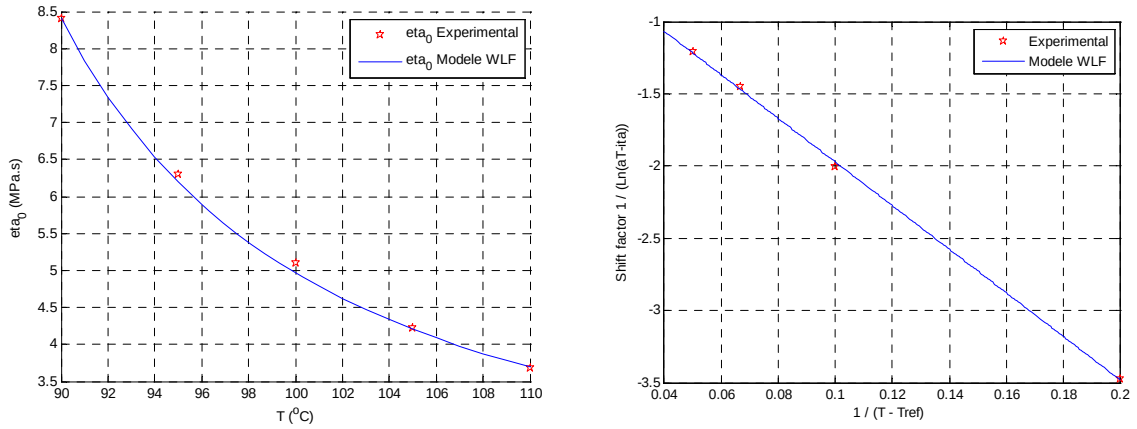


Figure I.16 : *L'évolution de η_0 et 1/ln(aT) VS 1/(T-T_{ref})*

Le coefficient a_T peut être obtenu par la relation entre $\eta_0(T)$ et $\eta_0(T_{ref})$:

$$\ln(a_T) = \ln(\eta_0(T)) - \ln(\eta_0(90^0 C)), \tag{I.60}$$

ou $a_T = \eta_0(T)/\eta_0(90^0 C)$

On utilise la méthode des moindres carrés pour identifier les meilleures valeurs pour les 2 paramètres de WLF, à savoir : $C_1 = 1{,}88$, $C_2 = 25{,}81^o C$. La figure I.16 représente la fonction identifiée.

Pour l'autre paramètre ε_{vlim}, on peut constater que l'influence de la température est négligeable quand elle est proche de la température de référence ($T_{ref} = 90^o C$) mais beaucoup plus sensible lorsque la température s'élève. Selon ce phénomène, on propose une fonction sous la forme suivante :

$$\varepsilon_{v\lim} = \varepsilon_{v\lim_ref}\left(1 + \frac{B_1(T_{ref} - T)}{(T - B_2)}\right) \tag{I.61}$$

où B_1 et B_2 sont constants, $\varepsilon_{v\lim_ref} = \varepsilon_{v\lim_90^o C}$. En outre, l'équation I.61 peut être écrite comme:

$$\frac{\varepsilon_{v\lim} - \varepsilon_{v\lim_ref}}{\varepsilon_{v\lim_ref}} = B_1(T_{ref} + B_2)\frac{1}{(T - B_2)} - B_1 \tag{I.62}$$

La figure I.17 montre que l'évolution de $(\varepsilon_{vlim} - \varepsilon_{vlim_ref})/\varepsilon_{vlim_ref}$ en fonction de $1/(T-B_2)$ est linéaire. On peut déterminer les paramètres B_1 et B_2 par la méthode des moindres carrés : $B_1 = 0{,}07$, $B_2 = 111{,}88^o C$.

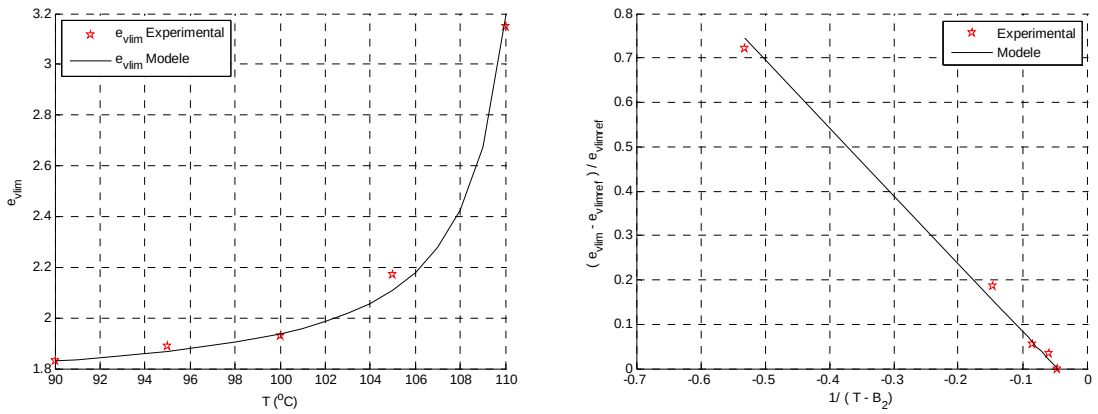


Figure I.17 : *L'évolution de* $\varepsilon_{v\lim}$ *et* $(\varepsilon_{vlim} - \varepsilon_{vlim_ref})/\ \varepsilon_{vlim_ref}$ *VS* $1/(T-B_2)$

Les deux fonctions représentent précisément l'influence de la température sur les paramètres η_0 et ε_{vlim}. En conséquence, la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v, T)$ peut être utilisée dans la construction de la partie visqueuse non linéaire.

I.5 Comparaison

Dans cette section, nous implémentons l'ensemble de paramètres identifiés dans le modèle viscohyperélastique proposé pour tracer la courbe contrainte - déformation. La figure I.18 montre une représentation très satisfaisante des résultats expérimentaux pour différentes vitesses de déformation. La principale différence entre les données expérimentales et les résultats modélisés se trouve au début de la courbe (lorsque la déformation est inférieure à 0,4) : la pente initiale dans les courbes expérimentales est augmentée lorsque la vitesse de déformation augmente mais elle reste la même dans les résultats du modèle. Cet écart est compréhensible puisque l'élasticité ne dépend pas de la vitesse de déformation.

La figure I.19 montre qu'avec la fonction $\eta_0 h(\varepsilon_v, T)$, on obtient une bonne représentation de l'effet de durcissement.

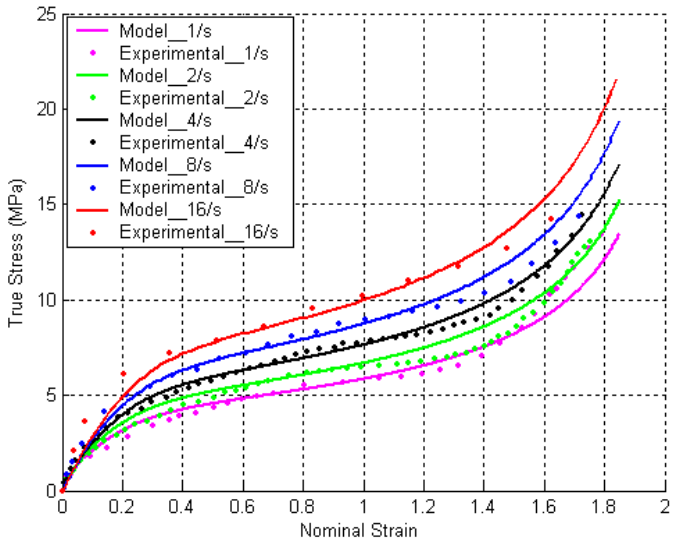


Figure I.18 : *Résultats semi-analytiques du modèle viscohyperélastique à la température 90°C pour différentes vitesses de déformation*

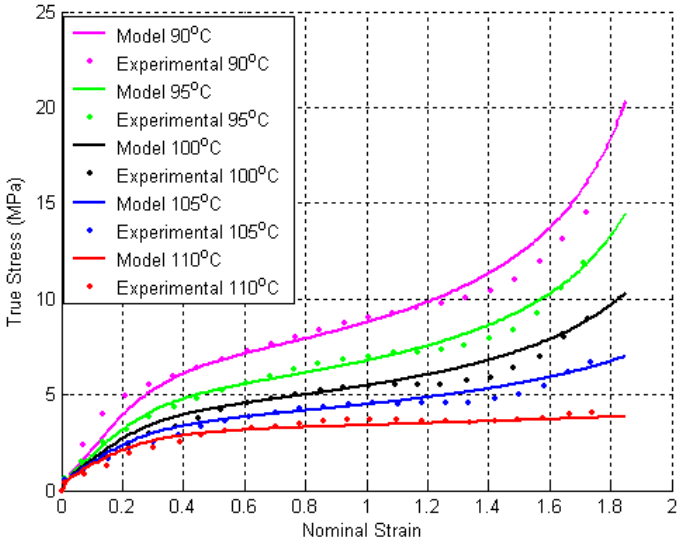


Figure I.19 : *Résultats semi-analytiques du modèle viscohyperélastique à la vitesse de déformation 8s^{-1} pour différentes températures*

Les différences entre les données expérimentales et les résultats de ce modèle sont présentées dans le Tableau I.4.

Tableau I.4 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats de ce modèle

Vitesse de déformation (/s)	**Erreur moyenne absolue (%)**	**Température (^{o}C)**	**Erreur moyenne absolue (%)**
1	8,03	90	8,86
2	8,12	95	6,05
4	5,58	100	8,91
8	7,7	105	8,48
16	10,12	110	8,1

I.6 Conclusion partielle

Nous avons proposé et identifié une modélisation viscoelastique pour le PET qui ne présente pas les défauts de plusieurs modèles viscoélastique instables en élongation.

- *Le modèle viscohyperélastique proposé*

On décrit le comportement viscoélastique en grandes déformations basé sur l'additivité des vitesses de déformation élastique et visqueuse. On choisit un modèle hyperélastique pour modéliser la partie élastique et un modèle non-linéaire qui dépend de la vitesse de déformation et de la déformation cumulée pour la partie visqueuse.

- *L'identification de ce modèle à partir des essais expérimentaux*

Les paramètres du modèle sont identifiés semi analytiquement par les données expérimentales issues d'essais d'élongation de traction biaxiale du PET à des températures proches et supérieure à la température transition vitreuse Tg. On obtient une bonne représentation de l'effet du durcissement avec ce modèle.

- *L'effet de température*

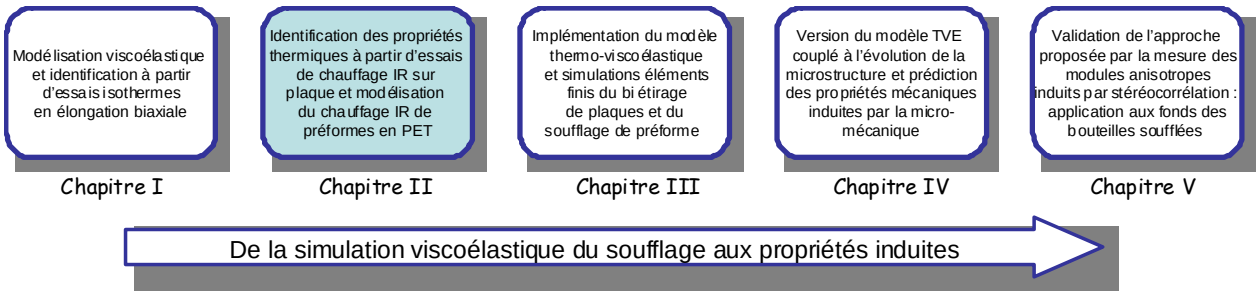
On prend aussi en compte l'influence de la température sur le comportement. Les propriétés visqueuses sont couplées à la température et identifiées à partir des essais expérimentaux à différentes températures. Deux fonctions ont été choisies pour prendre en compte cette influence. Nous obtenons une bonne représentation de l'effet de température.

Bibliographie

[ALE 71] H. Alexander, The tensile instability of an inflated cylindrical membrane as affected by an axial load, Int. J. Mech. Sci., 9, 87-95, 1971.
[ARR 93] E. M. Arruda, M. C. Boyce, A three dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials, J. Mech. Phys. Solids, 41 (2), 389-412, 1993.
[BAR 95] G. Barakos, E. Mitsoulis, A convergence study for numerical simulation of IUPAC-LDPE extrusion experiments, J. Non-Newt. Fluid Mech., 58, 315-329, 1995.
[BEL 93] A. Bellare, R. E. Cohen, A. S. Argon, Development of texture in poly(ethylene terephthalate) by plane-strain compression, Polymer, 22, 1010-1018, 1993.
[BEN 93] A. Benjeddou, E. Jankovich, T. Hadhri, 'Determination of the parameters of Ogden's law using biaxial data and Levenberg-Marquardt-Fletcher algorithm', J. of elastomers and plastics, 25, 224-248, 1993.
[BOY 00] M.C. Boyce, S. Socrate, P.G. Llana, Constitutive model for finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition, Polymer, 41, 2183-2201, 2000.
[BUC 95] C.P. Buckley, D.C. Jones. Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition Polymer, 36, 3301-3312, 1995.
[BUC 96] C. P. Buckley, D. C. Jones, D. P. Jones, Hot-drawing of poly(ethylene terephthalate) under biaxial stress: application of a three dimensional glass-rubber constitutive model, *Polymer,* 37, 2403-2414, 1996.
[CAK 85] M. Cakmak, J. L. White, J. E. Spruiell, An investigation of the kinematics of stetch blow molding of Poly(ethylene terephthalate) bottles, J. of App. Polymer Sci., 30, 3679-3695, 1985.
[CHA 93a] P. Chandran, S. Jabarin, Biaxial Orientation of Poly(ethylene terephthalate). Part III : Comparative Structure and Property Changes Resulting from Simultaneous and Sequential Orientation, Advances in Polymer Technology, 12 (2),153-165, 1993.
[CHA 93b] H. Chang, J. M. Schultz, R. M. Gohil, Morphology of Biaxially Stretched Poly(ethylene terephthalate) films, J. Macromol. Sci. –Phys., B32 (1), 99-123, 1993.
[CHE 02] L. Chevalier, Y. Marco, Tools for Multiaxial Validation of Behavior Laws Chosen for Modeling Hyper-elasticity of rubber-like Materials, J. Polymer engineering and Science, 42 (2), 280-298, 2002.
[CHE 06] L. Chevalier and Y. Marco. Identification of a Strain Induced Crystallization Model for PET Under Uni- and Bi-Axial Loading: Influence of Temperature Dispersion, Mech. Mater. 39, 596–609, 2006.
[COS 09] B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Optimization of the thickness of PET bottle during stretch-blow molding by using a mesh-free (numerical) method. Int Polymer Process 24(3):223–233, 2009.
[COU 02] P. Coussot, J.-L. Grossiord, Comprendre la rhéologie: de la circulation du sang à la prise du béton. EDP Sciences, 2002.
[FAI 97] J.B. Faisant de Champchesnel, J.F. Tassin, L. Monnerie, P. Sergot, G. Lorentz, Amorphous phase orientation in biaxially drawn poly(ethylene terephthalate) films, Polymer, 38, n° 16, 4165-4173, 1997.
[FEN 76] W. W. Feng, Visco-elastic behaviour of elastomeric membranes, J. App. Mech.-ASME, 59, pp. S29-S34. 1976.
[FIG 09] L. Figiel, C.P. Buckley. On the modeling of highly elastic flows of amorphous thermoplastic. International Journal of Non-linear Mechanics, 44, 389-395, 2009.
[GOR 01] E. Gorlier, Caractérisation rhéologique et structurale d'un pet. application au procédé de bi-etirage soufflage de bouteilles, Thèse de Doctorat, ENSMP, 2001.

[HAE 93] W. P. Haessly, M. E. Ryan, Experimental study and finite element analysis of the injection blow molding process, J. Polymer Eng. and Sci., 33 (19), 1279-1287, 1993.
[HAR 66] J. L. Hart-Smith, Elasticity parameters for finite deformations of rubber-like materials, Int. J. Engng. Sci., 5, 1-24, 1966.
[KHA 87] S.A. Khan and R.G. Larson, Comparison of Simple Constitutive Equations for Polymer Melts in Shear and Biaxial and Uniaxial Extensions, J. of Rheology, 31(3),207-234, 1987.
[LAU 86] H.M. Laun, Prediction of elastic strains of polymer melts in shear and elongation, J. Rheol. 30, 459, 1986.
[LEO 76] A.I. Leonov. Nonequilibrium thermodynamics and rheology of viscoelastic polymer media. Rheologica Acta 15 (2) 85–98, 1976.
[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, ENS Cachan, 2003.
[MAT 97] R. G. Mathews, R. A. Duckett, I. M. Ward, The biaxial drawing behaviour of poly(ethylene terephthalate), Polymer, 38, 4795-4802, 1997.
[MEI 87] J. Meissner, Polymer melt elongation –Methods, results and recent developments, Polymer Engng. Sci., 27 (8), 537-546, 1987.
[MEN 00] G. H. Menary, C. G. Armstrong, R. J. Crawford, and J. P. McEvoy, Modelling of poly(ethylene terephthalate) in injection stretch-blow moulding. Plastics, Rubber and Composites Processing and Applications, 29, 360-370, 2000.
[MEN 12] G.H. Menary, C.W. Tan, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, P.J. Martin. Biaxial Deformation of PET at Conditions Applicable to the Stretch Blow Molding Process. Polymer Engineering & Science, vol. 52, no3, pp. 671-688, 2012.
[MIC 11] W. Michaeli, C. Hopmann, L. Ederleh, M. Begemann, Measuring Thermoforming Behaviour ESAFORM 2011, Queen's University Belfast, 2011.
[OBA 70] Y. Obata, S. Kawabata, H. Kaiwai, Mechanical properties of natural rubber vulcanizates in finite deformation. J. Polym. Sci., A2-8, 903-919, 1970.
[OGD 72] R. W. Ogden, Proc. R. Soc. Lond. A., 326, p.565, 1972.
[OLD 50] J. Oldroyd. On the Formulation of Rheological Equations of State. Proc. R. Soc. Lond., Series A, vol. 200 no. 1063 523-541,1950.
[ROD 97] A. Rodriguez-Villa, Etude théorique et expérimentale de l'extrusion soufflage de corps creux en polymère, PhD thesis, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, 1997.
[SCH 95] F. M. Schmidt Etude expérimentale et modélisation du procédé d'injection/ soufflage par bi-orientation en cycle froid de bouteilles en P.E.T., PhD thesis, Ecole Nationale supérieure des Mines de Paris, 1995.
[SCH 96] F.M. Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, L. Dessouter, Viscoelastic simulation of PET stretch/blow molding process, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 64, pp.19–42, 1996.
[SWE 97] J. Sweeney, T. L. Collins, P. D. Coates, I. M. Ward, Application of an elastic model to the large deformation, high temperature stretching of polypropylene, Polymer, 38, N° 24, 5991-5999, 1997.
[TRE 44] L. R. G. Treloar, Stress-strain data for vulcanized rubber under various type of deformation, Trans. Faraday Soc., 40, 59-70, 1944.
[VER 97] E. Verron, Contribution expérimentale et numérique aux procédés de moulage par soufflage et de thermoformage, Thèse de Docorat, Ecole Centrale de Nantes, 1997.
[VIG 97] M. Vigny, J.F. Tassin, A. Gibaud, G. Lorentz, Study of the molecular structure of PET films obtained by an inverse stretching process. Part 1: constant speed drawing of amorphous films, J. Polymer Engineering and Science, 37, n° 11, 1785-1794, 1997.
[WIL 55] M.L. Williams, R.F. Landel, J.D. Ferry, The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids. Journal of the American Chemical Society, 77 (14), pp. 3701-3707, 1955.

Chapitre II
Identification des propriétés thermiques et modélisation 3D du chauffage infrarouge (IR)



II.1. Introduction

Le procédé de mise en forme des bouteilles en PET est l'objet de couplages complexes entre la mécanique et thermique. Des effets de la température sur les paramètres mécaniques aux effets d'auto-échauffements pendant le processus en passant par la connaissance des conditions thermiques initiales (distribution de température dans la préforme au début du soufflage), la thermique apparait à chaque étape de la mise en forme des bouteilles en PET et son étude est très importante.

La figure 3 représente les étapes de ce procédé. Dans l'étape 'four infrarouge', les préformes sont placées dans des fours qui assurent, de manière continue, le retournement des préformes (col en bas) et leur défilement devant les modules chauffants (composés de lampes infra-rouge). Dans le même temps, les préformes sont animées d'un mouvement de rotation qui homogénéise la répartition de la température. Celle-ci atteint environ 100°C, soit légèrement au dessus de la température de transition vitreuse Tg. Au cours de cette opération de chauffage, la mobilité des chaînes moléculaires du PET est rendue progressivement plus facile et permet la déformation lors du soufflage. Les étirages générés affectent l'orientation et la microstructure (cristallisation). Les propriétés mécaniques du PET alors induisent dans la bouteille sont dépendantes de la microstructure du PET et dépendent fortement de la température du processus ainsi que les vitesses de déformation.

D'autre part, la faible mobilité des macromolécules ou la viscosité élevée du matériau à ces températures génèrent une dissipation d'énergie importante qui conduit à un phénomène d'auto-échauffement. Cet effet de variation de température doit être pris en compte lors de la simulation et par conséquent les équations de la thermiques doivent aussi être traitées. De nombreuses études numériques existantes du procédé ISBM [FIG 09, CHU 89] négligent le transfert de chaleur : la température est supposée constante au cours du processus et la chaleur induite par les déformations est négligée. Or, l'orientation et la cristallisation, et par suite les caractéristiques de la bouteille finale sont très dépendantes de la température au cours du procédé : il est essentiel d'intégrer le transfert de chaleur pour représenter les propriétés mécaniques des bouteilles finales. En conséquence, dans ce chapitre nous allons mettre en place les outils nécessaires pour une simulation thermo-mécanique. Notamment :

- définir précisément la distribution de la température initiale de la préforme, au début de l'opération de soufflage ;
- identifier les propriétés thermiques du PET dans le but de modéliser la loi de comportement du PET couplée aux lois de la thermique ;

- fournir, en couplant les équations thermiques avec les équations mécaniques, l'histoire du champ de la température au cours de la simulation.

Pour modéliser la distribution de la température de la préforme à la sortie du four (paramètre prépondérant de la phase d'étirage et de soufflage des préformes) Monteix [MON 01] a été un des premiers à modéliser la phase de chauffage IR. Ainsi il a déterminé avec exactitude la cartographie de la température initiale de la préforme et plus particulièrement, les gradients de température établis dans l'épaisseur des préformes en fonction de la puissance électrique des lampes halogènes, des réflecteurs de rayonnement et de l'influence du système aéraulique. Huang [HUA 05] a modélisé le chauffage de la préforme par le modèle basé sur le calcul d'un terme radiatif surfacique reçu par la préforme et diffusé ensuite dans le matériau par conduction. Il a validé la comparaison entre son modèle et des mesures expérimentales, réalisées par les thermocouples implantés dans l'épaisseur de la préforme. La rotation de la préforme, permettant un chauffage homogène sur l'ensemble de la préforme, est intégrée à travers une modélisation des lampes par des tubes circulaires. Champin [CHA 07] a utilisé les propriétés thermiques identifiées par Monteix pour modéliser le chauffage de la préforme. Un terme source de rayonnement est implémenté dans l'équation de la chaleur. Ce terme source volumique a été calculé par la méthode du lancé de rayons, couplée avec une loi d'absorption spectrale de Beer Lambert. La rotation de la préforme dans le four est prise en considération par interpolation du terme source après déplacement et la translation par l'intermédiaire d'un coefficient de pondération. Bordival [BOR 09] a réalisé les simulations 3D du conditionnement thermique avec le logiciel PLASTIRAD. Il a utilisé aussi la loi de Beer Lambert pour calculer l'absorption du rayonnement dans la préforme.

Comme la température affecte beaucoup les propriétés mécaniques, l'effet d'auto-échauffement n'est pas négligeable. Sur la simulation numérique non-isotherme, Schmidt *et al.* [SCH 98] ont développé la simulation non-isotherme du procédé ISBM par éléments finis pour intégrer le transfert de chaleur lors du processus de déformation [SCH 96]. Toutefois, cela n'a pas montré d'amélioration significative dans la prédiction de la distribution de l'épaisseur. Yang *et al.* [YAN 04a, YAN 04b] ont prolongé le travail de Menary *et al.* [MEN 00] (simulation 2D isotherme) en réalisant une simulation 2D non-isotherme couplée au modèle de Buckley pour représenter le comportement du PET.

Dans ce chapitre, nous présentons d'abord l'identification des propriétés thermiques du PET et du moyen de chauffage à partir d'essais de chauffage infrarouge réalisés sur des plaques planes en PET. La géométrie plus simple que celle d'une préforme et la quasi homogénéité dans le plan rendent cette identification assez aisée. Les paramètres identifiés sont comparés aux valeurs classiques dans la littérature et notamment nous comparons la valeur identifiée pour le flux radiatif avec une estimation du rayonnement absorbé à partir d'une modélisation basée sur le principe de la relation de l'énergie spectrale. Compte tenu des très bons résultats obtenu cette modélisation sera reprise sur la géométrie de la préforme tournante devant les lampes IR. Dans la dernière partie de ce chapitre, une simulation 3D du chauffage d'une préforme tournant devant des lampes est réalisée par la méthode des éléments finis avec logiciel Comsol. On trouve une bonne concordance entre la solution numérique et les résultats expérimentaux réalisés sur le banc de chauffage et pour lesquels l'évolution du champ de température de la surface extérieure de la préforme est enregistré par une caméra thermique.

II.2. Dispositif expérimental de chauffage IR

Le laboratoire MSME a développé un banc de test permettant le chauffage et le soufflage de préformes en PET (Fig.II.1). Ce banc permet de suivre l'évolution de la géométrie de préformes ramollies par le chauffage et soumises à une pression interne (soufflage libre). Les aspects thermiques interviennent durant la phase de préchauffage des préformes qui se fait *via* des lampes infra-rouge, puis durant la phase de soufflage proprement dite durant laquelle le PET est en contact avec l'air ambiant mais aussi avec l'air injecté sous pression permettant de générer le soufflage.

Figure II.1 : *Le banc de soufflage*

Le module de chauffage est composé d'un râtelier équipé de lampes montées sur un panneau radiant. La préforme absorbe une fraction du flux radiatif émis par les lampes. La préforme est animée d'un mouvement de rotation afin d'assurer une bonne homogénéité de sa température dans la direction circonférentielle.

On peut aussi monter des plaques en PET sans mettre en route la rotation. Chaque lampe peut être rapprochée ou éloignée de la préforme ou de la plaque à chauffer grâce à des cales métalliques. La puissance nominale des lampes varie entre 0 kW et 2 kW. Des potentiomètres permettent de modifier les pourcentages de la puissance nominale affectés à chacune des lampes. Les paramètres de réglage du banc affectant la distribution de température de la préforme sont :

- La fraction de la puissance nominale affectée à chacune des lampes.
- La position de chacune des lampes vis à vis de la préforme.
- La vitesse de rotation de la préforme (quand il s'agit de préforme bien sûr) dans le banc IR : cette vitesse conditionne le temps de chauffage ainsi que le temps de maintien.

Des thermocouples et une caméra thermique sont utilisés pour mesurer les températures.

II.2.1 Mesure locale par thermocouple

On utilise les thermocouples Testo avec une entrée de sonde pour PT100, deux entrées pour TC et jusqu'à trois autres sondes radio (Fig.II.2). La précision de mesure est de 0.05°C. L'appareil garde en mémoire jusqu'à 10000 valeurs de mesures et le logiciel pour l'exploitation des valeurs mesurées nous permet un traitement facile.

Pour mesurer la variation de température sous effet du chauffage IR, on utilise un thermocouple de contact. Les résultats sont transmis à un ordinateur *via* le logiciel testo comfort Basic x35. Les paramètres de contrôle de l'utilisateur sont les suivants :

- Le temps de chauffage
- Le temps de maintien
- La puissance nominale affectée à chacune des lampes.
- La distance entre les lampes et la surface étudiée.

Figure II.2 : *Les sondes et la visualisation Testo*

II.2.2 La caméra IR

Une caméra IR donne des images du rayonnement IR émis par un objet. C'est-à-dire que le rayonnement est une fonction de la température de la surface de l'objet que la caméra utilise pour calculer et afficher cette température. Cependant, le rayonnement mesuré par l'appareil dépend non seulement de la température de l'objet mais aussi de l'émissivité. La radiation provient également de l'environnement et se reflète dans l'objet. Le rayonnement de l'objet et le rayonnement réfléchi sont aussi influencés par l'absorption de l'atmosphère.

Les caractéristiques principales de la camera FLIR avec la gamme spectrale 7,5 – 13 µm utilisée sont : une image thermique de 240x180 pixels, une gamme de température de -20°C à 120°C. En pointant sur un objet, la caméra reçoit un rayonnement non seulement de l'objet, mais également un rayonnement provenant de l'environnement réfléchi par la surface de l'objet. Ces deux contributions de rayonnement sont atténuées à cause de l'atmosphère entre l'objet et la camera. Mais il faut aussi tenir compte de la contribution : du rayonnement de l'atmosphère lui même.

La figure II.3 illustre la description ci-dessus qui justifie la relation pour le calcul de la température de l'objet de la sortie de la caméra calibrée.

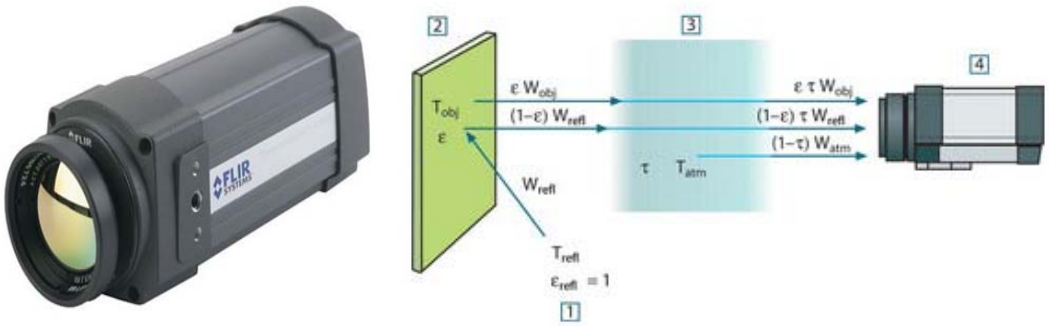


Figure II.3 : *Caméra IR Flir et schéma de mesure générale thermographique*
1: Environnement; 2: Objet; 3: Atmosphère; 4: Camera.

On suppose que le flux W reçue par rayonnement à partir d'un Corps-Noir à la température T_{source} sur une courte distance génère une tension U_{source} à la sortie de la caméra tel que :

$$U_{source} = C\mathrm{W}(T_{source}) \qquad \text{(II.1)}$$

où C, le coefficient de proportionnalité sera considéré comme constant. La notation simplifiée :

$$U_{source} = C\mathrm{W}_{source} \qquad \text{(II.2)}$$

Si la source est considérée comme un Corps Gris avec une émissivité ε, le rayonnement reçu serait plutôt εW_{source}.

Soient les trois flux de rayonnement suivants :

1. Emission de l'objet : $\varepsilon\tau \mathrm{W}_{obj}$, où ε est l'émissivité de l'objet et τ est la transmissivité de l'atmosphère. La température de l'objet est T_{obj}.
2. Emission réfléchie provenant de sources ambiantes : $(1 - \varepsilon)\tau \mathrm{W}_{refl}$, où $(1 - \varepsilon)$ est la réflectivité de l'objet. Les sources ambiantes sont à la température T_{refl}.
3. Emission de l'atmosphère : $(1 - \tau)\mathrm{W}_{atm}$, où $(1 - \tau)$ est l'émissivité de l'atmosphère. La température de l'atmosphère est T_{atm}.

Le flux de rayonnement total reçu peut donc être écrit (II.2) :

$$W_{total} = \varepsilon\tau W_{obj} + (1-\varepsilon)\tau W_{refl} + (1-\tau)W_{amt} \qquad \text{(II.3)}$$

A partir de (II.2) et (II.3), on obtient :

$$U_{total} = \varepsilon\tau U_{obj} + (1-\varepsilon)\tau U_{refl} + (1-\tau)U_{atm} \qquad \text{(II.4)}$$

Ce qui permet, à partir de l'Equation (II.4) d'obtenir U_{obj} :

$$U_{obj} = \frac{1}{\varepsilon\tau}U_{total} - \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon}U_{refl} - \frac{(1-\tau)}{\varepsilon\tau}U_{atm} \qquad \text{(II.5)}$$

avec :

U_{obj} : Tension calculée en sortie de la caméra pour un corps noir de température T_{obj}.

U_{tot} : Tension mesurée en sortie de la caméra pour le cas réel.

U_{refl} : Tension théorique en sortie de la caméra pour un corps noir de température T_{refl} selon l'étalonnage.

U_{atm} : Tension théorique en sortie de la caméra pour un corps noir de température T_{atm} selon l'étalonnage.

Il est nécessaire de connaître ou de déterminer un certain nombre de ces paramètres pour pouvoir effectuer le calcul de U_{obj} à partir de U_{tot}:

- l'émittance ε de l'objet,
- l'humidité relative,
- T_{atm} la température de l'atmosphère.
- la distance entre la caméra et l'objet
- la température effective de l'environnement de l'objet, ou de la température ambiante réfléchie T_{refl}.

Pour mesurer la température avec précision, il est donc nécessaire de compenser les effets d'un certain nombre de sources de rayonnement différentes. Ceci est fait automatiquement par l'appareil à condition de rentrer les paramètres nécessaires pour l'essai. Enfin, on fait des mesures avec les échantillons préparés comme lors des mesures avec les thermocouples.

II.2.3 L'influence du fond

Lors des 1er essais le banc avait un fond en aluminium qui causait des rayonnements de réflexion qui influençaient beaucoup la température lue par la caméra. Afin d'éviter ce phénomène, nous avons peint le fond d'aluminium en noir et réalisés des essais permettant de comparer le fond noir ou un fond en carton.

(a) (b) (c)

Figure II.4 : *Essais avec fond noir et fond carton*
(a) fond aluminium (b) fond carton (c) fond noir

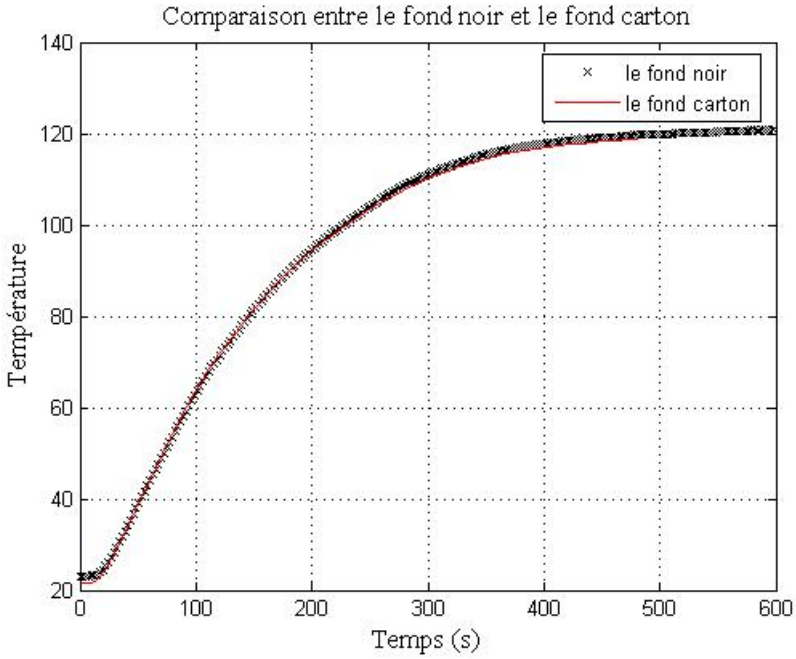


Figure II.5 : *Évaluation de l'influence du fond noir et du fond carton*

La Fig.II.5 montre que le fond en aluminium peint en noir donne les mêmes résultats que le fond recouvert de carton. Ainsi par la suite, on utilisera le fond noir pour les essais.

II.3 Étude expérimentale du chauffage IR d'une plaque

Dans un 1er temps, nous avons réalisé des essais de chauffage sur des plaques. Cette géométrie plus simple que celle d'une préforme est retenue tout d'abord pour l'identification des propriétés thermiques et pour valider la modélisation du chauffage IR. Les plaques en PET Arnite D00301 sont injectées au laboratoire PIMM des Arts et Métiers Paristech. Les dimensions sont les suivantes (voir Fig.II.6) :

- Hauteur : h = 12.5 cm
- Largeur : b = 6 cm
- Epaisseur : e = 1 mm

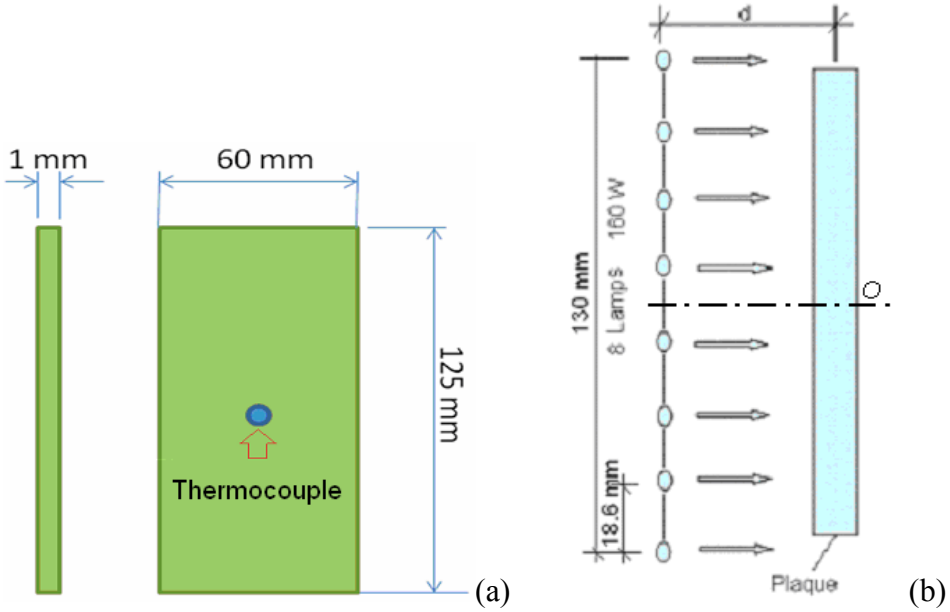


Figure II.6 : *(a) La plaque ; (b) Position des lampes et de la plaque*

II.3.1 Le champ de température de la surface arrière de la plaque

La caméra thermique nous permet de visualiser le champ de température de la surface de la plaque. L'émissivité du PET dans la gamme spectrale de la caméra est choisie égale à 1. En effet, avec l'épaisseur de 1mm, le PET est supposé comme un matériau opaque. On peut ainsi obtenir la température en plusieurs points de la surface de la plaque. Ici, on choisit de mesurer la température de 50 points (voir la figure II.7). On peut constater que la température la plus élevée se trouve dans la zone centrale. Au bord supérieur, parce que la plaque est fixée par un matériau métallique, on observe un effet du bord qui perturbe le champ de température : la température est plus forte à cet endroit.

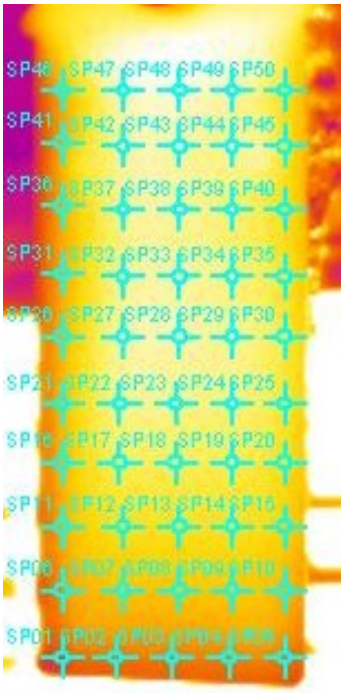


Figure II.7 : *Essais de mesure du champ de température de la surface arrière de la plaque*

II.3.2 La température mesurée par thermocouple et par la caméra

La figure II.8 illustre l'évolution de la température au point central de la surface arrière et de la surface avant mesurée avec des thermocouples et celle obtenue par la caméra thermique (uniquement sur la face arrière). Concernant la face arrière (face du coté opposé aux lampes), les évolutions de température sont identiques. La différence entre ces deux courbes est calculée par Eq. II.6.

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\left|T_{camera}-T_{thermocoupe}\right|}{T_{thermocoupe}}=3{,}83\% \qquad \text{(II.6)}$$

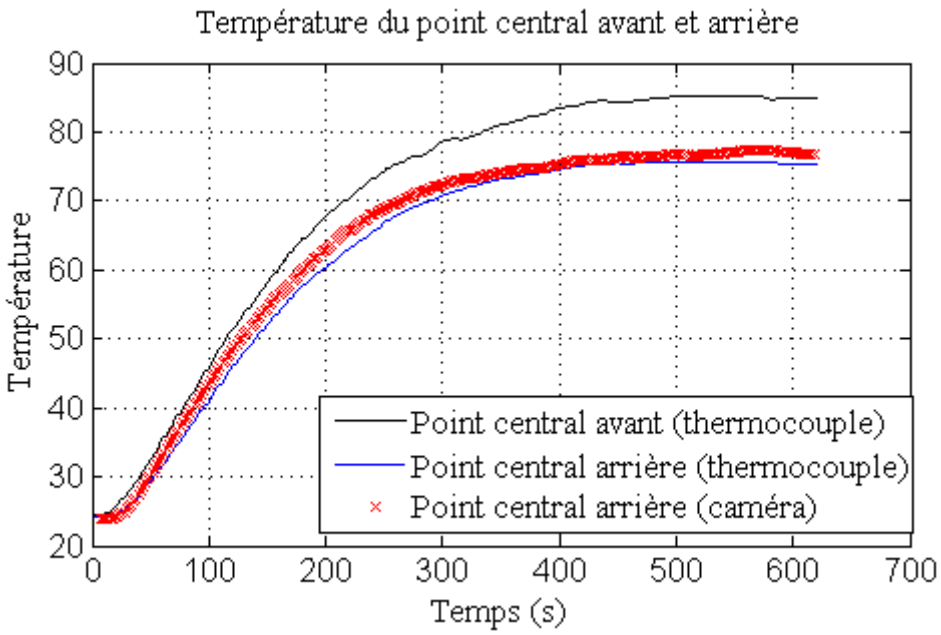


Figure II.8 : *L'évolution de la température expérimentale au point central de la surface arrière et de la surface avant*

Cette bonne adéquation entre ces deux moyens de mesure permet de valider notre méthodologie pour l'utilisation de la caméra thermique.

II.4 Identification des propriétés thermiques

A partir d'images thermiques obtenues par la caméra (Fig.II.7), on peut observer que le champ de température présente certaines hétérogénéités sur les bords de la plaque. On constate un écart d'environ 10°C entre le centre et les bords de la plaque ce qui donne un ordre de grandeur de $10^{o}C/(60mm)^{2}$ pour le terme en $\partial^{2}T/\partial x^{2}$ ou $\partial^{2}T/\partial y^{2}$. L'écart entre la face avant et la face arrière est aussi d'environ 10°C soit $10^{o}C/(1mm)^{2}$ pour le terme en $\partial^{2}T/\partial z^{2}$, 3600 fois plus grand que dans les 2 autres directions. On peut ainsi se limiter à une modélisation 1D (suivant l'épaisseur) pour faire la simulation numérique et l'identification. Dans cette partie on utilise uniquement les thermocouples pour mesurer l'évolution de la température sur les faces avant et arrière de la plaque.

II.4.1 Modélisation numérique 1D

On cherche à modéliser les transferts thermiques durant la phase de chauffage d'une plaque transparente en PET soumise au rayonnement IR. Pour résoudre ce problème, on se propose

de commencer par une modélisation à une dimension. La solution de l'équation de la chaleur peut s'écrire :

$$\rho C_p(T)\dot{T} - k\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -div\left(\overrightarrow{q_r}\right) \qquad \text{(II.7)}$$

où ρ est la masse volumique du matériau, C_p la capacité calorifique massique, k est la conductivité thermique, $\overrightarrow{q_r}$ est la densité de flux radiatif.

Dans le travail de Cosson *et al.* [COS 11], le coefficient de transfert de chaleur par convection pour la surface face aux lampes IR est légèrement supérieure à celui correspondant à la surface arrière. En revanche, dans le travail de Sacadura [SAC 73], c'est l'opposé qui est observé. Par conséquent, nous choisissons de prendre en compte et d'identifier deux coefficients différents pour la convection : 1 sur chacune des faces de la lampe. T_∞ est la température ambiante : la température de l'air ambiant entre la plaque et les lampes $T_{\infty f}$ est supérieure que celle à l'arrière $T_{\infty r}$. L'évolution de la température $T_{\infty f}$ est illustrée dans la figure II.9.

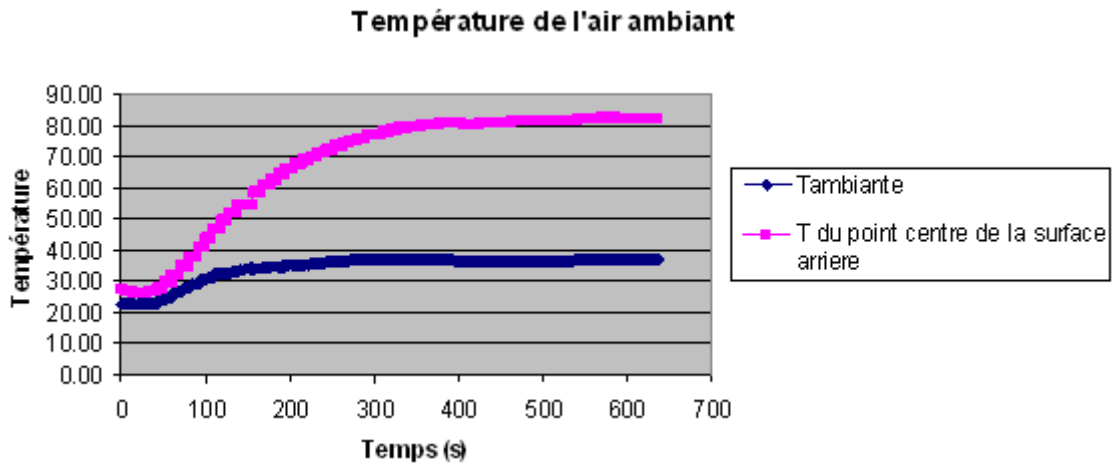


Figure II.9 : *L'évolution de la température de l'air ambiant*

Nous écrivons les conditions aux limites de la manière suivante :

$$-k\underline{\nabla T}.\underline{n} = h_f\left(T - T_{\infty f}\right) \quad \text{sur la surface en regard des lampes IR} \qquad \text{(II.8a)}$$

$$-k\underline{\nabla T}.\underline{n} = h_r\left(T - T_{\infty r}\right) \quad \text{sur la surface opposée au chauffage} \qquad \text{(II.8b)}$$

où h est le coefficient d'échange par convection. Dans notre cas, on distingue 2 coefficients pour la surface face aux lampes IR (h_f) et pour la surface arrière (h_r).

Et la condition initiale s'écrit :

$$T(z,0) = T_0 \qquad \text{(II.9)}$$

La conductivité thermique k, la masse spécifique ρ et le coefficient de transfert thermique par convection h sont indépendants de la température tandis que la capacité calorifique Cp est considérée comme une fonction de la température. En effet la capacité calorifique de chaleur augmente significativement avec la température (voir Fig.II.10). Selon les valeurs référencées dans [BOR 09], nous proposons une fonction pour représenter l'évolution de la capacité calorifique dans l'équation II.10 :

$$C_P = \Delta C_p \arctan\left(\alpha\left(T - T_g\right)\right) + C_{p1} \qquad \text{(II.10)}$$

où ΔC_p est une constante liée à l'amplitude de l'augmentation de la valeur de C_p pendant le passage de l'état vitreux à l'état de caoutchouc, T_g est proche de la température de transition

vitreuse, C_{p1} est une valeur de capacité calorifique correspondant à l'état vitreux du matériau et α est un facteur qui joue sur la courbure de fonction C_p (T).

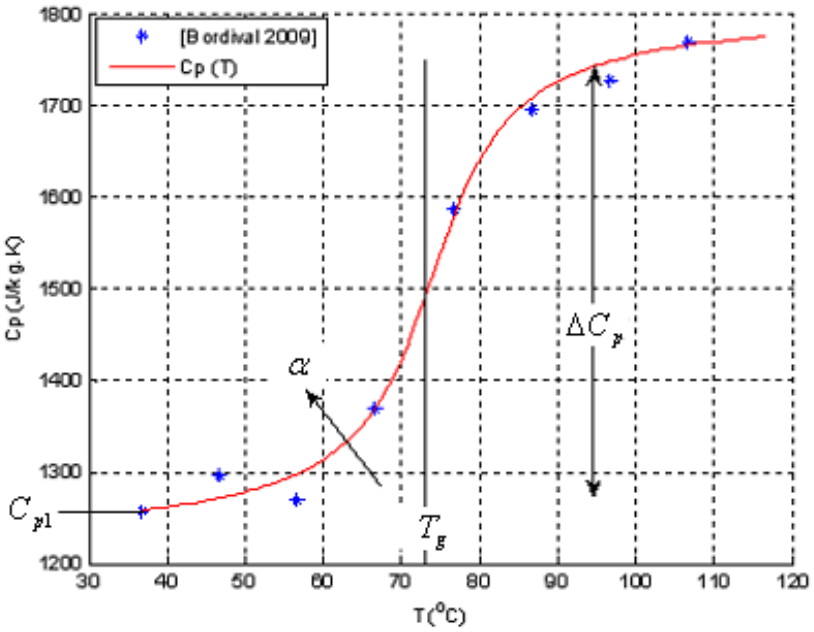


Figure II.10 : *La capacité calorifique C_p en fonction de la température et l'illustration de la fonction proposée*

Puisque le transfert de chaleur est considéré comme un problème 1D où la température varie seulement dans le sens de l'épaisseur, dans le cadre de l'identification 1D, on suppose que le flux pénètre suivant la normale à la plaque dans la zone centrale. L'absorption d'intensité interne radiatif est aussi considérée comme unidirectionnelle et gérée par la loi de Beer-Lambert :

$$\vec{q_r} = \phi_{\lambda 0} e^{-k_\lambda s} \vec{z} \qquad \text{(II.11)}$$

où $\phi_{\lambda 0}$ est le flux radiatif incident, k_λ est le coefficient absorption spectrale du PET, s représente la distance entre le point considéré et la surface incidente. D'après la Fig.II.13 , s peut être calculé comme : $s = z - d$.

L'équation de chaleur (Eq. II.7), incluant la capacité calorifique non constante (Eq. II.10) et l'équation de flux interne radiatif (Eq. II.11) est résolue en utilisant une méthode par éléments finis 1D. Le schéma implicite est choisi pour résoudre ce problème en fonction du temps. Une méthode Newton Raphson est utilisée pour résoudre ce problème non-linéaire.

II.4.2 Identification des propriétés thermiques

La méthode de Monte Carlo est utilisée pour identifier les paramètres qui minimisent l'écart entre les résultats expérimentaux et la solution numérique. La bibliographe sur les propriétés thermiques du PET permet d'avoir un ordre de grandeur des paramètres et de limiter l'étendue de la recherche :

- la masse volumique ρ : 1.20 - 2.0 g/cm^3
- la capacité calorifique C_p : voir Fig.II.10
- la conductivité thermique k : 0.1 - 0.3 W.m^{-1}.K^{-1}
- le coefficient d'échange par convection h : 5-20 W/(m^2.K)
- le coefficient d'absorption k_λ : 3.10^4 - 7.10^4 m^{-1}

Pour chaque tirage, un calcul est effectué et les résultats numériques sont comparés avec les températures expérimentales. A chaque fois, le jeu de paramètre correspondant à l'écart le plus faible est retenu. On a réalisé 10000 tirages. Les propriétés thermiques sont récapitulées dans le tableau II.1. Cette identification indique que le coefficient h_f pour la face avant est plus petit que le coefficient h_r de la face arrière. La masse spécifique ρ et le coefficient d'absorption k_λ ont le même ordre de grandeur que dans la littérature. La conductivité thermique k est inférieure à ce à quoi on pouvait s'attendre. Cette petite valeur peut s'expliquer par la méthode de mesure par thermocouple sur la face en vis-à-vis des lampes. En effet, la température de la face avant est certainement surestimée (les lampes chauffent aussi les thermocouples). Par conséquent, la différence entre T_f et T_r est plus petite que celle mesurée et une conductivité plus petite serait nécessaire pour en rendre compte. Malheureusement en état actuel nous ne disposons pas d'une mesure plus fine.

Table II.1. Les paramètres thermiques identifiés

Paramètre	ρ (kg/m^3)	C_p (J/kg.K)				k (W/m.K)	h (W/m^2.K)		k_λ (/m)
		C_{p1}	T_g	ΔC_p	α		h_f	h_r	
Valeur	1400	120	87	1650	0.1	0.07	7	16	3.10^4

La figure II.11 illustre avec différentes distances d entre la plaque et les lampes, les résultats expérimentaux sur l'évolution de la température en surface avant les lampes T_f (bleu) et arrière T_r (rouge). Avec les paramètres identifiés, les solutions numériques (courbes) obtenues ont une bonne représentation des résultats expérimentaux (points).

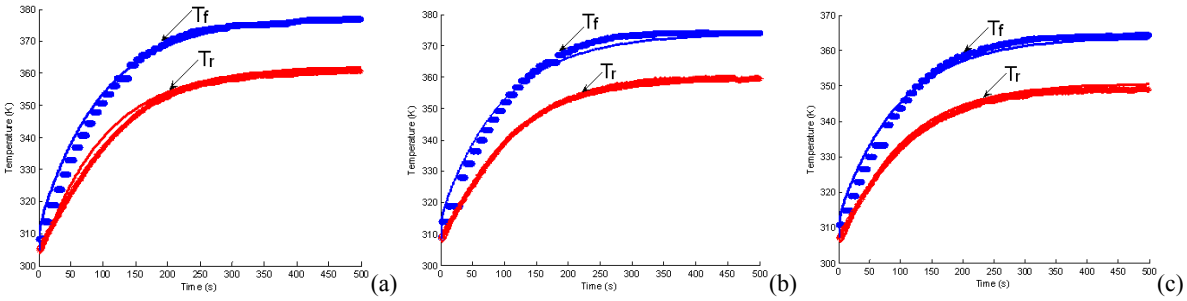


Figure II.11 : *Les résultats expérimentaux (points) et les solutions numériques avec les paramètres identifiés (courbes), (a) d=11cm; (b) d=12cm; (c) d=13cm.*

Dans la fin de cette section et dans la suivante, nous cherchons à valider la cohérence des valeurs obtenues pour les différents paramètres en comparant avec d'autres modélisations ou approches de la littérature. L'évolution de C_p pour le PET Arnite D00301 est illustrée dans la Fig.II.12. En comparant avec celle du matériau PET T4F9 on peut observer qu'ils ont le même ordre de grandeur, sauf quelques différences à la température plus basse. Le coefficient de transfert thermique h peut être estimé à partir de la relation proposée par Churchill et Chu [CHU 75] :

$$h = \frac{k}{L}\left(0.68 + \frac{0.67 R_a^{1/4}}{\left(1+\left(0.492/P_r\right)^{9/16}\right)^{4/9}}\right) \qquad \text{(II.12)}$$

où L est la hauteur de la plaque, R_a est le nombre de Rayleigh et P_r représente le nombre de Prandtl. P_r = 0,688 et R_a = 1,6·10^6 lorsque la température atteint 100 °C [BOR 09], nous pouvons obtenir la valeur de h en utilisant l'équation II.12 : h = 11 W/m^2.K. Le h_r identifié (16

W/m^2.K) est un peu supérieure à la valeur estimée alors que h_f (7 W/m^2.K) est un peu plus basse que celle-ci.

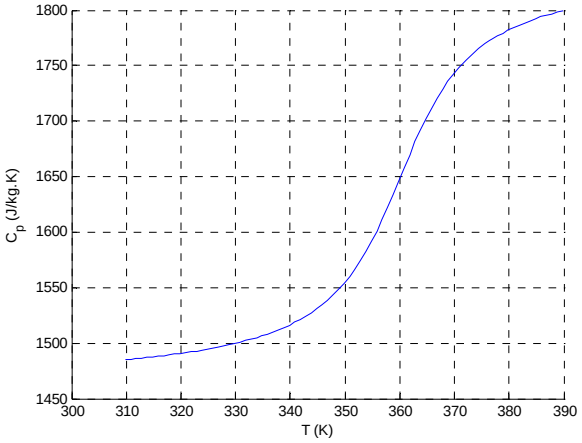


Figure II.12 : *L'évolution de C_p avec les paramètres identifiés*

II.4.3 Modélisation du flux radiatif incident

Nous testons trois distances différentes entre les lampes et la plaque de PET. L'intensité du rayonnement incident dépend de la distance : elle diminue lorsque cette distance augmente. Du point de vue de la diffusion de rayonnement, l'échange radiatif entre deux surfaces noires peut être estimé par le facteur de forme [SIE 92]. En reprenant la démarche qui a menée à l'évaluation de ces facteurs de forme géométrique, on cherche à estimer le rayonnement IR absorbé à partir d'une modélisation simple basée sur le principe de l'énergie spectrale. Huit lampes IR identiques (rayon r = 2 mm et longueur l = 185 mm) sont modélisées comme des cylindres séparés par une distance dl = 18.6 mm (figure II.13b).

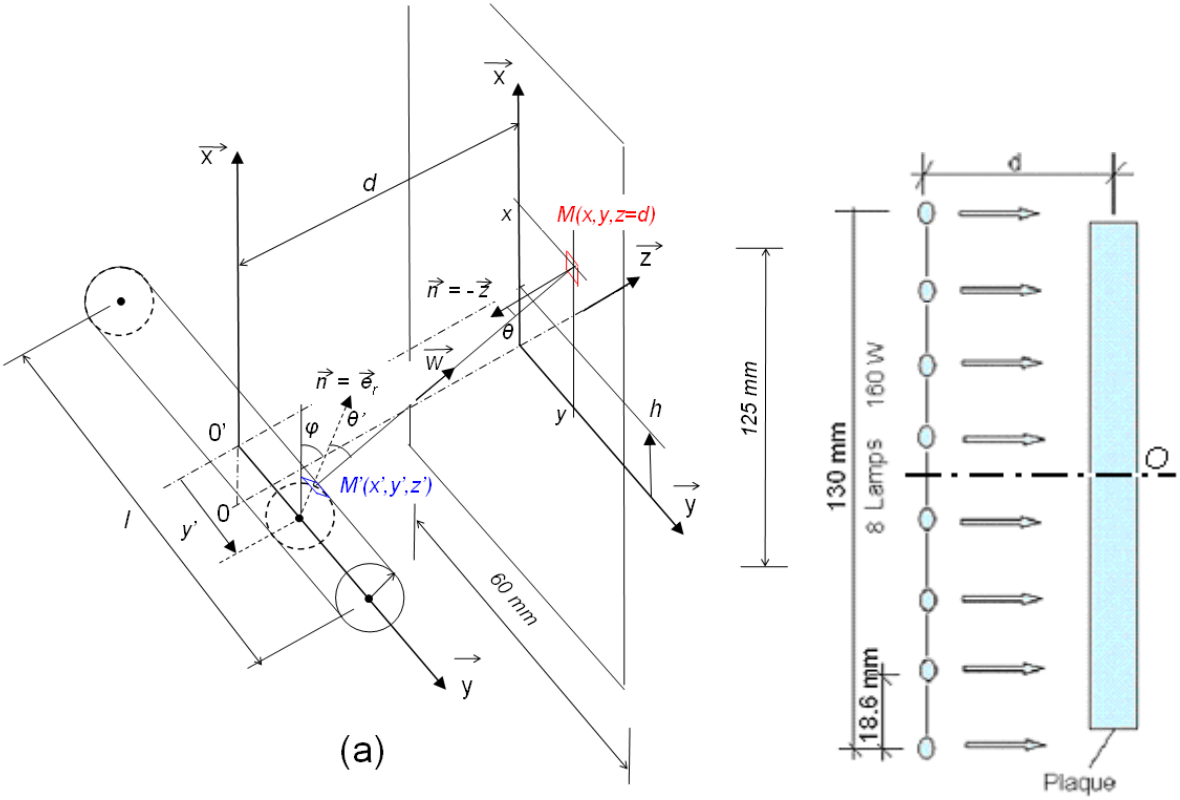


Figure II.13 : *(a) La géométrie de la plaque et des lampes; (b) position des lampes*

La quantité de l'énergie de chaleur par rayonnement, qui vient d'un élément de surface *dA'* au point de collocation *M'* ($x' = r\cos\varphi + h$, y', $z' = r\sin\varphi$) et qui atteint l'élément de surface *dA* au point de collocation *M* (*x, y, z=d*) en suivant le chemin de vecteur $\vec{w}$, peut être exprimé comme dans l'équation II.13 :

$$dQ_{dA'\to dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varepsilon_\lambda i_\lambda^b(\lambda) d\lambda \cdot \int_{\varphi=0}^{\varphi=\pi} \int_{y'=-l/2}^{y'=l/2} \cos\theta \cos\theta' \frac{dA}{\left\|M'M\right\|^2} \underbrace{dA'}_{rd\varphi dy'} \tag{II.13}$$

où λ est une longueur d'onde donnée comprise entre 0,2 et 10 µm et ε_λ est l'émissivité spectrale du tungstène égale à 0,26 [BOR 09]. L'émittance du corps noir est donnée par la loi de Planck :

$$i_\lambda^b = \frac{2C_1}{\lambda^5\left(e^{C_2/\lambda T_{fil}} - 1\right)} \tag{II.14}$$

où $C_1 \approx 1.19 \cdot 10^8$ W.m^{-2}.µm^4, $C_2 \approx 14388$ µm.K. Nous supposons que la température du filament est une source uniforme à T_{fil} = 1700K. $\vec{w}$ est un vecteur qui représente la trajectoire du rayonnement provenant du point *M'* au point *M* :

$$\vec{w} = \frac{\overrightarrow{M'M}}{\left\|M'M\right\|} = \frac{x-x'}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_x + \frac{y-y'}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_y + \frac{z-z'}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_z \approx \frac{x-h}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_x + \frac{y-y'}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_y + \frac{d}{\left\|M'M\right\|}\vec{e}_z \tag{II.15}$$

On fait l'approximation raisonnable que : $r << d$. Les deux angles θ' et θ représentent respectivement, l'angle entre la normale à la surface de la lampe $\vec{n}'$ au point M 'et le vecteur $\vec{w}$, l'angle entre la normale à la plaque de PET $\vec{n}$ au point M et le vecteur $\vec{w}$:

$$\cos\theta = \vec{w}\cdot\vec{e}_z \approx \frac{d}{\left\|M'M\right\|},\ \cos\theta' = \vec{w}\cdot\vec{e}_r = \frac{(x-h)\cos\varphi}{\left\|M'M\right\|} + \frac{d\sin\varphi}{\left\|M'M\right\|} \tag{II.16}$$

où : $\left\|M'M\right\| = \sqrt{(x-h)^2 + (y-y')^2 + d^2}$.

Parce que le rayon du filament *r* est négligeable par rapport à la distance *d*, l'équation II.13 en se combinant avec l'équation II.16 conduit à :

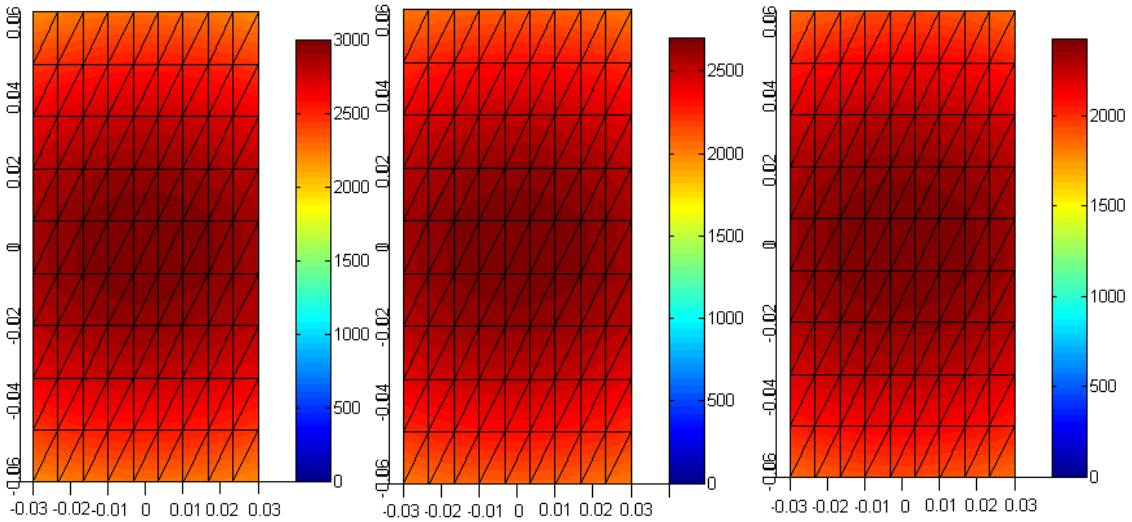
$$dQ_{dA'\to dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varepsilon_\lambda i_\lambda^b(\lambda) d\lambda \cdot 2rd^2 \int_{y'=-l/2}^{y'=l/2} \frac{dAdy'}{\left\|M'M\right\|^2} \tag{II.17}$$

Enfin, l'émittance du rayonnement incident peut s'écrire :

$$\phi_{\lambda 0}(M) = \frac{dQ_{lamps\to dA}}{dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \varepsilon_\lambda i_\lambda^b(\lambda) d\lambda \cdot 2rd^2 \sum_{i=1}^{n} \int_{y'=-l/2}^{y'=l/2} \frac{dy'}{\left\|M'M\right\|^2} \tag{II.18}$$

où $n = 8$ pour 8 lampes.

Nous pouvons voir, à partir de la figure II.14, que le flux radiatif incident calculé par équation II.18 et qui atteint la plaque en PET n'est pas uniforme. La différence maximale peut atteindre 21% entre la zone centrale de la plaque de PET et les coins. Néanmoins, dans la région centrale où l'identification se fait, l'hétérogénéité est inférieure à 10%, ce qui autorise l'utilisation de l'approche 1D pour l'identification.



(a) (b) (c)

Figure II.14 : *Le flux radiatif incident calculé (a) d=11cm; (b) d=12cm; (c) d=13cm*

On peut également remarquer que le rayonnement incident calculé dans la zone centrale diminue lorsque la distance *d* augmente. Le flux incident calculé dans la zone centrale est très proche de celui qui est identifié. Les valeurs obtenues sont représentées dans le tableau II.2.

Table II.2. Les valeurs des flux radiatif incident

$d(cm)$	11	12	13
$\phi_{\lambda 0}$ calculé (W/m^2)	3000	2700	2440
$\phi_{\lambda 0}$ identifié (W/m^2)	3080	2590	2380

II.4.4 Modélisation 3D et validation du cas de la plaque

Les propriétés thermiques sont identifiées par la simulation 1D. Le flux radiatif reçu par la plaque est modélisé en prenant en compte la dépendance spectrale du rayonnement.

Dans cette partie, nous présentons la simulation en 3D par éléments finis du chauffage IR de la plaque en utilisant le logiciel commercial Comsol. Les propriétés identifiées sont entrées dans le logiciel et le flux radiatif considéré comme un terme source est implémenté. Pour ce calcul, le flux radiatif est une donnée d'entrée. Il doit être décrit analytiquement sur la face avant du modèle de la plaque. On propose de représenter, dans Comsol, le flux radiatif calculé point par point à la section précédente par une fonction polynomiale :

$$\phi_{\lambda 0}(x,y) = ax^2 + bx + cz^2 + dz + e \qquad \text{(II.19)}$$

D'après la méthode des moindre carrés, on trouve les meilleures valeurs dans le cas d'une distance d = 13cm :

a = -129491.6 (W/m^4*), b = -0.001 (W/m*^{3}*), c = -96842.9 (W/m*^{4}*), d = -1.46 (W/m*^{3}*), e = 2436.9 (W/m*^{2}*).*

La figure II. 15 montre qu'il y a une bonne concordance entre le flux radiatif incident calculé et le flux approximé. On peut implémenter ce flux approximé dans la simulation.

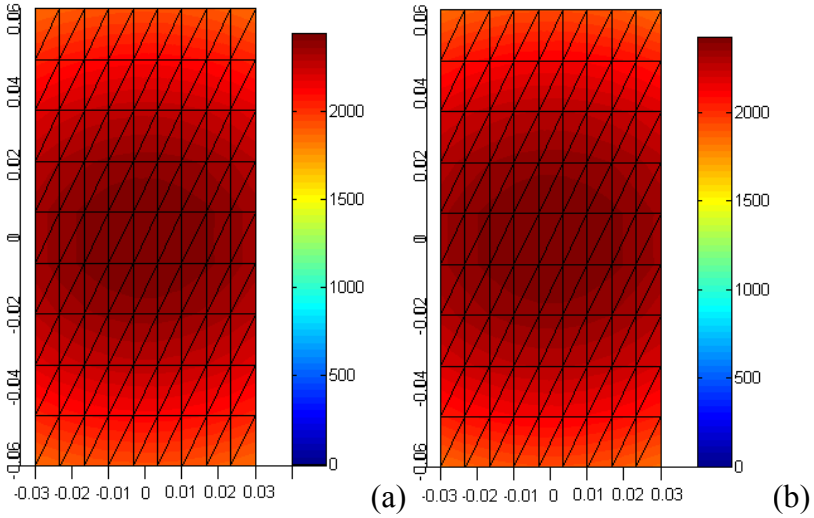


Figure II.15 : *(a) Le flux radiatif incident calculé en d = 13cm ; (b) Le flux radiatif incident approximé*

Les conditions aux limites imposées numériquement sont identiques aux conditions expérimentales. Les résultats numériques obtenus sont assez concordants avec les données expérimentales. La figure II.16 illustre la température de la surface arrière par la solution numériquement et mesurée par la caméra thermique lorsque le régime stationnaire est atteint. D'après la figure II.11, le régime stationnaire (la température ne varie quasiment plus) commence à partir d'environ 450s. Dans les résultats expérimentaux (Fig.II.16b), on peut constater que la température la plus élevée se trouve dans la zone centrale. Au bord supérieur, comme la plaque est fixée par un matériau métallique, un effet de bord perturbe le champ de température qui est plus fort à cet endroit.

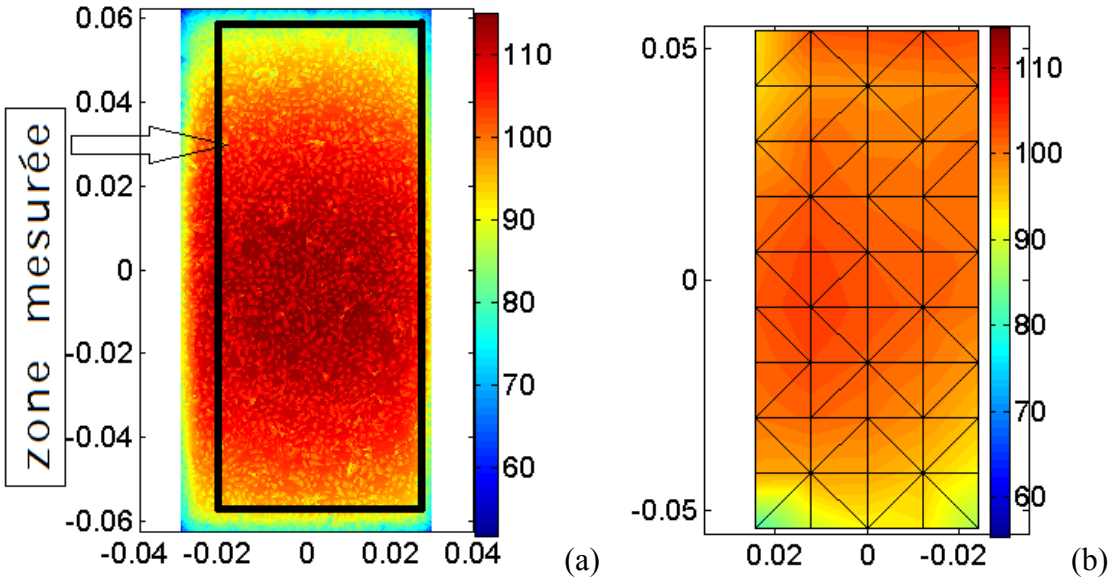


Figure II.16 : *La température de la surface arrière de la solution numérique (a) et expérimentale (b) en régime stationnaire*

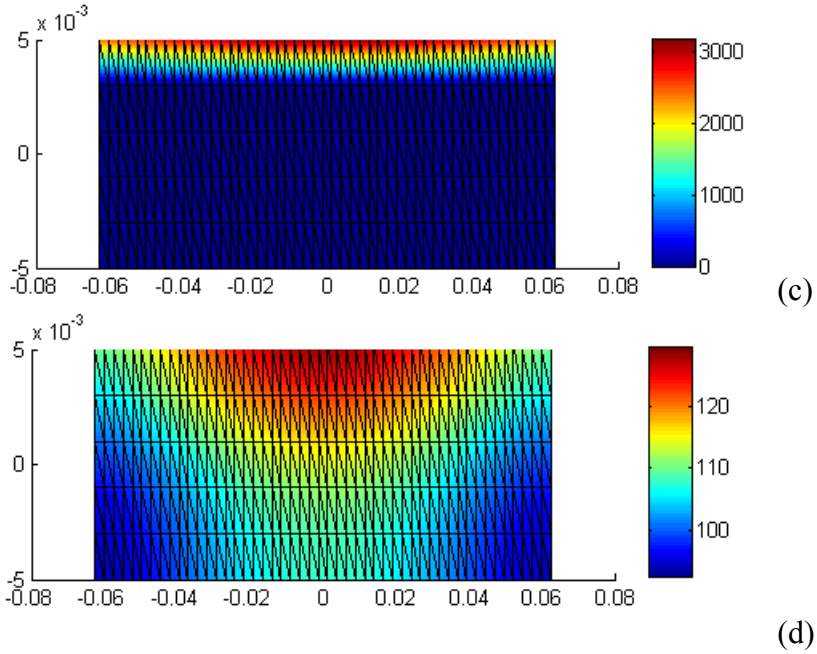


Figure II.16 : *Le profil d'intensité interne radiative (c) et de température (d) dans l'épaisseur*

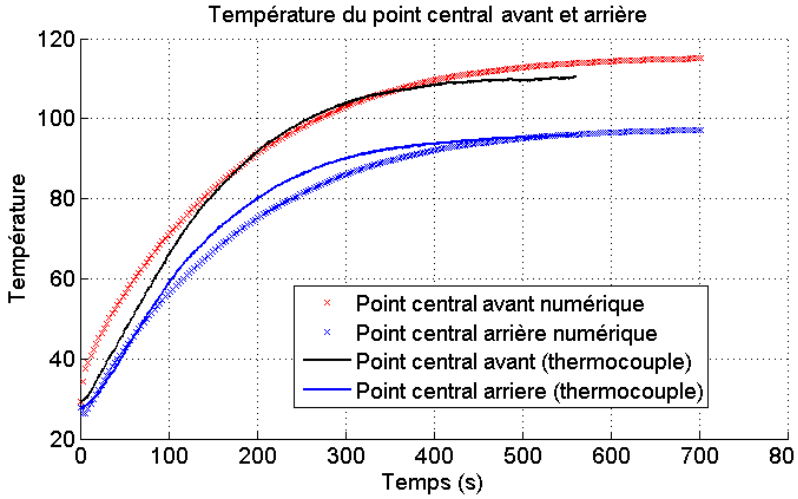


Figure II.17 *: Température au point central de la surface avant et de la surface arrière par la solution numérique et par mesure expérimentale*

La figure II.17 montre l'évolution de la température au point central de la surface arrière et de la surface avant de la solution numérique comparée avec la mesure expérimentale. L'erreur entre le résultat numérique et le résultat expérimental est 5.3% ce qui est tout à fait acceptable compte tenu de la simplicité de la modélisation.

II.5 Étude expérimentale du chauffage IR d'une préforme

Dans la suite, on s'intéresse au cas de la préforme pour modéliser la distribution de la température par chauffage IR. On suit la température sur 62 points pour obtenir le champ de la température (figure II.18) de la surface extérieure de la préforme qui tourne avec une vitesse de 8 tours/minute devant les lampes IR.

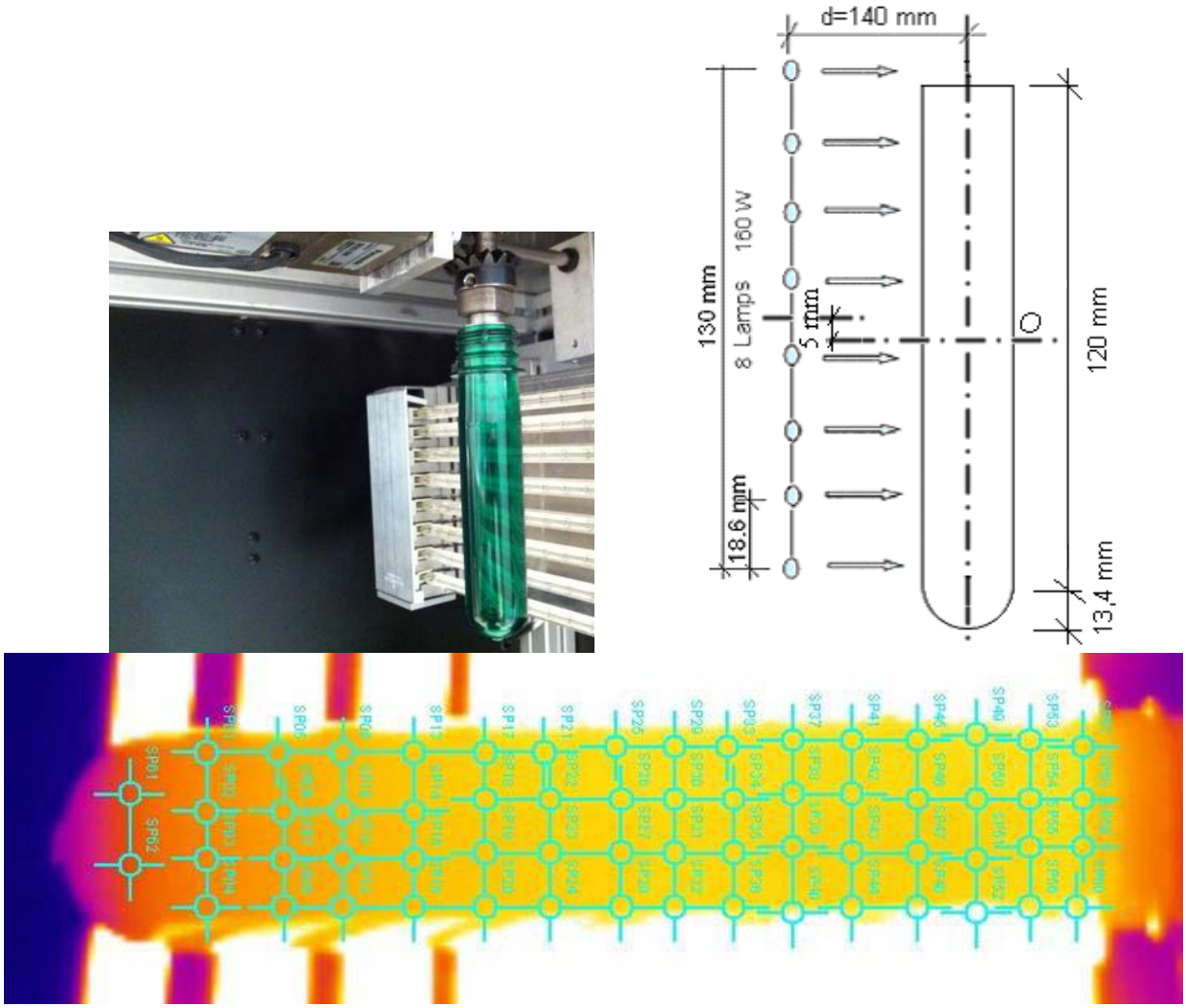


Figure II.18 : *L'essai avec une préforme en rotation*

Lorsque le champ de température extérieure de la préforme a atteint son régime stationnaire on obtient la figure II.19. La rotation de la préforme lors du chauffage conduit à un champ de température en régime stationnaire présentant une symétrie de révolution autour de son axe. Suivant l'axe vertical, on observe que la température au point central est plus importante que près des bords. Ce résultat est compatible avec le flux incident calculé dans la partie numérique.

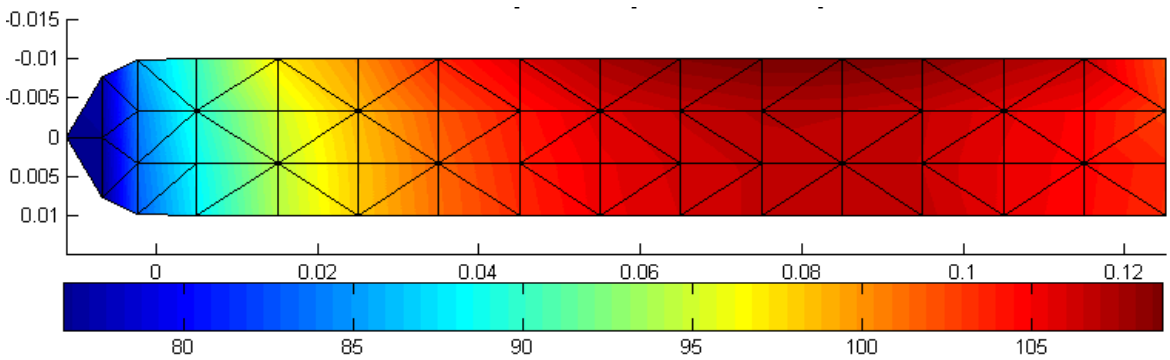


Figure II.19 : *Champ de la température expérimentale en régime stationnaire sur la surface mesurée*

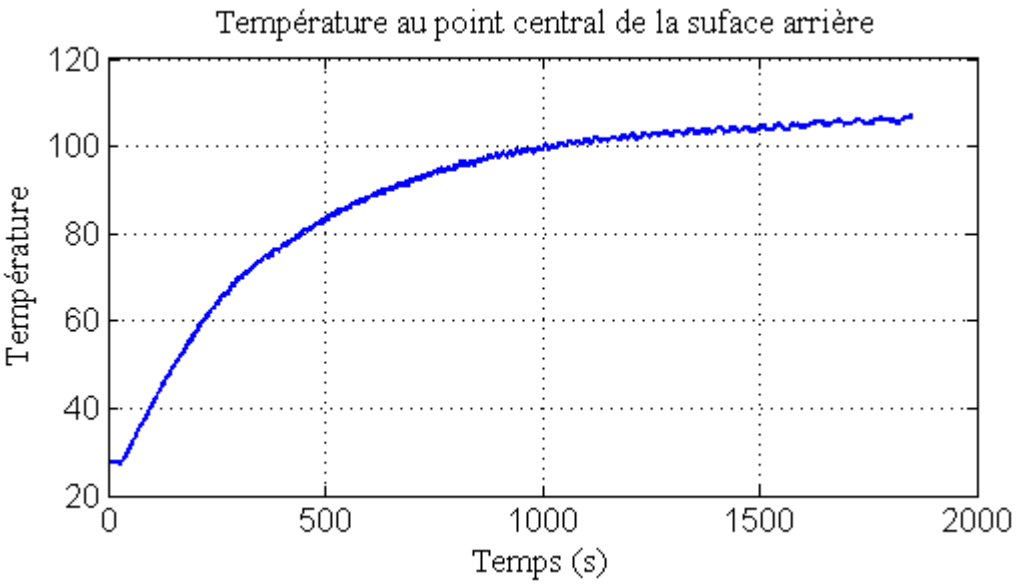


Figure II.20 : *L'évolution de la température expérimentale au point central de la surface mesurée*

La figure II.20 illustre l'évolution de la température expérimentale au point central de la surface mesurée.

II.6 Étude numérique du chauffage IR d'une préforme

II.6.1 Calcul du flux imposé sur la surface extérieure

II.6.1.a Calcul du flux de la partie cylindrique de la préforme

Avant de réaliser la simulation thermique du chauffage IR sur la préforme, on doit calculer le flux d'absorption du rayonnement IR pour l'implémenter ensuite dans la modélisation sous Comsol. Suivant le même principe que celui présenté dans le cas d'une plaque, on s'intéresse à calculer le flux radiatif incident au point *M* sur la surface extérieure de la préforme qui est causé par les rayonnements d'un point *M'* des lampes. La figure II.21 montre la configuration géométrique des lampes et de la préforme. Le point d'origine du repère choisi est noté O, c'est un point de l'axe de la préforme. Les coordonnées de *M* et *M'* sont :

$$M'\begin{cases} x' = r\cos\varphi + h \\ y' \\ z' = d - r\sin\varphi \\ \overrightarrow{e_{r'}} = (\cos\varphi, 0, -\sin\varphi) \end{cases} \qquad M\begin{cases} x \\ y = R\cos\alpha \\ z = R\sin\alpha \\ \overrightarrow{e_R} = (0, \cos\alpha, \sin\alpha) \end{cases} \tag{II.20}$$

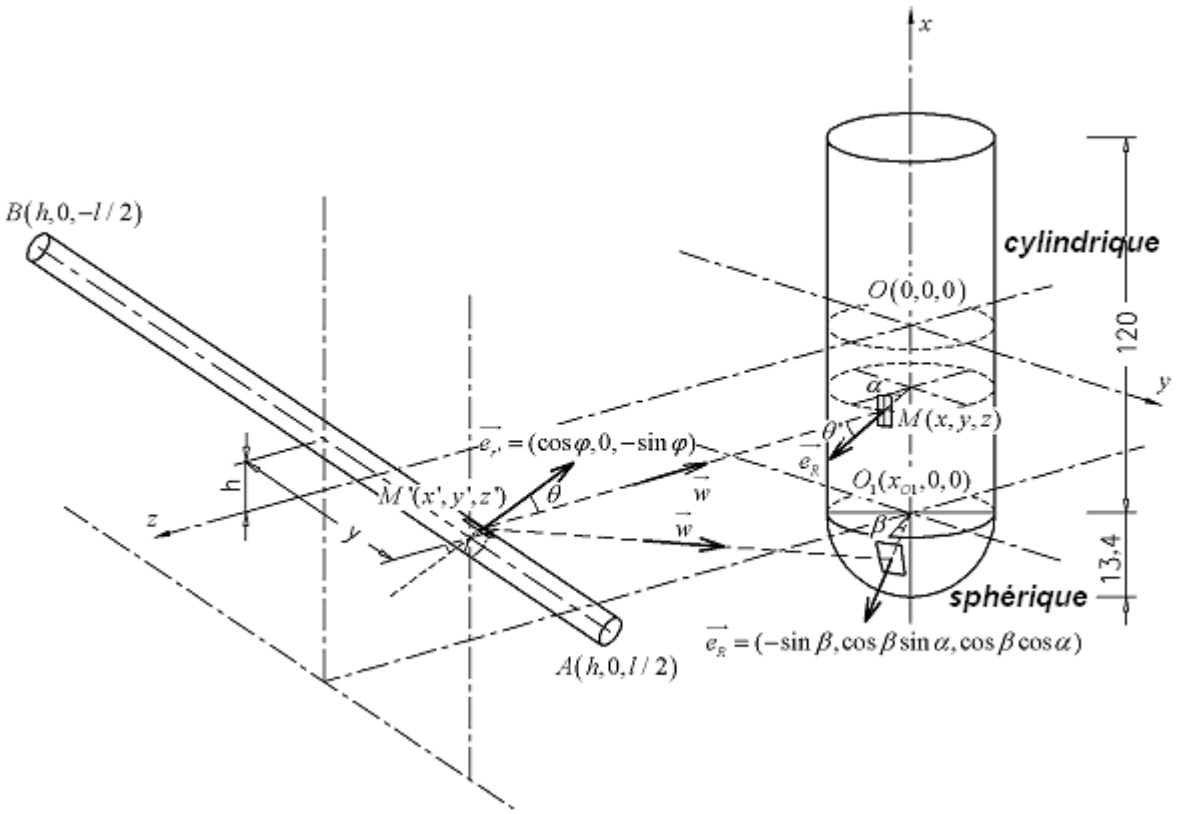


Figure II.21 : *Configuration géométrique des lampes et de la préforme*

où : h est la coordonnée suivant l'axe x, d est la distance entre la surface des lampes et l'axe du tube.

On considère que le rayon du filament r est très petit devant la distance d entre la lampe et la préforme. On peut obtenir le vecteur $\vec{w}$ qui s'écrit :

$$\vec{w} = \frac{\overrightarrow{M'M}}{MM'} = \begin{cases} \dfrac{x-x'}{MM'} = \dfrac{x-h-r\cos\varphi}{MM'} \approx \dfrac{x-h}{MM'} \\ \dfrac{y-y'}{MM'} = \dfrac{R\cos - y'}{MM'} \\ \dfrac{z-z'}{MM'} = \dfrac{z-d+r\sin\varphi}{MM'} \approx \dfrac{z-d}{MM'} \end{cases} \qquad \text{(II.21)}$$

où $MM' = \sqrt{(x-h)^2 + (y-y')^2 + (z-d)^2}$

Les deux angles θ et θ' qui représentent respectivement les angles entre la normale $\vec{n}$ et $\vec{w}$ et entre la normale $\vec{n'}$ et $\vec{w}$ s'écrivent :

$$\begin{cases} \cos\theta = -\vec{w}.\vec{e_R} = -\dfrac{(y-y')\cos\alpha + (z-d)\sin\alpha}{\|MM'\|^2} = -\dfrac{(y-y')\dfrac{y}{R} + (z-d)\dfrac{z}{R}}{\|MM'\|^2} = -\dfrac{(y-y')y + (z-d)z}{\|MM'\|^2 R} \\ \cos\theta' = \vec{w}.\vec{e_{r'}} = \dfrac{(x-h)\cos\varphi - (z-d)\sin\varphi}{\|MM'\|^2} \end{cases}$$

(II.22)

La quantité de chaleur par rayonnement, qui vient d'un élément de surface *dA'* au point de collocation *M'* et qui atteint l'élément de surface *dA* au point de collocation *M* avec le vecteur de chemin $\vec{w}$, peut être décrit par l'équation II.13. Dans le cas d'une préforme, on a :

$$dQ_{lampe\to dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} i_{\lambda b}\varepsilon_\lambda d_\lambda . \int_{\varphi=0}^{\pi}\int_{y'=-l/2}^{l/2}\left(\frac{\left[(y'-y)y+(d-z)z\right]}{R}.\left[(x-h)\cos\varphi+(d-z)\sin\varphi\right]\right)\frac{dA}{\|MM'\|^4} r d\varphi dy'$$

$$dQ_{lampe\to dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} i_{\lambda b}\varepsilon_\lambda d_\lambda .r.\int_{\varphi=0}^{\pi}\frac{\left[(x-h)\cos\varphi+(d-z)\sin\varphi\right]}{R} d\varphi.\int_{y'=-l/2}^{l/2}\frac{(y'-y)y+(d-z)z}{\|MM'\|^4} dy'.dA$$

$$dQ_{lampe\to dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} i_{\lambda b}\varepsilon_\lambda d_\lambda \frac{r.2(d-z)}{R}\int_{y'=-l/2}^{l/2}\frac{(y'-y)y+(d-z)z}{\|MM'\|^2} dy'.dA \qquad \text{(II.23)}$$

Et par conséquence, le flux surfacique reçu par la préforme dépend de *M* et s'écrit selon l'équation II.24 :

$$\phi_S(M) = \frac{dQ_{lampe\to dA}}{dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2}\frac{2C_1.\varepsilon_\lambda}{\lambda^5\left(e^{\frac{C_2}{\lambda T}}-1\right)} d_\lambda \frac{r.2(d-z)}{R}\int_{y'=-l/2}^{l/2}\frac{(y'-y)y+(d-z)z}{\|MM'\|^2} dy' \qquad \text{(II.24)}$$

On a la surface tangentielle au point $M(x_M, y_M)$ de la partie cylindrique de la préforme :

$$(S) \quad (z-z_M)(z_M-z_O)+(y-y_M)(y_M-y_O)=0 \quad (y_O = z_O = 0) \qquad \text{(II.25)}$$

Le flux du point M dépend de sa position par rapport aux deux bouts A et B de la lampe ($y' = \pm l/2$). Il y a 3 cas :

- M peut recevoir les rayonnements de A et B, c'est-à-dire M peut recevoir les rayonnements de toute la lampe. L'intervalle de l'intégrale pour calculer $\phi_S(M)$ est $[-l/2, l/2]$. Dans ce cas-là, A et B sont du même côté par rapport à la surface tangentielle au M et dans le côté opposé du centre O du tube. On a toujours : $(z_O-z_M)(z_M-z_O)+(y_O-y_M)(y_M-y_O)<0$ donc :

$$\begin{cases}(z_A-z_M)z_M+(y_A-y_M)y_M>0\\(z_B-z_M)z_M+(y_B-y_M)y_M>0\end{cases}$$

- M ne peut pas recevoir les rayonnements de A et B, c'est-à-dire que le flux du point M est nul :

$$\begin{cases}(z_A-z_M)z_M+(y_A-y_M)y_M<0\\(z_B-z_M)z_M+(y_B-y_M)y_M<0\end{cases}$$

- M ne peut que recevoir les rayonnements d'une partie des rayonnements de AB, c'est-à-dire que M peut recevoir les rayonnements de l'intervalle AD ou BD avec D qui est un point de la lampe. Dans ce cas, A et B sont des deux côtés opposés par rapport de la surface tangentielle du tube sur le point M. D est l'intersection de la lampe et la surface tangentielle. Deux sous cas se présentent :
  - M peut recevoir les rayonnements de l'intervalle AD ; O et B sont sur le même côté par rapport de la surface tangentielle du tube sur le point M et A est dans l'autre côté. Donc, l'intervalle de l'intégrale est $[y_D, l/2]$:

$$\begin{cases}(z_A-z_M)z_M+(y_A-y_M)y_M>0\\(z_B-z_M)z_M+(y_B-y_M)y_M<0\end{cases}$$

  - M peut recevoir les rayonnements de l'intervalle BD ; O et A sont sur le même côté par rapport à la surface tangentielle au point M et B sur l'autre

côté (opposé par rapport du centre de tube). Donc, l'intervalle de l'intégrale est $\left[-l/2, y_D\right]$:

$$\begin{cases}(z_A - z_M)z_M + (y_A - y_M)y_M < 0 \\ (z_B - z_M)z_M + (y_B - y_M)y_M > 0\end{cases}$$

Dans le 3eme cas, il faut trouver l'intersection D entre la surface tangentielle et la lampe. Ici, on a la surface tangentielle au point $M(x_M, y_M)$: (S) : $(z - z_M)z_M + (y - y_M)y_M = 0$ et l'équation de la ligne de la lampe : $\begin{cases} z = d \\ x = h_{lampe} \\ -l/2 \le y \le l/2 \end{cases}$. Les coordonnées du D sont calculées par :

$$\begin{cases}(z - z_M)z_M + (y - y_M)y_M = 0 \\ z = d \\ x = h_{lampe}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases} z_D = d \\ x_D = h_{lampe} \\ y_D = \dfrac{\left(z_M - d\right)z_M}{y_M} + y_M \end{cases} \qquad \text{(II.26)}$$

II.6.1.b Calcul du flux de la partie hémisphérique cylindrique de la préforme

Soit O_1 le centre de la sphère : $O_1(y_{O_1} = z_{O_1} = 0, x_{O_1})$. Le point M est un nœud sur la surface extérieure dans la partie hémisphérique. Le flux surfacique reçu par la préforme dépend de M et s'écrit :

$$\phi_S(M) = \frac{dQ_{lampe \to dA}}{dA} = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \frac{2C_1.\varepsilon_\lambda}{\lambda^5\left(e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1\right)} d_\lambda \frac{r.2(d-z)}{R} \int_{y'=-l/2}^{l/2} \frac{(x-h)(x_{O_1} - x) + (y' - y)y + (d-z)z}{\|MM'\|^4} dy' \qquad \text{(II.27)}$$

Ici, on a la surface tangentielle de la sphère au point $M(x_M, y_M)$:

(S) : $(x - x_M)\left(x_M - x_{O1}\right) + (y - y_M)\left(y_M - y_{O1}\right) + (z - z_M)\left(z_M - z_{O1}\right) = 0$

Il y a aussi 3 cas comme dans le calcul précédent. Il faut trouver l'intersection D entre la surface tangentielle et la lampe. Ici, on a la surface tangentielle du tube au point $M(x_M, y_M)$:

(S) : $(x - x_M)\left(x_M - x_{O1}\right) + (y - y_M)y_M + (z - z_M)z_M = 0$

et l'équation de la ligne de lampe : $\begin{cases} z = d \\ x = h_{lampe} \\ -l/2 \le y \le l/2 \end{cases}$. Les coordonnées de D sont calculées par cette formule :

$$\begin{cases}(x-x_M)(x_M-x_{O1})+(y-y_M)y_M+(z-z_M)z_M=0\\ z=d\\ x=h_{lampe}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases} z_D=d\\ x_D=h_{lampe}\\ y_D=\dfrac{(h_{lampe}-x_M)(x_M-x_{O1})+(z_M-d)z_M}{y_M}+y_M\end{cases} \quad \text{(II.28)}$$

A partir du calcul du flux radiatif incident sur la partie cylindrique et hémisphérique, on obtient finalement le flux calculé sur la surface extérieure de la préforme (figure II.22). On peut constater que la valeur la plus élevée se trouve au centre de la préforme.

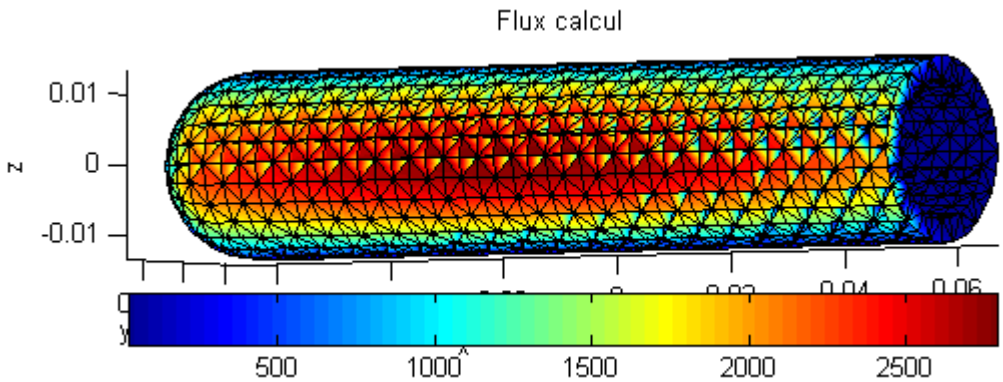


Figure II.22 : *Flux radiatif incident calculé sur la surface extérieure de la préforme (Visualisé par Matlab)*

II.6.2 Approximation des valeurs du flux imposé sur la préforme

Le flux est calculé en cordonnées cartésiennes (x, y, z). On les transforme en coordonnées cylindriques (r, θ, z) (figure II.23) pour imposer le flux approximé dans la simulation. Afin de bien représenter la forme de ce flux calculé dans la figure II.23 et de garantir une valeur positive du flux en tous les points de la préforme on a choisi une fonction exponentielle pour l'approximation :

$$q_{fun}=a\exp(b\theta^2+c\theta+dz^2+ez+f) \quad \text{(II.29)}$$

où : $\begin{cases} x=r\cos\theta\\ y=r\sin\theta\end{cases}$

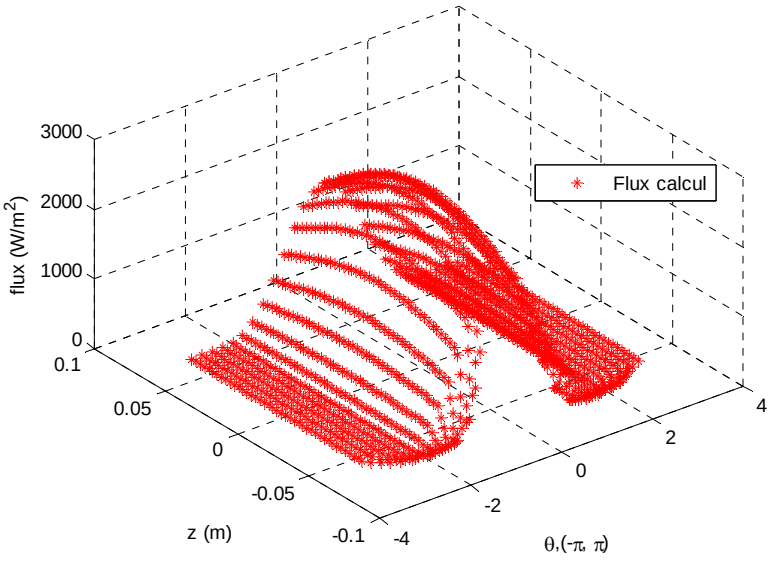


Figure II.23 *: Représentation du flux en coordonnées cylindriques*

Après avoir utilisé la méthode des moindres carrés, on trouve les meilleurs paramètres pour cette fonction :
a = 2.43 (W/m²), b = -0.86, c = -0.0056, d = 6.45 (m⁻²), e = -92.61 (m⁻¹), f = 0.61

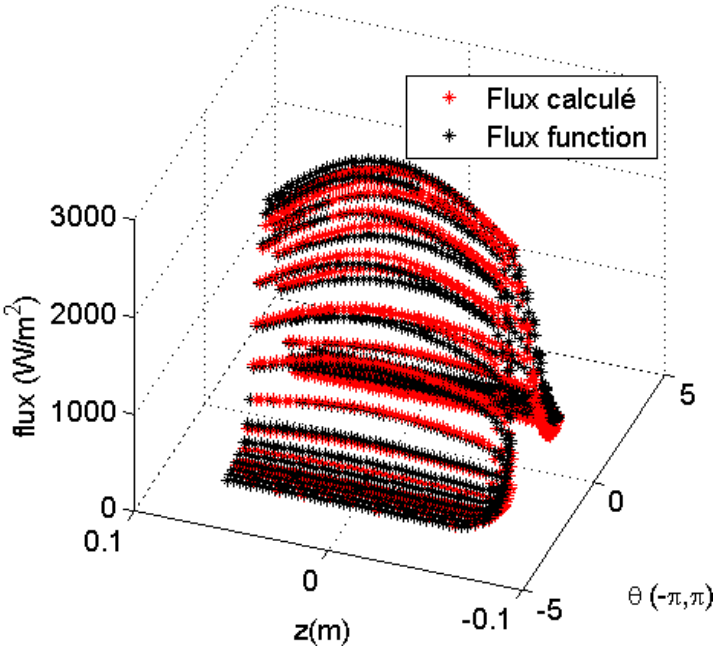


Figure II.24 : *Comparaison entre le flux calculé et le flux approximé (1)*

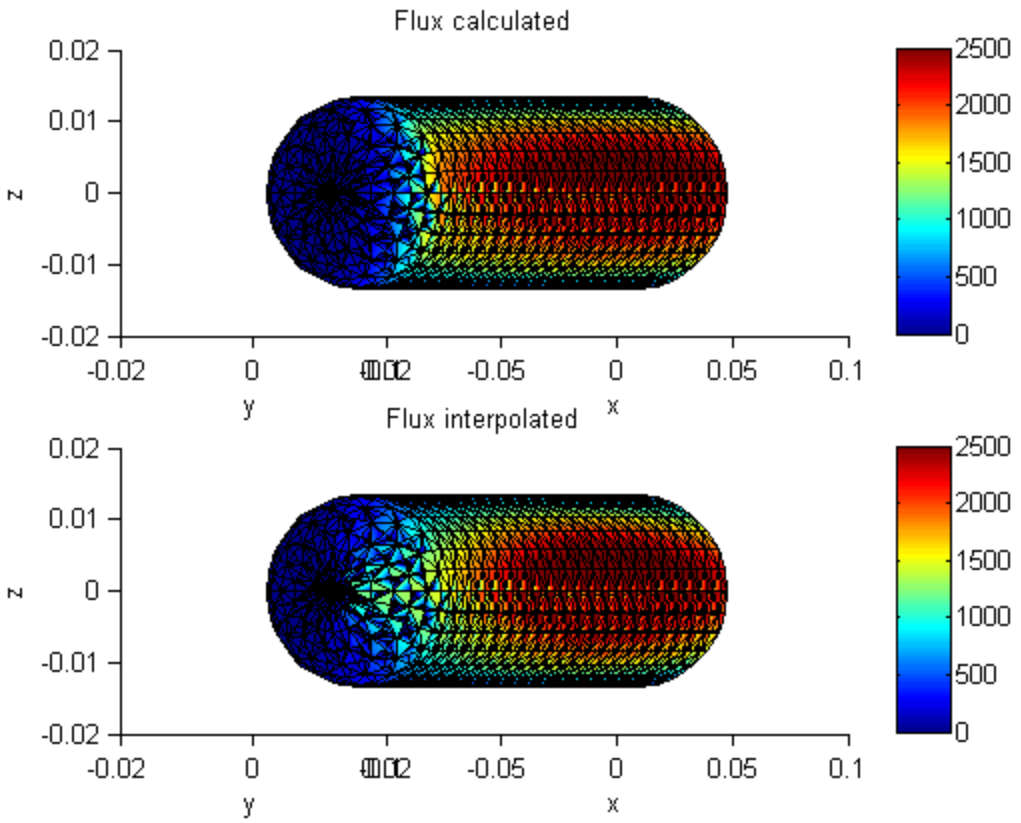


Figure II.25 : *Comparaison entre le flux calculé et le flux approximé (2)*

Les figures II.24 et II.25 montrent la comparaison entre le flux radiatif incident calculé et le flux approximé. L'erreur entre les deux flux est 0.503%. La différence principale se trouve sur la partie hémisphérique, le flux approximé est plus grand que le flux calculé.

II.6.3 Solution numérique et comparaison avec les mesures expérimentales pour température de la préforme

On implémente le flux approximé de la préforme dans le modèle Comsol pour modéliser la distribution de la température sur la préforme. La géométrie de la préforme dans le modèle est présenté dans la figure II.26.

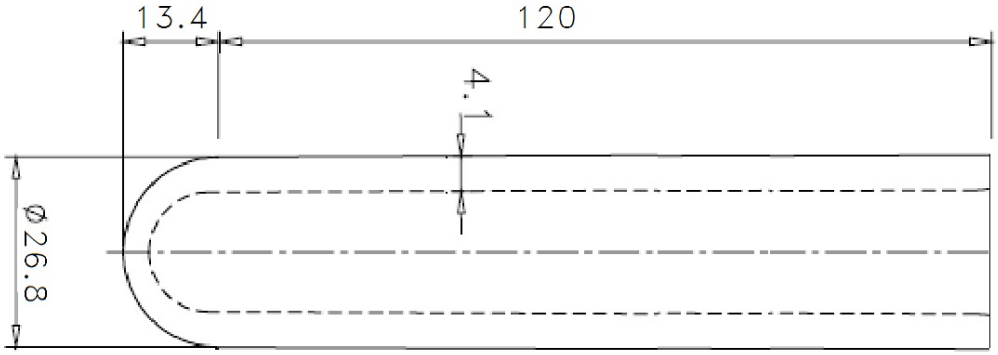


Figure II.26 : *Représentation géométrique du modèle de préforme*

Les paramètres identifiés à partir du cas de la plaque ont déjà été montrés dans le tableau II.1. La figure II.27 représente la température sur la surface extérieure de la préforme en régime stationnaire obtenue par la solution numérique (en haut) et expérimentalement (en bas).

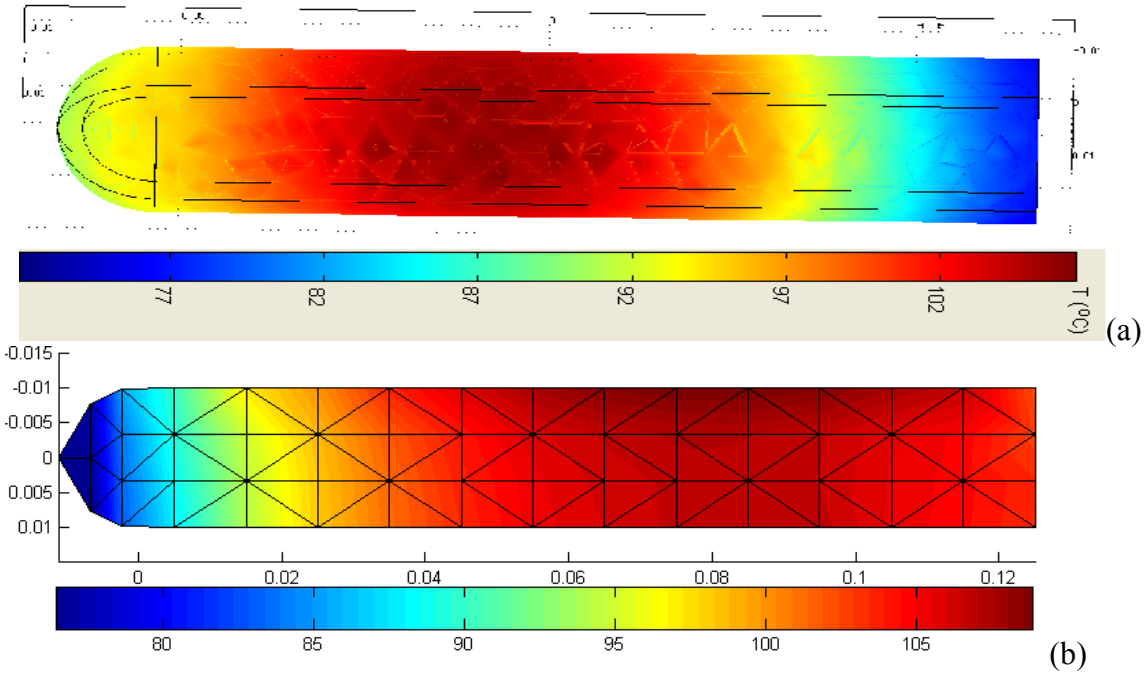


Figure II.27 : *(a) La température sur la surface extérieure de la préforme de la solution numérique en régime stationnaire ; (b) les résultats expérimentaux*

Nous avons déjà vus que la température mesurée est presque homogène sur la surface extérieure suivant chaque circonférence de la surface extérieure de la préforme en régime stationnaire. Suivant l'axe vertical, on trouve que la température au point central est plus élevée que celle au bord. Cependant, dans les résultats numériques, la température est plus importante dans la calotte : peut-être parce que le flux approximé est plus élevé dans cette zone ; certainement aussi à cause de la convection naturelle qui fait monter la chaleur et qui n'est pas modélisée dans le calcul Comsol. Dans les résultats expérimentaux, comme la préforme est fixée par un matériau métallique au niveau du col, un effet du bord perturbe le champ de température qui est, de ce fait, plus important au bout de la partie cylindrique.

II.7. Conclusion partielle

Dans ce chapitre, on a présenté des essais de chauffage IR sur des plaques et sur des préformes en PET (en rotation autour de son axe). La caméra IR nous permet de capturer le champ de température surfacique. On l'utilise pour obtenir l'évolution de la température sur la surface arrière de la plaque et sur la surface extérieure de la préforme. L'utilisation de cet équipement est sensible à l'émissivité mais la comparaison avec les thermocouples est satisfaisante.

La modélisation 1D est faite dans le cas de la plaque en PET pour identifier les propriétés thermiques.

On estime le rayonnement absorbée IR à partir d'une modélisation simple basée sur le principe de l'énergie spectrale. Le flux radiatif se propage de manière unidirectionnelle dans l'épaisseur de la préforme et est calculé par la loi de Beer Lambert.

Avec les paramètres identifiés, les simulations 3D pour le cas de la plaque et de la préforme sont réalisées par la méthode éléments finis dans le logiciel Comsol. On trouve une assez bonne concordance entre la solution numérique et les résultats expérimentaux dans la zone centrale de la préforme. En revanche, les champs de température dans la partie sphérique et au voisinage du col sont mal représentés.

A partir des propriétés thermiques identifiées et de la distribution de la température obtenue sur la préforme, on peut ensuite traiter le cas thermo-mécanique dans l'étape de soufflage.

Bibliographie

[SCH 96] F.M.Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, L. Desoutter. Viscoelastic simulation of PET stretch/blow molding process. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 64 (1), pp. 19-42, (1996).

[FIG 09] L. Figiel, C.P. Buckley. On the modeling of highly elastic flows of amorphous thermoplastic. International Journal of Non-linear Mechanics, 44, 389-395, (2009).

[CHU 89] Chung, K. Finite element simulation of pet stretch/blowmolding process. Journal of Materials Shaping Technology, 7 (4), pp. 229-239, (1989).

[SCH 98] F.M. Schmidt, J.F. Agassant, and M. Bellet, Experimental study and numerical simulation of the injection stretch/blow molding processPolym. Eng. Sci., 38(9), 1399 (1998).

[YAN 04a] Z.J. Yang, E. Harkin-Jones, G.H. Menary, and C.G. Armstrong, A non-isothermal finite element model for injection stretch-blow moulding of PET bottles with parametric studies, Polym. Eng. Sci., 44, 1379 (2004).

[YAN 04b] Z.J. Yang, E. Harkin-Jones, G.H. Menary, and C.G.Armstrong, Coupled temperature-displacement modelling of injection stretch-blow moulding of PET bottles using Backley model, Journal of Materical Processing Technology 153-154, 20-27, (2004).

[MEN 00] G. H. Menary, C. G. Armstrong, R. J. Crawford, and J. P. McEvoy, Modelling of poly(ethylene terephthalate) in injection stretch-blow moulding. Plastics, Rubber and Composites Processing and Applications, 29, 360-370, (2000).

[MON 01] S. Monteix, " Modélisation du chauffage convecto-radiatif de préformes en P.E.T. pour la réalisation de corps creux ". Thèse de Doctorat en Science et Génie des Matériaux. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2001).

[HUA 05] H.X. Huang, Y.H. Deng, Y.F. Huang, "Temperature profiles within reheated preform in stretch blow molding", ANTEC'05 (Boston, Massachusetts), May 2005.

[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, ENSMP, 2007.

[COS 11] B. Cosson, F. Schmidt , Y. Le Maoult, M. Bordival. Infrared heating stage simulation of semi-transparent media (PET) using ray tracing method. Int J Mater Form, 4; 1-10, 2011.

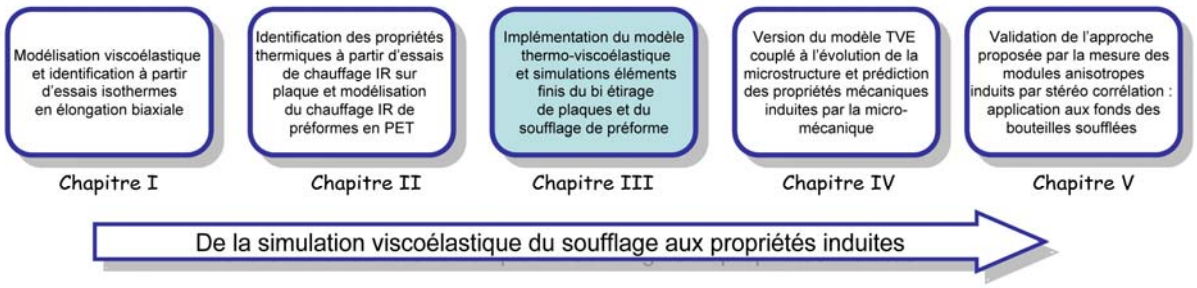
[SAC 73] Sacadura J. Initiation aux transferts thermiques. Lavoisier, France. (1973).

[BOR 09] M. Bordival, Modélisation et optimisation numérique de l'étape de chauffage infrarouge pour la fabrication de bouteilles en PET par injection-soufflage, Thèse de doctorat, 2009.

[CHU 75] S. W. Churchill, H. S. Chu, "Correlating Equations for Laminar and Turbulent Free Convection from a Vertical Plate", International Journal of Heat and Mass Transfer 18, p. 1323-1329. (1975).

[SIE 92] R.Siegel and J.R.Howell, Thermal Radiation Heat Transfer, 3rd Edition, Hemisphere Publishing Corporation, (1992).

Chapitre III
Implémentation numérique, recalage et premières simulations



III.1 Introduction

Dans le premier chapitre nous avons proposé un modèle visco-hyperélastique pour décrire le comportement du PET pendant le procédé. Les essais des sollicitations equi-biaxiales, nous ont permis d'étudier et d'identifier des paramètres du comportement mécanique. Ensuite, nous l'avons évoqué en chapitre II, l'identification des propriétés thermiques à partir de résultats expérimentaux du chauffage IR a été réalisée et la distribution de température de la préforme à la sortie du four IR est obtenue. L'objectif de ce chapitre est de présenter l'implémentation numérique pour simuler l'étape de soufflage (voir la figure au dessus). La partie thermique couplée au modèle visco-hyperélastique est utilisée pour effectuer la simulation qui permet, notamment, de quantifier l'auto-échauffement au cours des essais.

Dans un premier temps, nous discutons la formulation faible pour décrire le comportement thermique adapté au cas des contraintes planes. En effet, la température varie essentiellement dans l'épaisseur alors que la mécanique varie plutôt suivant les directions de la plaque.

Dans un second temps, nous abordons la modélisation du comportement visco-hyperélastique incompressible non linéaire dans un logiciel éléments finis développé avec Matlab. Dans le cas 2D contrainte plane, nous présentons une formulation de deux champs : la vitesse globale $\underline{V}$ et la partie élastique du tenseur de déformation de Cauchy gauche $\underline{\underline{B}}_e$. On développe les équations régissant le modèle utilisé ainsi que la formulation faible associée. Son implémentation numérique est validée au travers de comparaisons avec des solutions analytiques déterminées dans le chapitre I. Elle permet de valider l'approche en reproduisant les essais homogènes. Rappelons que l'identification est réalisée à partir d'une résolution semi-analytique et que cette confrontation apporte une confirmation que notre modélisation peut-être implanter dans un code éléments finis. En outre, les résultats numériques sont comparés aux résultats expérimentaux.

Ensuite, les équations thermiques et mécaniques sont résolues itérativement à chaque instant. A chaque itération, on résout une formulation de trois champs : $\underline{V}$, $\underline{\underline{B}}_e$ et la température T. Après la simulation, on trouve que les paramètres identifiés dans le modèle proposé doivent être ajustées parce que l'effet d'auto-échauffement n'est pas négligeable.

Une procédure d'optimisation qui permet de prendre en compte cet effet d'auto-échauffement est mise au point dans la quatrième partie de ce chapitre. Il s'agit de re-identifier les

caractéristiques du PET. Nous présentons une validation des résultats numériques par comparaison avec des mesures expérimentaux.

Le cinquième volet de ce chapitre est consacré au cas axisymétrique. On simule le comportement visco-hyperélastique et les phénomènes thermiques par la méthode éléments finis en problème axisymétrique. C'est l'ultime étape avant la simulation du soufflage d'une préforme axisymétrique.

Le modèle thermo visco-hyperélastique est étalonné d'abord à partir des résultats expérimentaux de traction equi-biaxiale. Les résultats obtenus numériquement correspondent qualitativement et quantitativement à ceux obtenus expérimentalement.

A la fin de ce chapitre, on présente la simulation de soufflage libre de préforme sous ABAQUS réalisé lors de mon stage dans l'équipe de Gary Menary à l'université de Belfast. Des soufflages de préformes sont réalisés expérimentalement dans cette équipe afin de comparer la prédiction de l'évolution de la forme et la répartition finale des épaisseurs avec celles mesurées pendant et après le soufflage.

III.2 Formulation du problème thermique en cas 2D contrainte plane

III.2.1 Formulation faible

La formulation faible associée au problème de conduction thermique qui est décrit dans le chapitre II est obtenue en multipliant l'équation de chaleur par une fonction test T^* suffisamment régulière puis en intégrant sur tout le domaine Ω et en introduisant la nature convective du flux imposé :

$$\begin{cases} \int_\Omega T^* \rho C_p \dot{T} d\Omega + k \int_\Omega \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla} T d\Omega = \int_\Omega T^* \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} \right) d\Omega - h \int_{\partial\Omega_q} T^* \left(T - T_\infty \right) dS \\ T = T_0 \qquad at \quad t = 0 \end{cases} \tag{III.1}$$

$\partial\Omega_q$ est l'union de la face supérieure et inférieure de l'échantillon. La température pendant le procédé est légèrement supérieure à la température Tg. Sous cette condition, la capacité de chaleur spécifique C_p peut être choisie comme une constante égale à 1750 J / kg.K à partir de l'évolution montrée dans la figure II.12. Puisque l'éprouvette est chauffée des deux côtés sur la surface supérieure et inférieure [MEN 12] (voir la figure I.8), le coefficient de transfert thermique h peut être choisi égal à h_f(7 W/m2.K).

On suppose qu'il n'y a pas d'échange de chaleur entre l'échantillon et les mors. Pour être compatible avec l'hypothèse contrainte plane, la température T est choisie en fonction du plan des coordonnées x, y et temps (T est représentatif de la valeur moyenne de la température à travers l'épaisseur e). Par conséquent, la formulation faible du problème thermique en cas 2D contrainte plane s'écrit sous l'équation suivante :

$$e\left(\rho C_p \int_{\partial\Omega} T^* \dot{T} dS + k \int_{\partial\Omega} \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla} T dS - \int_{\partial\Omega} T^* \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} \right) dS \right) = 2 \int_{\partial\Omega_q} T^* \left(-h \left(T - T_\infty \right) \right) dS \tag{III.2}$$

où e est l'épaisseur de l'échantillon. $\partial\Omega = \partial\Omega_q = S$ est la surface inférieure ou supérieur de l'échantillon. Comme nous supposons que l'échange thermique se produit uniquement sur la face supérieure et inférieure du spécimen du PET, le facteur de '2 'avant le terme de transfert de chaleur par convection représente l'échange de flux total de ces deux surfaces.

La dimension de l'échantillon PET pendant les essais d'élongation équi-biaxiale est de 76mm × 76mm × 1,5 mm. La longueur et la largeur sont grandes par rapport à l'épaisseur: e << L. Dans ce cas là, la plupart de l'échange de chaleur par convection se fait via les surfaces supérieure et inférieure. La puissance dissipée volumique est d'environ 10^6 Pa.s^{-1}(W/m^3) et elle est presque uniforme dans l'échantillon. On peut calculer le nombre de Brinkman B_r qui est égal à environ 10 :

$$B_r = \frac{\eta \overline{V}^2}{k\left(T_P - \overline{T}\right)} \frac{e^2}{L^2} \tag{III.3}$$

B_r = 10, c'est-à-dire que suivant l'épaisseur, la dissipation visqueuse est 10 fois plus grande que la conduction thermique. L'échange thermique est petit devant la dissipation mécanique à travers l'épaisseur. L'hypothèse qu'on a fait pour conduire l'équation III.2 est acceptable.

En outre, le processus d'étirage biaxial est considéré assez rapide par rapport au temps nécessaire pour propager la température à travers l'épaisseur. Le temps caractéristique de diffusion est $t_d = \rho C_p e^2 / k = 57s$, et le temps caractéristique de capacité est $t_c = \rho C_p e / h = 132s$. Or, le temps pour le processus est d'environ 2s et donc très faible par rapport aux deux précédents. Si l'on compare la valeur moyenne de la température à travers l'épaisseur dans le cas contrainte plane avec la T (x, y, z, t) dans le cas axi-symétrique, la différence entre la valeur moyenne de la température obtenue par l'équation III.8 et la température T calculé à partir du formulaire faible avec l'intégrale définie sur l'épaisseur est environ 0.55°C. Cette différence provoque un écart sur la viscosité qui est inférieure à 3%. Par conséquent, nous utilisons l'équation III.2 pour la partie thermique dans la simulation du comportement thermo-mécanique en cas 2D contrainte plane.

III.2.2 Discrétisation par éléments finis

En vue d'une résolution par la méthode des éléments finis, le domaine Ω est partitionné en éléments Ω^i, i = 1,…, N^e avec N^e le nombre d'éléments. Dans ce cas, une intégrale sur Ω peut être approximée par :

$$\int_\Omega f(x) d\Omega \cong \sum_{i=1}^{N^e} \int_{\Omega^i} f(x) d\Omega \tag{III.4}$$

De plus, l'utilisation de fonctions d'interpolation N_T et des valeurs de T aux nœuds des éléments $\widehat{T}$ permet d'approximer le champ de température T et la fonction test T^* par les relations matricielles :

$$T = \left[N_T\right]\left[\hat{T}\right] \text{ et } T^* = \left[N_T\right]\left[\hat{T}^*\right] \tag{III.5}$$

où N_T est la matrice des fonctions d'interpolation, $\widehat{T}$ le vecteur des valeurs nodales de T et $\hat{T}^*$ celui de T^*. Le gradient de ces quantités est interpolé par les dérivées des fonctions B_T :

$$\underline{\nabla} T = \left[B_T\right]\left[\hat{T}\right] \text{ et } \underline{\nabla} T^* = \left[B_T\right]\left[\hat{T}^*\right] \tag{III.6}$$

où B_T est la matrice des dérivées des fonctions d'interpolation. L'introduction de ces approximations dans l'équation III.2 conduit à :

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{N^e} \int_{\partial\Omega^i} \rho C_p \left[N_T\right]^T \left[N_T\right] dS \left[\dot{\hat{T}}\right] + \sum_{i=1}^{N^e} \int_{\partial\Omega^i} k \left[B_T\right]^T \left[B_T\right] dS \left[\hat{T}\right] + \frac{2}{e} \sum_{i=1}^{N^e} \int_{\partial\Omega_q^i} h \left[N_T\right]^T \left[N_T\right] dS \left[\hat{T}\right] \\ &= \sum_{i=1}^{N^e} \int_{\partial\Omega^i} \left[N_T\right]^T \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}\right) dS + \frac{2}{e} \sum_{i=1}^{N^e} \int_{\partial\Omega_q^i} h \left[N_T\right]^T T_\infty dS \end{aligned} \tag{III.7}$$

ou, sous une forme plus compacte :

$$[C]\left[\dot{\hat{T}}\right]+[K]\left[\hat{T}\right]=[F] \qquad \text{(III.8)}$$

avec :

$$[C]=\sum_{i=1}^{N^e}\int_{\partial\Omega^i}\rho C_p[N_T]^T[N_T]dS\left[\dot{\hat{T}}\right]$$

$$[K]=\sum_{i=1}^{N^e}\int_{\partial\Omega^i}k[B_T]^T[B_T]dS\left[\hat{T}\right]+\frac{2}{e}\sum_{i=1}^{N^e}\int_{\partial\Omega_q{}^i}h[N_T]^T[N_T]dS\left[\hat{T}\right]$$

$$[F]=\sum_{i=1}^{N^e}\int_{\partial\Omega^i}[N_T]^T\left(\underline{\underline{\sigma}}:\underline{\underline{D}}\right)dS+\frac{2}{e}\sum_{i=1}^{N^e}\int_{\partial\Omega_q{}^i}h[N_T]^T T_\infty dS$$

Pour résoudre l'équation III.8, il reste à traiter la discrétisation temporelle. On découpe l'intervalle des temps en pas de temps Δt. Puis, on approxime la dérivée temporelle par le schéma de différence finie suivant :

$$\dot{T}=\frac{T^{t+\Delta t}-T^t}{\Delta t} \qquad \text{(III.9)}$$

Afin de ne pas être soumis à la condition de stabilité, appelée condition de Courant-Friedrichs-Lewy [HUG 87, ZIE 00], on choisit d'utiliser le schéma implicite qui est inconditionnellement stable. Ce schéma nous permet de choisir le pas de temps Δt aussi grand que l'on souhaite.

$$\left([C]+\Delta t[K]\right)\left[\hat{T}^{t+\Delta t}\right]=\Delta t[F]+[C]\left[\hat{T}^t\right] \qquad \text{(III.10)}$$

III.3 Formulation du problème mécanique en cas 2D contrainte plane

III.3.1 Formulation faible

Nous avons présenté le modèle visco-hyperélastique dans le chapitre I. En résumé, le problème mécanique est gouverné par la forme forte suivante :

$$div\left(\underline{\underline{\sigma}}\right)=0\,,\ \underline{\underline{\sigma}}=2\eta_n\underline{\underline{D}}+\underline{\underline{\hat{\sigma}}}-p\underline{\underline{I}}-q\underline{\underline{I}}$$

$$\det\underline{\underline{B_e}}=1$$

$$div\left(\underline{V}\right)=0$$

$$\frac{\delta\underline{\underline{B_e}}}{\delta t}+\frac{G(\varepsilon_e)}{\eta\left(\varepsilon_v,\overline{\dot{\varepsilon}_v},T\right)}\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\hat{B}_e}}=0 \qquad \text{(III.11)}$$

Les caractéristiques identifiées du PET à partir de calculs isothermes sont présentées dans le tableau III.1.

Tableau III.1 Les caractéristiques identifiées du PET

$G(\varepsilon_e)$		G_0			Λ	
		8 MPa			0.1	
$\eta(\varepsilon_v, \overline{\dot{\varepsilon}_v}, T)$	$f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right)$	λ	a		m	
		9.91	2		0.2	
	$h\left(\overline{\varepsilon_v}\right)$	η_0	K	h_0	N	ε_{vlim_ref}
		8.4 MPa.s	3.2	-0.21	0.42	1.83
	$\eta_0(T)$, $\varepsilon_{vlim}(T)$	C_1	C_2	B_1	B_2	
		1.88	25.81°C	0.07	111.88°C	

Dans le cas d'un allongement équi-biaxial en contraintes planes, nous pouvons établir une relation entre les pressions p et q, la vitesse $\underline{V}$ et $\underline{\underline{B_e}}$:

$$\sigma_{33} = 0 \Rightarrow p + q = -2\eta_N \left(D_{11} + D_{22}\right) + \frac{G(\varepsilon_e)}{3}\left(\frac{2}{B_{e11}B_{e22} - B_{e12}^2} - B_{e11} - B_{e22}\right) \tag{III.12}$$

Le modèle visco-hyperélastique est mis en œuvre dans l'environnement Matlab en utilisant une approche par éléments finis. Une formulation variationnelle à deux champs ($\underline{V}$ et $\underline{\underline{B_e}}$) est proposée pour le problème incompressible en contrainte plane. La formulation faible du problème est obtenue en multipliant les équations de la formulation forte (équation III.11) par deux fonctions tests suffisamment régulières $\underline{V^*}$ et $\underline{\underline{B_e}}^*$ puis en intégrant sur tout le domaine Ω. Quelques manipulations classiques des équations III .11 et III.12 conduisent aux résidus suivants :

$$R_V = 2\eta_N \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{D}} d\Omega + G\int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{B_e}} d\Omega + 2\eta_N \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{I}}\left(D_{11} + D_{22}\right) d\Omega$$
$$- \frac{G}{3}\int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{I}} \frac{1}{B_{e11}B_{e22} - B_{e12}{}^2} d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} \underline{V}^* \, \underline{F^d} dS = 0;$$

$$R_{B_e} = \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} + \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta\left(\varepsilon_v, \dot{\varepsilon}_v, T\right)} \underline{\underline{B_e}} \, \underline{\underline{\hat{B}_e}}\right) d\Omega = 0 \tag{III.13}$$

où $\underline{F^d}$ désigne la force sur la frontière $\partial\Omega_F$ où les charges sont imposées.

Ce problème fortement non-linéaire (le tenseur $\underline{\underline{B_e}}$, le module de cisaillement G et la viscosité η tous les deux non-linéaires), est résolu en utilisant une procédure itérative classique: Newton-Raphson. Une linéarisation consistante est réalisée avec l'aide de l'opérateur de Gâteaux et la forme linéaire du problème l'incrémental ΔV et ΔB_e est écrit dans le système suivant :

$$\begin{bmatrix} \left[D_{\Delta V}\{R_V\}\right] & \left[D_{\Delta B_e}\{R_V\}\right] \\ \left[D_{\Delta V}\{R_{B_e}\}\right] & \left[D_{\Delta B_e}\{R_{B_e}\}\right] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [\Delta V] \\ [\Delta B_e] \end{Bmatrix} = -\begin{Bmatrix} [R_V] \\ [R_{B_e}] \end{Bmatrix} \tag{III.14}$$

où $D_{\Delta V}\{R_V\}$, $D_{\Delta B_e}\{R_V\}$, $D_{\Delta V}\{R_{B_e}\}$ et $D_{\Delta B_e}\{R_{B_e}\}$ sont des dérivés Gâteaux associées à des incréments :

$$D_{\Delta V}\{R_V\} = 2\eta_n \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{D(\Delta V)}} d\Omega + 2\eta_n \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \left(\left(\underline{\underline{D(\Delta V)}} : \underline{\underline{I}}\right)\underline{\underline{I}}\right) d\Omega$$

$$D_{\Delta B_e}\{R_V\} = \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \left(G(\varepsilon_e)\Delta \underline{\underline{B_e}}\right) d\Omega - \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \left(G(\varepsilon_e)\frac{1}{\Delta B_{e11}\Delta B_{e22} - \Delta B_{e12}{}^2}\underline{\underline{I}}\right) d\Omega$$

$$\int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \left(D_{\Delta B_e}\{G(\varepsilon_e)\}\underline{\underline{B_e}}\right) d\Omega - \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \left(\frac{1}{B_{e11}B_{e22} - B_{e12}{}^2} D_{\Delta B_e}\{G(\varepsilon_e)\}\underline{\underline{I}}\right) d\Omega$$

$$D_{\Delta V}\{R_{B_e}\} = 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\Omega(\Delta V)}}\right) d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{D(\Delta V)}}\right) d\Omega$$

$$
\begin{aligned}
D_{\Delta B_e}\left\{R_{B_e}\right\} = & \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \Delta \underline{\underline{\dot{B}_e}} d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\underline{\underline{\Omega}} \Delta \underline{\underline{B_e}}\right) d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\underline{\underline{D}} \Delta \underline{\underline{B_e}}\right) d\Omega \\
& + \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\frac{G(\varepsilon_e)}{\eta\left(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T\right)} \underline{\underline{B_e}} \Delta \underline{\underline{\hat{B}_e}} \right) d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(\frac{G(\varepsilon_e)}{\eta\left(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T\right)} \underline{\underline{\hat{B}_e}} \Delta \underline{\underline{B_e}} \right) d\Omega \\
& + \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \left(D_{\Delta B_e} \left\{ \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta\left(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T\right)} \right\} \underline{\underline{B_e}} \underline{\underline{\hat{B}_e}} \right) d\Omega
\end{aligned}
\qquad \text{(III.15)}
$$

III.3.2 Discrétisation par élément finis

La figure III.1 représente la géométrie de l'éprouvette PET pendant les essais de traction réalisés à Queen's University of Belfast [MEN 12]. Les conditions aux limites sur l'axe symétrique et les charges appliquées sur le bord sont illustrées dans la figure III.1. L'échantillon est soumis à une vitesse *V* suivant l'axe *X* et l'axe *Y*. Il représente le cas de la traction equi-biaxiale : $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Compte tenu des axes de symétrie, le cas d'élongation equi-biaxiale pourra être simulée à l'aide d'un quart de l'échantillon. Afin de comparer avec les résultats expérimentaux, la longueur et la largeur du domaine 2D simulée sont de 38 mm et l'épaisseur est de 1,5 mm, ce qui est représentatif de la taille de l'échantillon de PET (76 mm × 76 mm × 1,5 mm) des essais expérimentaux [MEN 10].

Comme montré dans la figure III.1, le domaine Ω est discrétisé par un ensemble d'éléments isoparamétriques rectangulaires à 8 nœuds. La simulation est réalisée pour différents taux d'allongement obtenus par la dérivée de λ par rapport au temps. Il permet de déterminer la vitesse de déformation par : $\dot{\varepsilon} = \dot{\lambda}/\lambda$. Cette vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ varie de $1s^{-1}$ à $32s^{-1}$.

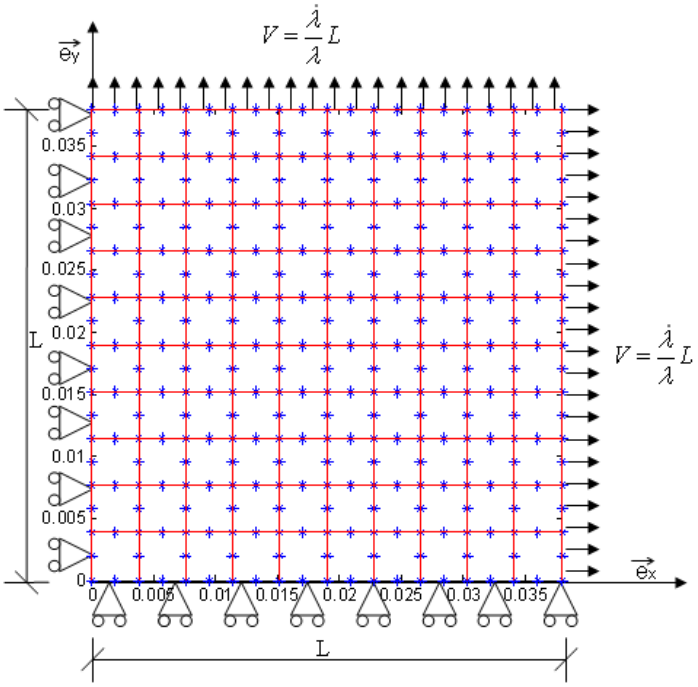


Figure III.1 : *Le domaine 2D rectangulaire avec des conditions aux limites*

Dans le cas du problème incompressible classique avec une formulation mixte (vitesse – pression), il est nécessaire de discrétiser à la fois l'espace des vitesses et des pressions. Afin de stabiliser le problème, une cohérence doit être vérifiée pour cette formulation mixte. La

discrétisation de ces champs ne peut pas être quelconque, sous peine d'obtenir des phénomènes d'oscillations notamment au niveau des pressions ou des phénomènes de blocage. Ainsi il est nécessaire d'avoir un nombre de points de Gauss de pression suffisamment important pour vérifier la condition d'incompressibilité presque partout et un nombre de points de Gauss de pression suffisamment faible pour avoir plus de degrés de liberté à calculer que de contraintes à vérifier. Une des conditions nécessaires pour obtenir des résultats satisfaisants est la vérification par l'élément fini considéré de la condition LBB (Ladyjenskaia - Brezzi -Babuska) [BRE 91, ZIE 00]. Cette condition garantit la stabilité du cas vitesse – pression avec une fonction d'interpolation quadratique pour le champ de la vitesse et linéaire pour la pression. Par analogie, dans ce travail, on choisit une interpolation quadratique pour la vitesse $\underline{V}$ et une interpolation linéaire pour $\underline{\underline{B_e}}$. On utilise des éléments rectangulaire, donc le champ de vitesse est obtenu à partir de 8 nœuds soient 16 degrés de liberté alors qu'on se limite à 4 nœuds soient 12 degrés pour le champ $\underline{\underline{B_e}}$.

$$V = [N_V][\hat{V}],\ B_e = [N_B][\hat{B}_e] \qquad \text{(III.16)}$$

où $[N_V]$ et $[N_B]$ désignent la matrice des fonctions d'interpolation quadratiques pour le champ de vitesse et celle de linéaires pour $\underline{\underline{B_e}}$, $[\hat{V}]$ et $[\hat{B}_e]$ les valeurs nodales de $\underline{V}$ et de $\underline{\underline{B_e}}$.

III.3.3 Implémentation numérique et validation

Le résultat du calcul par les éléments finis s'accorde parfaitement avec les résultats semi-analytiques développés dans le chapitre I (voir la figure III.2). Les figures III.3 et III.4 montrent une bonne représentation des résultats expérimentaux avec les propriétés identifiées (dans le tableau III.1). La différence entre la solution numérique et les données expérimentales pour chaque courbe ne dépasse pas 10%. Les champs restent homogènes durant la simulation des essais de traction, on ne peut donc pas tester l'influence du nombre d'éléments sur cet exemple.

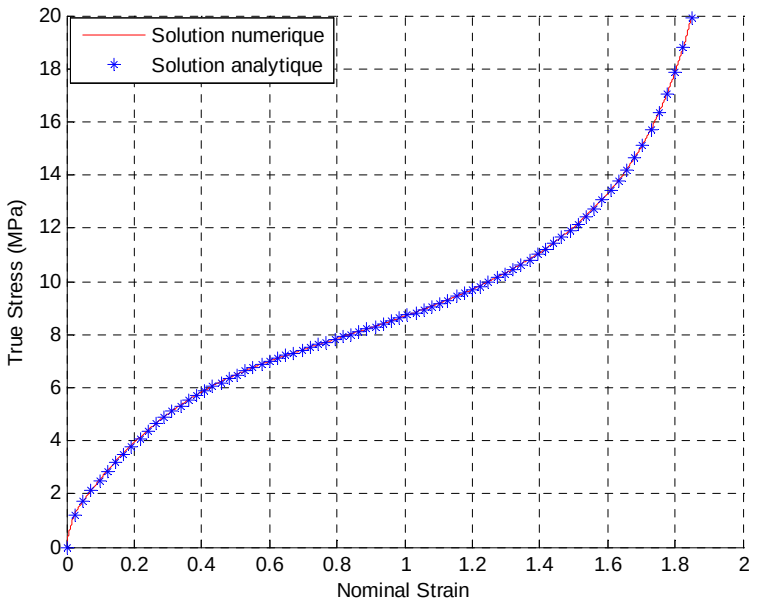


Figure III.2 : *Résultats numériques et semi-analytiques à 90°C pour la vitesse de déformation $8s^{-1}$*

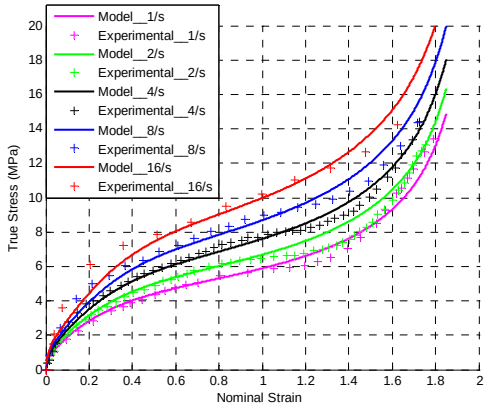


Figure III.3 : *Résultats numériques et expérimentaux à la température 90°C pour différentes vitesses de déformation*

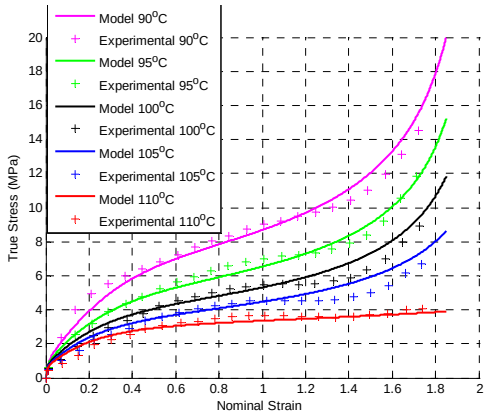


Figure III.4 : *Résultats numériques et expérimentaux à la vitesse de déformation $8s^{-1}$ pour différentes températures*

III.4 Formulation du problème thermo-mécanique en cas 2D contrainte plane

On présente dans cette partie un couplage faible entre la partie thermique et la partie mécanique. On résout itérativement le problème thermo-mécanique. Une formulation mixte de trois champs ($\underline{V}$, $\underline{\underline{B_e}}$ et T) est réalisée. Nous avons choisi l'interpolation linéaire (4 nœuds soient 4 degrés de liberté) pour le champ de température. Aux Equations III.13-III.15 qui résolvent seulement la partie mécanique on doit également ajouter l'équation de chaleur (équation III.2). Le résidu pour la partie thermique est écrit dans la forme suivante :

$$R_T = \rho C_p \int_{\partial\Omega} T^* \frac{\partial T}{\partial t} dS + k \int_{\partial\Omega} \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla} T dS - \int_{\partial\Omega} T^* \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}}\right) dS - \frac{2}{e} \int_{\partial\Omega_q} T^* \left(-h\left(T - T_\infty\right)\right) dS \qquad \text{(III.17)}$$

La linéarisation par la méthode Newton-Raphson conduit à la forme linéaire de ce problème, et qui peut être donnée dans le système suivant :

$$\begin{bmatrix} \left[D_{\Delta V}\{R_V\}\right] & \left[D_{\Delta B_e}\{R_V\}\right] & [0] \\ \left[D_{\Delta V}\{R_{B_e}\}\right] & \left[D_{\Delta B_e}\{R_{B_e}\}\right] & \left[D_{\Delta T}\{R_{B_e}\}\right] \\ \left[D_{\Delta V}\{R_T\}\right] & [0] & \left[D_{\Delta T}\{R_T\}\right] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [\Delta V] \\ [\Delta B_e] \\ [\Delta T] \end{Bmatrix} = -\begin{Bmatrix} [R_V] \\ [R_{B_e}] \\ [R_T] \end{Bmatrix} \qquad \text{(III.18)}$$

Les dérivés de Gâteaux ajoutées correspondant à des résidus peuvent s'écrire :

$$D_{\Delta T}\{R_{B_e}\} = \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : G(\varepsilon_e)\underline{\underline{B_e}}\hat{\underline{\underline{B}}}_e D_{\Delta T}\left\{\frac{1}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)}\right\} d\Omega$$

$$D_{\Delta V}\{R_T\} = -\int_\Omega T^*\left(\underline{\underline{\sigma}} : \Delta\underline{\underline{D}}\right) d\Omega$$

$$D_{\Delta T}\{R_T\} = \int_\Omega T^* \rho C_p \Delta\dot{T} d\Omega + k\int_\Omega \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla}(\Delta T)\, d\Omega \qquad \text{(III.19)}$$

La figure III.5 montre que les contraintes obtenues à partir de cette simulation thermo-mécanique sont inférieures aux données expérimentales. C'est assez prévisible puisque la température augmente pendant l'allongement, l'effet d'auto-échauffement affecte les propriétés mécaniques, en particulier diminue la viscosité. Par conséquent, les paramètres identifiés en supposant un essai isotherme doivent être ajustés en prendre en compte cet effet.

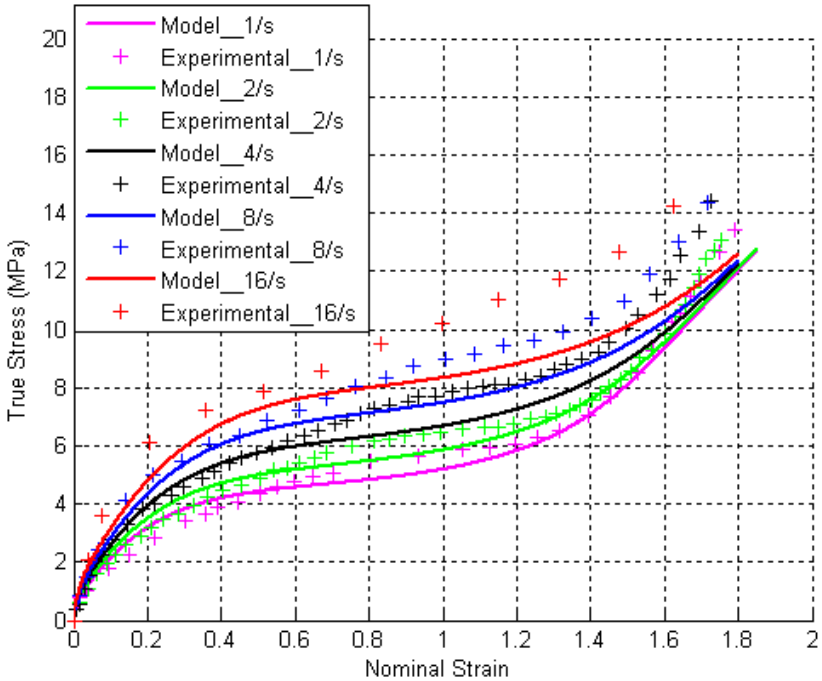


Figure III.5 : *Résultats numériques thermo-mécaniques et expérimentaux*

III.5 Optimisation des propriétés en prenant en compte l'effet d'auto-échauffement

III.5.1 Optimisation des propriétés

Comme l'effet d'auto-échauffement n'est pas négligeable et produit un effet important sur la partie visqueuse du modèle, la première estimation des paramètres obtenus à partir de notre identification isotherme (tableau III.1) doit être ajustée.

Les paramètres de la viscosité $\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)$ doivent être optimisés. L'objectif de l'optimisation est de minimiser la différence moyenne entre les résultats expérimentaux et ceux numériques. La fonction 'Fminunc' dans le Matlab 'Optimization Toolbox' est choisie pour la procédure d'optimisation. Les caractéristiques identifiées dans le cas isotherme sont récapitulées dans le tableau III.1 : elles sont choisies comme les valeurs initiales du processus d'optimisation. Enfin, les propriétés re-identifiées sont présentées dans le tableau III.2.

Tableau III.2. Les caractéristiques du PET ajustées

$G(\varepsilon_e)$		G_0			Λ	
		8 Mpa			0.1	
$\eta(\varepsilon_v, \overline{\dot{\varepsilon}_v}, T)$	$f(\overline{\dot{\varepsilon}_v})$	λ	A		m	
		10.51	2		0.23	
	$h(\overline{\varepsilon_v})$	η_0	K	h_0	N	ε_{vlim_ref}
		9 Mpa.s	3	-0.21	0.3	1.43
	$\eta_0(T)$, $\varepsilon_{vlim}(T)$	C_1	C_2	B_1	B_2	
		0.88	105.8°C	0.07	180.8°C	

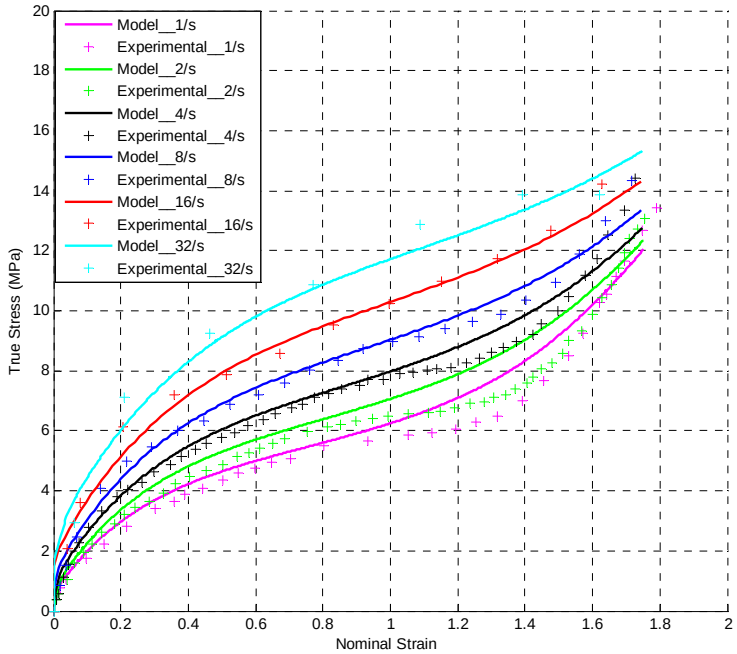
En comparant avec les valeurs dans le tableau III.1, on peut observer que seuls les paramètres dépendant de la température sont changés par cet ajustement. Les autres coefficients varient très peu : l'identification initiale est une bonne approximation mais a posteriori, il est nécessaire de réaliser un ajustement. L'identification directe du modèle thermo-viscoélastique n'est pas possible à cause des couplages complexes entre la thermique et la mécanique : on ne peut pas tirer d'expressions analytiques à exploiter.

III.5.2 Les résultats numériques du cas 2D contrainte plane

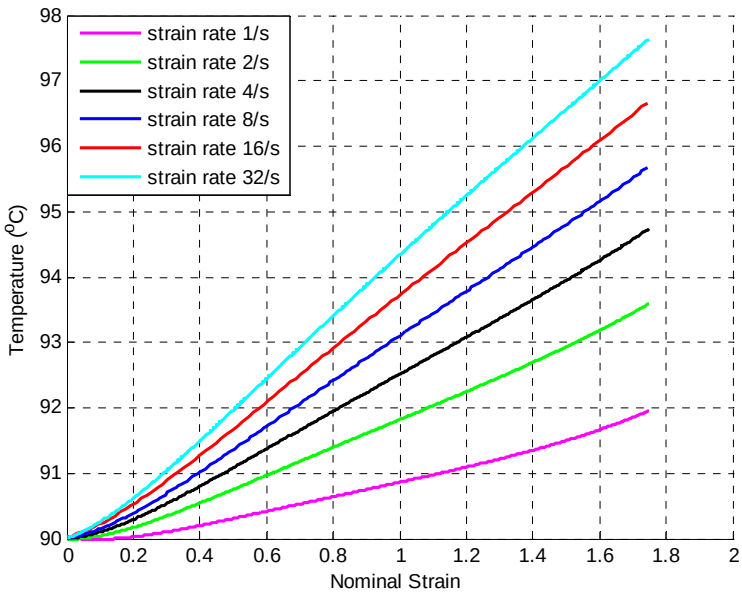
Avec ces paramètres re-identifiés à partir de l'optimisation, nous pouvons obtenir les courbes contrainte - déformation du modèle thermo-viscohypérelastique. La figure III.6a montre la comparaison entre les contraintes obtenues à partir de la simulation thermo-mécanique et des données expérimentales. La différence moyenne ne dépasse pas 10% pour chaque taux de déformation et chaque température (voir le tableau III.3).

Nous pouvons remarquer dans la figure III.6b que l'évolution croissante de la température en fonction de la déformation est presque linéaire. L'augmentation de la température est du même ordre de grandeur, mais peu inférieur à celui observé dans le test expérimental présenté dans [MEN 12]. En outre, l'auto-échauffement de l'échantillon augmente régulièrement pour des vitesses de déformation variant de $1s^{-1}$ à $32s^{-1}$. Il confirme que, à taux de déformation très élevée, le chauffage adiabatique à cause de la dissipation visqueuse peut générer une augmentation de la température importante.

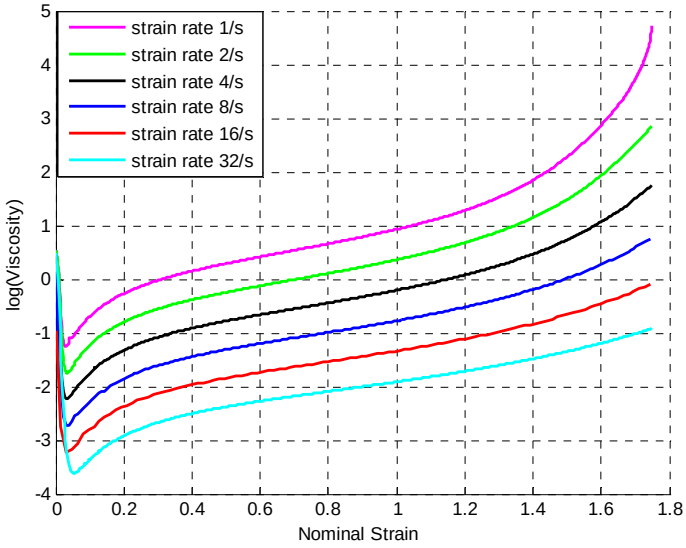
Nous pouvons voir dans la figure III.6c, l'effet de la température sur l'évolution de viscosité. Par exemple, la pente finale de la courbe de viscosité pour la vitesse de déformation 32 s^{-1} est beaucoup plus faible que celle pour des autres vitesses de déformation. Par conséquent, l'effet de durcissement n'est pas si considérable à 32 s^{-1}.


Model__1/s
Experimental__1/s
Model__2/s
Experimental__2/s
Model__4/s
Experimental__4/s
Model__8/s
Experimental__8/s
Model__16/s
Experimental__16/s
Model__32/s
Experimental__32/s
True Stress (MPa)
Nominal Strain
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2

(a)


strain rate 1/s
strain rate 2/s
strain rate 4/s
strain rate 8/s
strain rate 16/s
strain rate 32/s
Temperature (°C)
Nominal Strain
90
91
92
93
94
95
96
97
98
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2

(b)



(c)

Figure III.6 : *(a) Résultats thermo-mécaniques et expérimentaux ; (b) L'évolution de température pour différentes vitesses de déformation ; (c) La viscosité pour différentes vitesses de déformation sous l'effet de température*

Tableau III.3 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats numériques

Vitesse de déformation (/s)	**Erreur moyenne absolue (%)**
1	6.72
2	8.4
4	4.97
8	4.45
16	8.55
32	9.25

III.6 Formulation du problème axisymétrique

III.6.1 Formulation faible de la partie mécanique

Dans le cas axisymétrique, la formulation faible du problème est obtenue en multipliant les équations de la forme forte (équation III.11) par quatre fonctions tests suffisamment régulières $\underline{V}^*, p^*, q^*$ et $\underline{\underline{B_e}}^*$ puis en intégrant sur tout le domaine Ω. Les résidus peuvent s'écrire sous les formes suivantes :

$$R_1 = \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : G\underline{\underline{\hat{B}_e}} d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : 2\eta_n \underline{\underline{D}} d\Omega - \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{I}}(p_e + P) d\Omega - \int_{\partial\Omega_F} \underline{V}^* \underline{F}^d dS = 0 \qquad \text{(III.20a)}$$

$$R_2 = \int_\Omega p^* \underline{\underline{I}} : \underline{\underline{D}} d\Omega = 0 \qquad \text{(III.20b)}$$

$$R_3 = \int_\Omega q^* \left(\det\left(\underline{\underline{B_e}}\right) - 1\right) d\Omega = 0 \qquad \text{(III.20c)}$$

$$R_4 = \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \underline{\underline{\dot{B}_e}} d\Omega + 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\Omega}} d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{D}} d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{B_e}}^* : \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\varepsilon}_v, T)} \underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\hat{B}_e}} d\Omega = 0 \qquad \text{(III.20d)}$$

Le résidu R_i est non linéaire : une procédure itérative de type Newton-Raphson doit être utilisée. Pour cela, de la même manière que pour le cas 2D, une linéarisation consistante doit être réalisée avec l'aide de l'opérateur de Gâteaux (Annexe C).
Le problème à résoudre s'écrit sous la forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} [D_{\Delta V}\{R_1\}] & [D_{\Delta P}\{R_1\}] & [D_{\Delta p}\{R_1\}] & [D_{\Delta B_e}\{R_1\}] \\ [D_{\Delta V}\{R_2\}] & [0] & [0] & [0] \\ [D_{\Delta V}\{R_3\}] & [0] & [0] & [0] \\ [D_{\Delta V}\{R_4\}] & [0] & [0] & [D_{\Delta B_e}\{R_4\}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [\Delta V] \\ [\Delta P] \\ [\Delta p] \\ [\Delta B_e] \end{Bmatrix} = -\begin{Bmatrix} [R_1] \\ [R_2] \\ [R_3] \\ [R_4] \end{Bmatrix} \qquad \text{(III.22)}$$

On choisit d'utiliser aussi des éléments rectangulaires. Le champ de vitesse est obtenu à partir de 8 nœuds soient 16 degrés de liberté alors qu'on se limite à 4 nœuds pour les champs scalaires p et q. Concernant le champ $\underline{\underline{B_e}}$, on choisit une interpolation linéaire à 4 nœuds. Ainsi, le champ de vitesse $\underline{V}$ est interpolé par des fonctions quadratiques tandis que les pressions p, q et le champ $\underline{\underline{B_e}}$ sont interpolées par des fonctions linéaires.

III.6.2 Validation numérique

Afin de valider l'implémentation numérique, il convient de déterminer une solution analytique utilisant le modèle proposé. On propose ici de traiter les cas d'extension axiale et radiale d'un cylindre de section circulaire constitué d'un matériau visco-hyperélastique caractérisé par le modèle précédent. Dans la configuration déformée, la position d'un point matériel est caractérisée par ses coordonnées (r, θ, z) relatives à la base orthonormée cylindrique (e_r, e_θ, e_z). Dans la configuration de référence, le même point est défini par ses coordonnées (R, Θ, Z) de la base cylindrique orthonormée (E_r, E_θ, E_z).

III.6.2.a Extension axiale

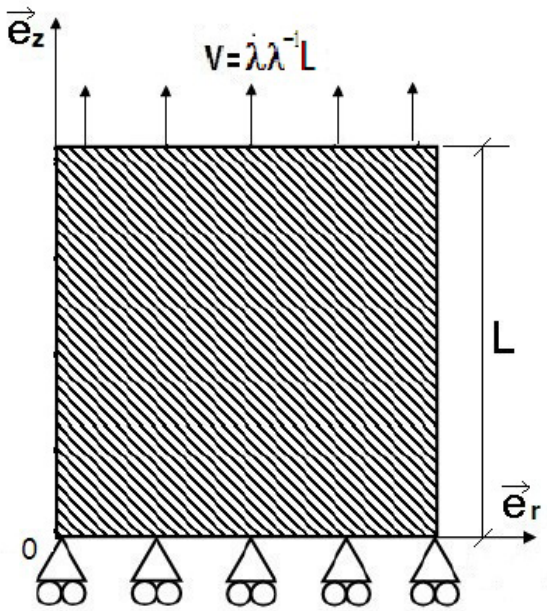


Figure III.7 : *Cylindre soumis à une vitesse de déplacement suivant l'axe* e_z

Le cylindre est soumis à un étirement dans le sens axial. Le problème est illustré en figure III.7. La déformation est définie par :

$$r = \lambda^{-\frac{1}{2}} R\,,\ \theta = \Theta \text{ et } z = \lambda Z \qquad \text{(III.23)}$$

où λ désigne l'étirage axial. Le tenseur des contraintes, le taux des déformations et le tenseur des déformations de Cauchy-Gauche s'écrivent :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} ;\ \underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} -\dot{\varepsilon}/2 & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon}/2 & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon} \end{bmatrix} ;\ \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} 1/\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1/\lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^2 \end{bmatrix} \qquad \text{(III.24)}$$

On retrouve les mêmes relations que dans le cas de l'élongation uniaxiale du chapitre I. Donc, l'équation de la contrainte est :

$$\sigma_{zz} = 3\eta_n \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} + G\left(\lambda_e^2 - \frac{1}{\lambda_e}\right) \qquad \text{(III.25)}$$

III.6.2.b Extension radiale

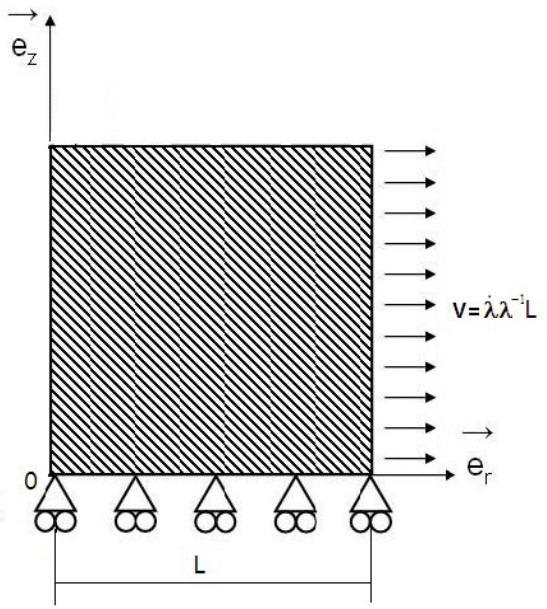


Figure III.8 : *Cylindre soumis à une vitesse de déplacement suivant l'axe e_r et e_θ*

Le cylindre est à présent soumis à un étirement dans la direction radiale. Le problème est illustré en figure III.8. La déformation est définie par :

$$r = \lambda R\,,\ \theta = \Theta \text{ et } z = \lambda^{-2} Z \qquad \text{(III.26)}$$

Le tenseur des contraintes, le taux des déformations et le tenseur des déformations de Cauchy-Gauche s'écrivent :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_{rr} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} ;\ \underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -2\dot{\varepsilon} \end{bmatrix} ;\ \underline{\underline{B}} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\lambda^4 \end{bmatrix} \qquad \text{(III.27)}$$

On peut remarquer qu'il s'agit du même cas d'élongation equi-biaxiale aussi traité lors dans le chapitre I. Aussi l'équation de la contrainte est :

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = 6\eta_n \frac{\dot{\lambda}}{\lambda} + G\left(\lambda_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^4}\right) \qquad \text{(III.28)}$$

Le cas d'extension radiale ($\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta}$) est identique du cas de la traction equi-biaxiale ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$).Afin de comparer avec les résultats expérimentaux, le rayon du cylindre est de 38 mm et l'épaisseur est de 0,75 mm (voir la figure III.9). Les dimensions sont représentatives de l'échantillon de PET (76 mm × 76 mm × 1,5 mm) des essais.

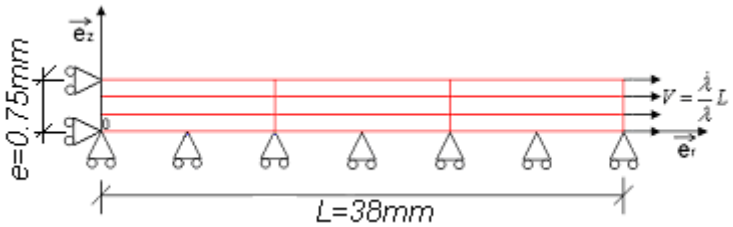


Figure III.9 : *Cylindre avec les conditions aux limites*

Comme on a choisit un schéma implicite pour le calcul, il n'est pas nécessaire de prendre de très petites valeurs pour l'incrément de temps *dt*. Le pas de temps *dt* retenu est égal à 10^{-4}s. L'utilisation de la formulation mixte à 4 champs ($\underline{V}$, p, q et $\underline{\underline{B}}_e$) dans le cas de la simulation numérique donne des temps de calcul importants. Ces simulations ont été réalisées sur un PC Pentium 4, 2.83 GHz en moins de 1 heure. Le résultat des éléments finis s'accorde parfaitement (erreur relative globale inférieure à 0,5%) avec les résultats semi-analytiques obtenus dans le chapitre I (voir la figure III.10).

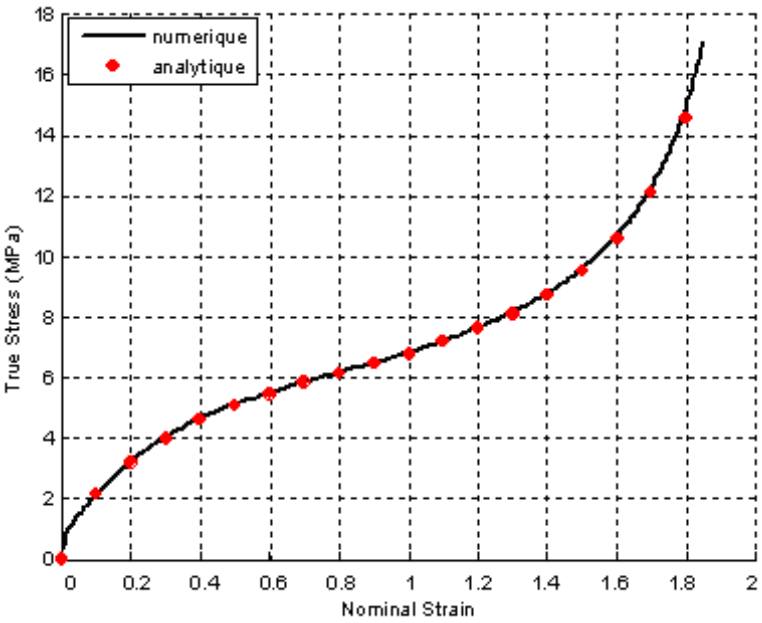


Figure III.10 : *Résultats numériques axisymétrique et semi-analytiques à 90°C pour la vitesse de déformation $8s^{-1}$*

III.6.3 Formulation du modèle thermo-mécanique

Le traitement alternatif des équations de la thermique et de la mécanique nécessite de trop petit pas de temps aussi, on propose de résoudre de manière couplée la partie thermique et la

partie mécanique. Le résidu pour la partie thermique dans le cas axisymétrique est écrit dans la forme suivante :

$$R_5 = \rho c \int_\Omega T^* \dot{T} d\Omega + k \int_\Omega \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla} T d\Omega - \int_\Omega T^* \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{D}} \right) d\Omega + h \int_{\partial\Omega_q} T^* \left(T - T_\infty \right) dS \qquad \text{(III.29)}$$

La linéarisation par la méthode Newton-Raphson conduit à la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} [D_{\Delta V}\{R_1\}] & [D_{\Delta p}\{R_1\}] & [D_{\Delta q}\{R_1\}] & [D_{\Delta B_e}\{R_1\}] & [0] \\ [D_{\Delta V}\{R_2\}] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [D_{\Delta V}\{R_3\}] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [D_{\Delta V}\{R_4\}] & [0] & [0] & [D_{\Delta B_e}\{R_4\}] & [D_{\Delta T}\{R_4\}] \\ [D_{\Delta V}\{R_5\}] & [0] & [0] & [0] & [D_{\Delta T}\{R_5\}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [\Delta V] \\ [\Delta p] \\ [\Delta q] \\ [\Delta B_e] \\ [\Delta T] \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} [R_1] \\ [R_2] \\ [R_3] \\ [R_4] \\ [R_5] \end{Bmatrix} \qquad \text{(III.30)}$$

Les dérivés de Gâteaux ajoutées à celles du problème mécanique seul correspondant au résidu R_5 peuvent s'écrire :

$$\begin{cases} D_{\Delta V}\{R_5\} = -\int_\Omega T^* \left(\underline{\underline{\sigma}} : \Delta \underline{\underline{D}} \right) d\Omega \\ D_{\Delta p}\{R_5\} = 0 \\ D_{\Delta q}\{R_5\} = 0 \\ D_{\Delta B_e}\{R_5\} = 0 \\ D_{\Delta T}\{R_5\} = \rho c \int_\Omega T^* \cdot \Delta \dot{T} d\Omega + k \int_\Omega \underline{\nabla} T^* \underline{\nabla} (\Delta T) d\Omega + h \int_{\partial\Omega_q} T^* (\Delta T) dS \end{cases} \qquad \text{(III.31)}$$

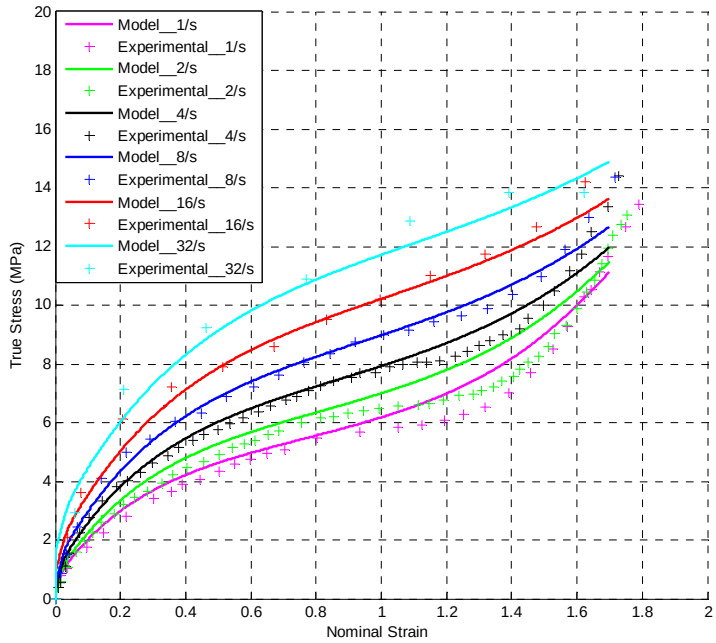
III.6.4 Les résultats numériques du cas axisymétrique

Avec les paramètres re-identifiés figurant dans le tableau III.2, nous pouvons simuler l'évolution de contrainte en fonction de la déformation à partir du modèle thermo-viscohypérelastique. La figure III.11a montre la comparaison entre les contraintes obtenues à partir de la simulation thermo-mécanique et des données expérimentales. Il n'y a plus, cette fois, de simplification sur le champ de température mais nous obtenons pratiquement les mêmes résultats que lors du cas 2D de contraintes planes.

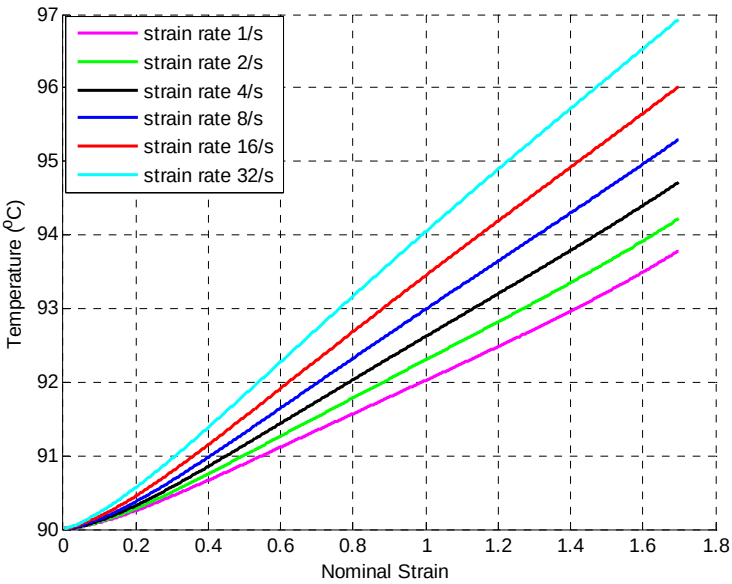
Nous pouvons remarquer dans la figure III.11b que l'évolution croissante de la température est presque identique à celle du cas 2D de contraintes planes. La petite différence entre les résultats s'explique par l'hypothèse qu'il n'y a pas d'échange de chaleur suivant l'épaisseur dans le cas 2D : la température T est choisie en fonction du plan des coordonnées x, y et du temps. Dans le cas axisymétrique, la température T est une fonction de (x, y, z, t). Néanmoins cette différence est minime et cette comparaison valide notre hypothèse sur l'approche thermique simplifiée proposée.

On trace aussi dans la figure III.11c, l'effet de la température sur l'évolution de viscosité.

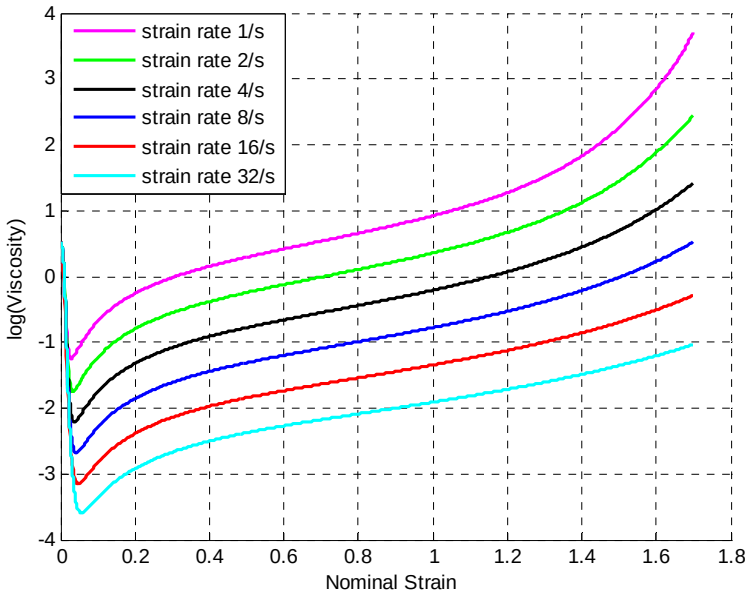
Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES


Model__1/s
Experimental__1/s
Model__2/s
Experimental__2/s
Model__4/s
Experimental__4/s
Model__8/s
Experimental__8/s
Model__16/s
Experimental__16/s
Model__32/s
Experimental__32/s
True Stress (MPa)
Nominal Strain
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8
2

(a)


strain rate 1/s
strain rate 2/s
strain rate 4/s
strain rate 8/s
strain rate 16/s
strain rate 32/s
Temperature (°C)
Nominal Strain
90
91
92
93
94
95
96
97
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8

(b)



(c)

Figure III.11 : *(a) Résultats thermo-mécaniques axisymétrique et expérimentaux ; (b) L'évolution de température pour différentes vitesses de déformation ; (c) La viscosité pour différentes vitesses de déformation sous l'effet de température*

Tableau III.4 Les erreurs entre les données expérimentales et les résultats numériques axisymétriques

Vitesse de déformation (/s)	**Erreur moyenne absolue (%)**
1	5.52
2	7.89
4	5.83
8	4.45
16	5.28
32	5.75

III.7 Simulation du soufflage de préforme

III.7.1 Implémentation du modèle visco-hyperelastique dans ABAQUS

Afin de pouvoir traiter des cas plus proches de la réalité industrielle et de bénéficier des possibilités de CAO et de maillage d'un logiciel de calcul, on implémente le modèle visco-hyperelastique dans le logiciel ABAQUS / Explicit *via* une user-interface VUMAT, par laquelle les utilisateurs peuvent définir leur propre modèle.

L'algorithme de ABAQUS / Explicit est basé sur le gradient de déformation $\underline{\underline{F}}$. Les utilisateurs peuvent utiliser ces paramètres comme les variables d'entrées pour calculer les autres champs : le champ de la contrainte de Cauchy. La figure III.12 montre les étapes du programme correspondant notre modèle et implémenté dans ABAQUS.

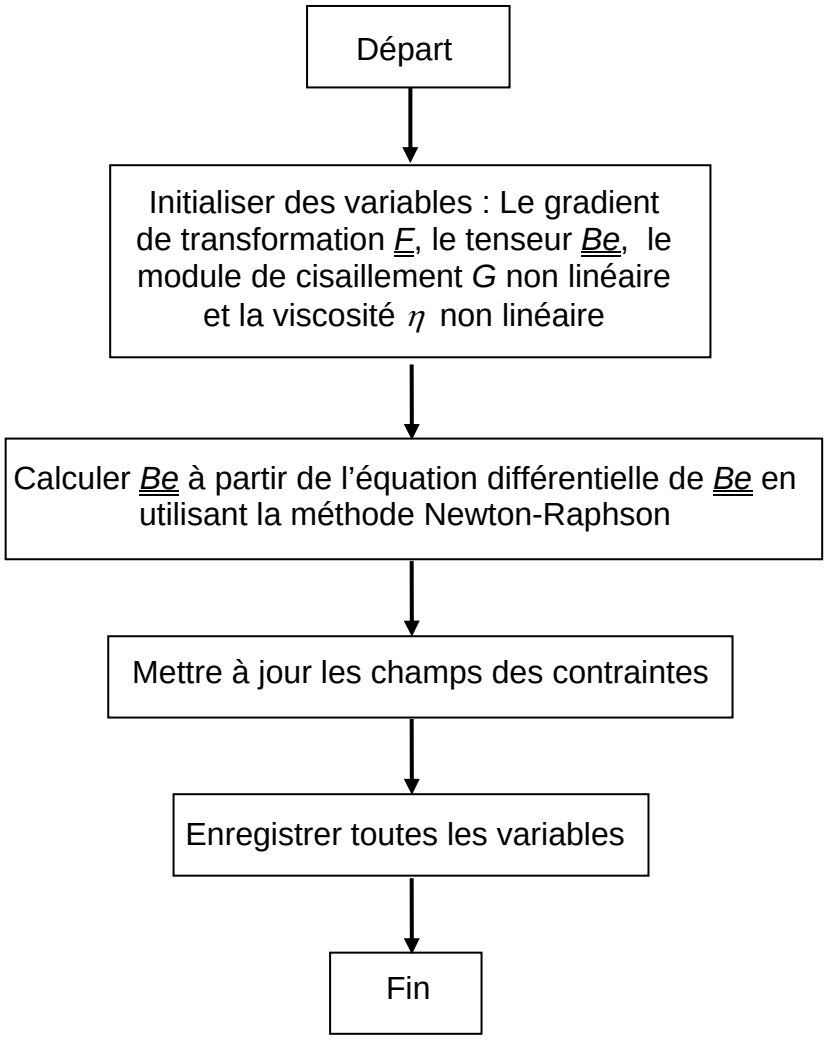


Figure III.12 : *L'algorithme pour implémenter le modèle viscohyperelastiaue dans ABAQUS*

Il est nécessaire d'écrire un sous-programme pour calculer le champ $\underline{\underline{B_e}}$ à partir de l'équation différentielle de $\underline{\underline{B_e}}$. On utilise le $\underline{\underline{B_e}}$ du temps précédent comme la valeur initiale dans la méthode Newton-Raphson pour calculer le nouveau $\underline{\underline{B_e}}$. La figure II.13 illustre les étapes nécessaires pour obtenir le champ $\underline{\underline{B_e}}$.

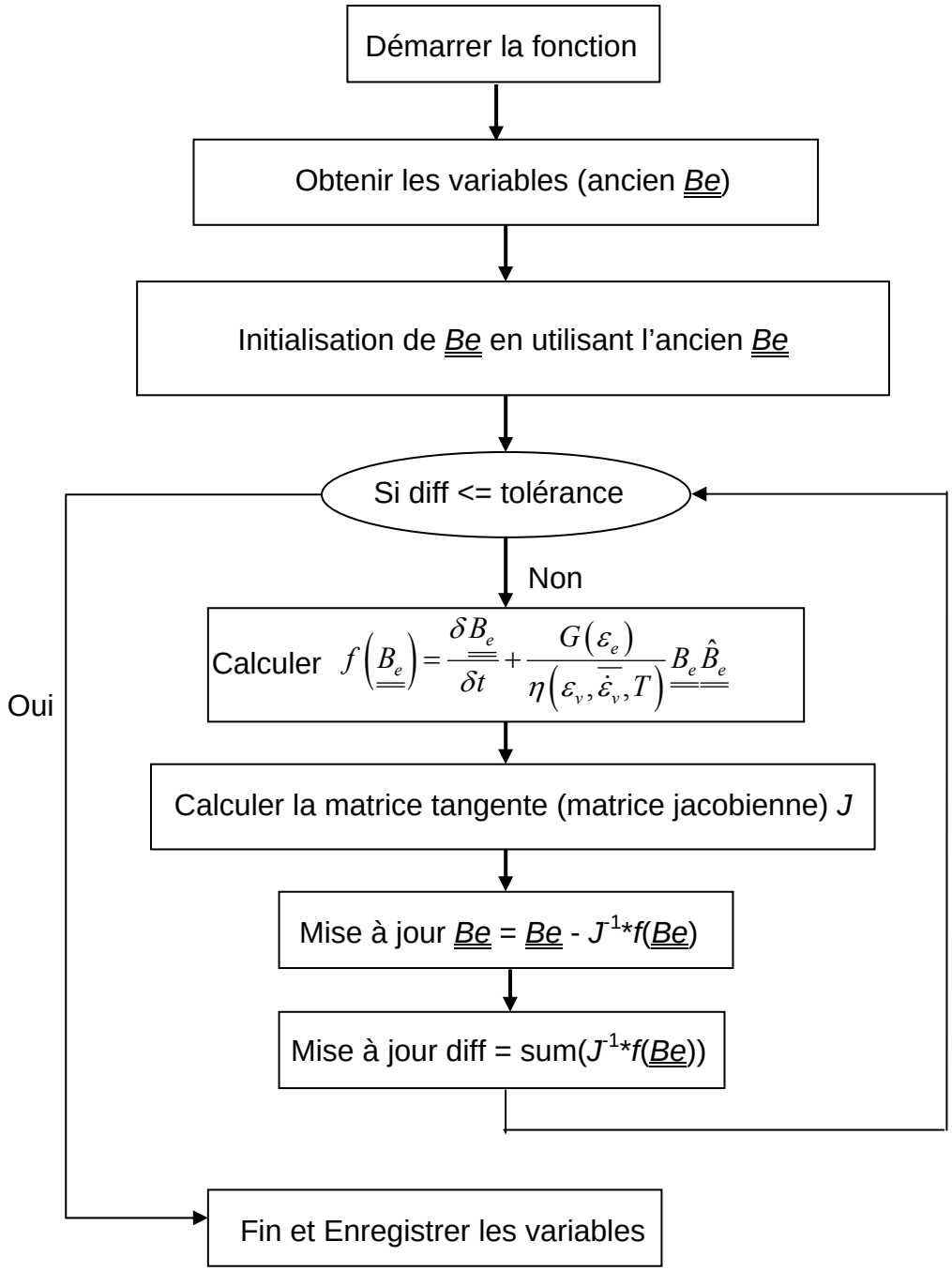


Figure III.13 : *Le sous-programme pour trouver les variables* $\underline{\underline{B_e}}$

III.7.2 Comparaison avec les résultats de la programmation réalisée dans Matlab

On simule avec ABAQUS le cas 2D d'élongation équi-biaxial (la figure III.1) pour comparer avec les résultats numériques obtenus par Matlab. On a choisit 100 éléments pour traiter ce problème. Le pas de temps *dt* dans la programmation dans Matlab est égal à10^{-4}s, alors que celui dans ABAQUS est de 10^{-6}s. Mais la programmation réalisée dans Matlab nécessite un temps CPU beaucoup plus important : 15 minutes contre 56 s pour le temps de calcul dans ABAQUS, soit 15 fois plus long. Néanmoins, les résultats d'ABAQUS s'accordent parfaitement (erreur relative globale inférieure à 0,01%) avec les résultats de la précédente programmation dans Matlab (voir la figure III.14). Cette comparaison valide la programmation du modèle dans ABAQUS.

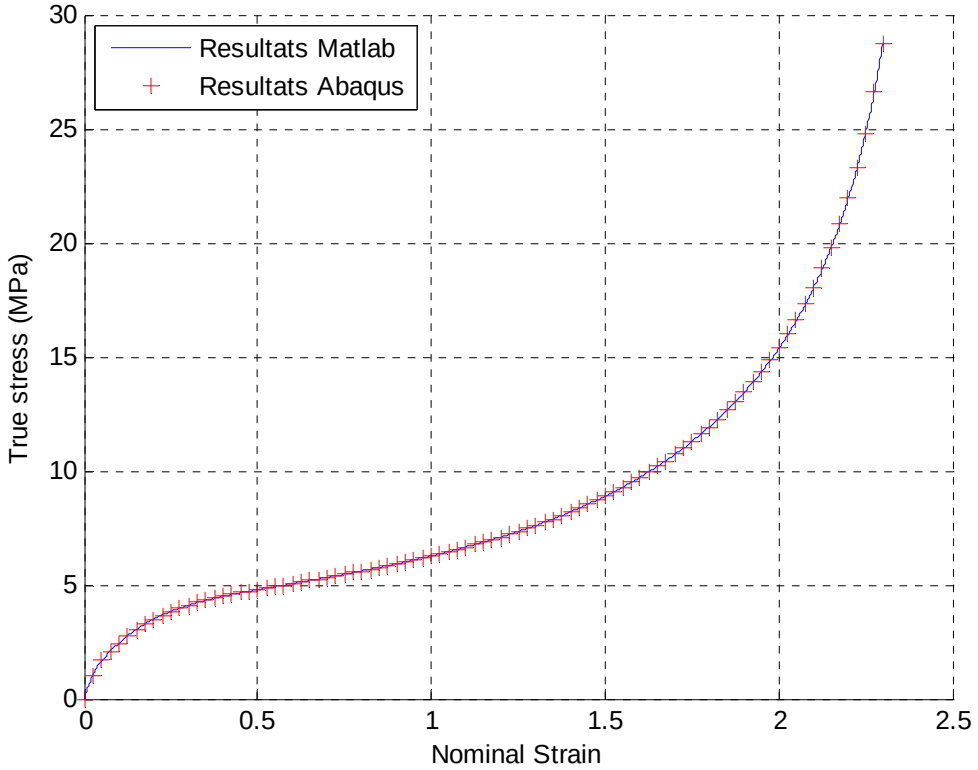


Figure III.14 : *La comparaison des résultats d' ABAQUS et les résultats dans Matlab*

III.7.3 Cas d'un cylindre mince soumis à une pression interne

Le problème du soufflage est plutôt un problème axisymétrique. De plus, grosse différence avec les cas déjà traités, les déformations proviennent d'application d'efforts et non de vitesses imposées. On considère d'abord le cas d'un cylindre creux soumis une pression interne. On choisit un cylindre mince avec une épaisseur *e* petite devant le rayon *R* (voir la figure III.15). Il est soumis à une pression interne *p*.

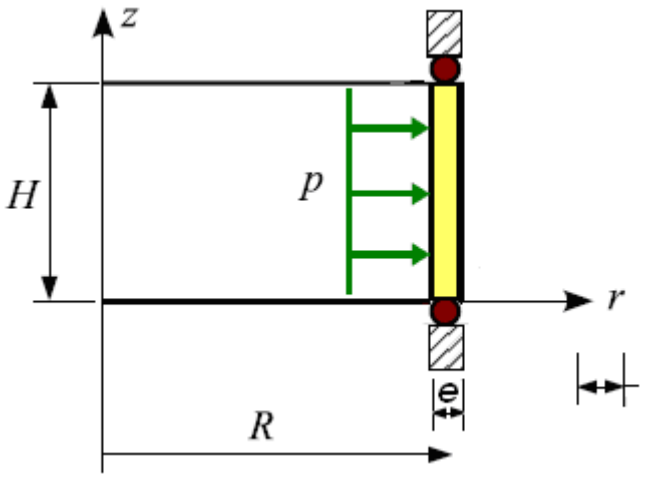


Figure III.15 : *Cylindre mince soumis une pression interne*

Ce cas est retenu afin de disposer d'une solution analytique de référence pour la validation de notre programmation dans ABAQUS.

III.7.3.a Solution analytique

Dans ce cas, le taux de déformation total $\underline{\underline{D}}$, le tenseur de déformation de Cauchy gauche $\underline{\underline{B}}$ et la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ sont de la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}, \ \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda^2} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } \underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} -\dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{III.32}$$

où λ désigne l'étirage et $\dot{\varepsilon}$ est égal à $\dot{\varepsilon} = \dot{R}/R$.

Il convient de noter que les tenseurs de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ ne sont pas nécessairement proportionnels aux tenseurs globaux $\underline{\underline{B}}$ et $\underline{\underline{D}}$. On peut écrire le tenseur de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ sous les formes suivantes :

$$\underline{\underline{B_e}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_e^2 \mu_e^2} & 0 & 0 \\ 0 & \mu_e^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_e^2 \end{pmatrix}, \ \underline{\underline{D_v}} = \begin{pmatrix} -\left(\dot{\alpha}_v + \dot{\beta}_v\right) & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\beta}_v & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\alpha}_v \end{pmatrix} \tag{III.33}$$

où λ_e et μ_e sont respectivement les allongements élastiques dans des directions $\underline{R}$ et $\underline{\theta}$.
L'élongation élastique et la vitesse de déformation visqueuse dans la direction $\underline{Z}$ sont obtenues par la condition incompressibilité.

A partir de l'équation différentielle de $\underline{\underline{B_e}}$, on peut obtenir :

$$2\lambda_e \dot{\lambda}_e + \frac{G}{\eta}\lambda_e^2 \left(\lambda_e^2 - \frac{\lambda_e^2 + \mu_e^2 + 1/\left(\mu_e^2 \lambda_e^2\right)}{3} \right) = 0 \ ; \tag{III.34a}$$

$$2\mu_e \dot{\mu}_e - 2\mu_e^2 \dot{\varepsilon} + \frac{G}{\eta}\mu_e^2 \left(\mu_e^2 - \frac{\lambda_e^2 + \mu_e^2 + 1/\left(\mu_e^2 \lambda_e^2\right)}{3} \right) = 0 \tag{III.34b}$$

Dans le cas d'un cylindre mince (l'épaisseur est au moins 10 fois plus petite que le rayon), on a :

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{pR}{e} \tag{III.35}$$

D'après l'équation I.22 pour la contrainte avec $\sigma_{rr} = 0$, on obtient :

$$\begin{cases} \sigma_{\theta\theta} = G\left(\mu_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^2 \mu_e^2} \right) \\ \sigma_{zz} = G\left(\lambda_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^2 \mu_e^2} \right) \end{cases} \tag{III.36}$$

En couplant équation III.35 et III.36, on a donc :

$$\frac{pR}{e} = G\left(\mu_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^2 \mu_e^2}\right) \qquad \text{(III.37)}$$

En l'absence de solution analytique simple, on utilise la méthode d'Euler implicite pour calculer numériquement la valeur de λ_e, μ_e et R :

$$2\frac{\lambda_e^{t+dt} - \lambda_e^{t}}{dt} + \frac{G}{\eta}\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2\left(\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 - \frac{trace(Be)}{3}\right) = 0 \ ; \qquad \text{(III.38a)}$$

$$2\frac{\mu_e^{t+dt} - \mu_e^{t}}{dt} - 2\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2 \frac{R^{t+dt} - R^{t}}{dt \cdot R^{t+dt}} + \frac{G}{\eta}\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2\left(\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2 - \frac{trace(Be)}{3}\right) = 0 \ ; \qquad \text{(III.38b)}$$

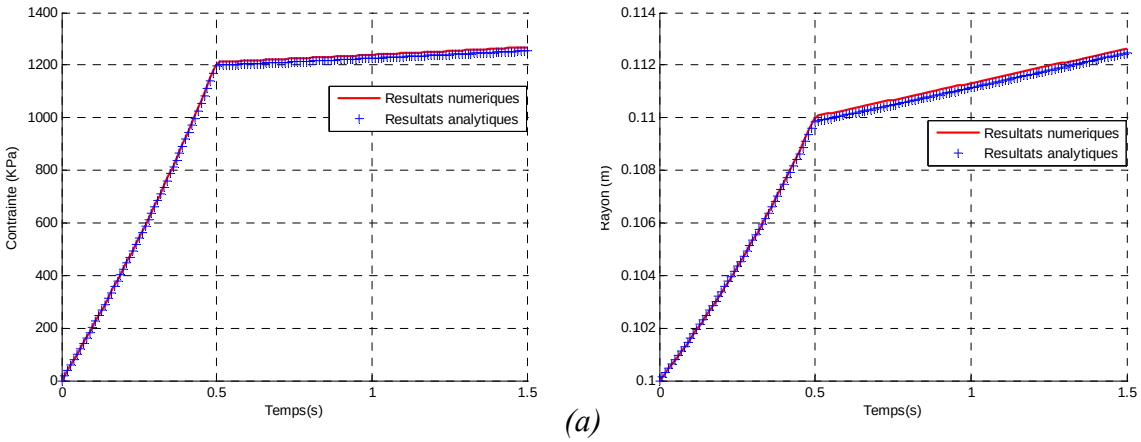
$$\frac{pR^{t+dt}}{e^{t+dt}} = G\left(\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2 - \frac{1}{\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2}\right) \qquad \text{(III.38c)}$$

où $e^t \cdot R^t = e^{t+dt} \cdot R^{t+dt}$ et $trace(Be) = \left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 + \left(\mu_e^{t+dt}\right)^2 + \frac{1}{\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2\left(\mu_e^{t+dt}\right)^2}$.

Une fois connue l'évolution de λ_e, μ_e et R, celle de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ est donnée par l'équation III.36.

III.7.3.b Validation de la programmation dans le cas où G et η sont des constantes

On traite ce cas comme un problème axisymétrique. On maille le cylindre par 50 éléments coques dans l'environnement ABAQUS. Les figures III.16(a) et III.16(b) illustrent l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ et du rayon dans le cas d'un cylindre mince soumis à une pression interne p. La pression augmente linéairement à 100 KPa de 0s à 0.5s, et puis elle est égal à100 KPa jusqu'à 1.5s. Dans le cas où l'épaisseur e est égale à 10^{-2}m, le rayon R est égal à10^{-1}m, le module de cisaillement G est égal à 3,29 MPa et la viscosité η est égale à 16,5 MPa.s, on obtient que les résultats analytiques sont bien concordant (erreur relative sur la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ inférieure à 0,35%) avec les résultats obtenus par ABAQUS.



(a) *(b)*

Figure III.16 : *Comparaison l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ (a) et du rayon (b) à partir des solutions analytiques et numériques du cas cylindrique*

III.7.4 Cas d'une sphère mince sous la pression

Quelque fois, la correspondance peut être bonne pour le cylindre (pas de courbure) mais poser problème lorsque des courbures apparaissent ; on passe donc au cas d'une sphère mince qui possède une épaisseur *e* très petite devant son rayon *R* (voir la figure III.17). Elle est soumise à une pression intérieure *p*. Compte tenu de la géométrie symétrique, le calcul peut être réalisé sur un quart de sphère.

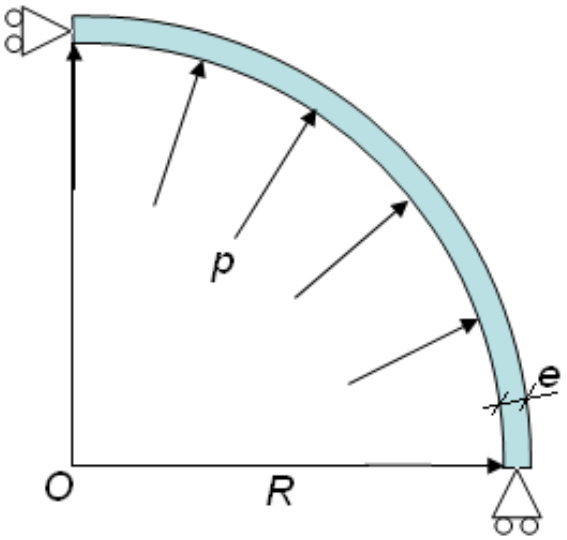


Figure III.17 : *Sphère mince soumis une pression interne*

III.7.4.a Solution analytique

On utilise le même principe du cas cylindrique : dans ce cas là, le taux de déformation total $\underline{\underline{D}}$, le tenseur de déformation de Cauchy gauche $\underline{\underline{B}}$ et la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ sont de la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\varphi\varphi} \end{pmatrix}, \ \underline{\underline{B}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda^4} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^2 \end{pmatrix} \text{ et } \underline{\underline{D}} = \begin{pmatrix} -2\dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon} \end{pmatrix} \qquad \text{(III.39)}$$

où λ désigne l'étirage et $\dot{\varepsilon}$ est égal à $\dot{\varepsilon} = \dot{R}/R$.

On peut écrire le tenseur de $\underline{\underline{B_e}}$ et $\underline{\underline{D_v}}$ sous les mêmes formes de l'équation III.33. A partir de l'équation III.33. et de l'équation différentielle de $\underline{\underline{B_e}}$, on peut obtenir :

$$2\lambda_e\dot{\lambda}_e - 2\lambda_e^2\dot{\varepsilon} + \frac{G}{\eta}\lambda_e^2\left(\lambda_e^2 - \frac{\lambda_e^2 + \mu_e^2 + 1/\left(\mu_e^2\lambda_e^2\right)}{3}\right) = 0 \ ; \qquad \text{(III.40a)}$$

$$2\mu_e\dot{\mu}_e - 2\mu_e^2\dot{\varepsilon} + \frac{G}{\eta}\mu_e^2\left(\mu_e^2 - \frac{\lambda_e^2 + \mu_e^2 + 1/\left(\mu_e^2\lambda_e^2\right)}{3}\right) = 0 \qquad \text{(III.40b)}$$

Dans ce cas de sphère soumise à une pression intérieure, on a :

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{\theta\theta} \qquad \text{(III.41)}$$

Cette condition conduit à $\lambda_e = \mu_e$, donc il ne reste qu'une inconnue dans le système d'équations (équation III.40).

Dans le cas d'une sphère mince sous la pression interne, on a :

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{pR}{2e} \tag{III.42}$$

A partir de notre modèle, on peut d'écrire la contrainte dans ce cas là :

$$\sigma_{\theta\theta} = G\left(\lambda_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^4}\right) \tag{III.43}$$

On a donc :

$$\frac{pR}{2e} = G\left(\lambda_e^2 - \frac{1}{\lambda_e^4}\right) \tag{III.44}$$

On utilise aussi la méthode d'Euler implicite pour calculer numériquement la valeur de λ_e et R :

$$2\frac{\lambda_e^{t+dt} - \lambda_e^{t}}{dt} - 2\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 \frac{R^{t+dt} - R^t}{dt \cdot R^{t+dt}} + \frac{G}{\eta}\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 \left(\frac{\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 - \left(\lambda_e^{t+dt}\right)^{-4}}{3}\right) = 0 \ ; \tag{III.45a}$$

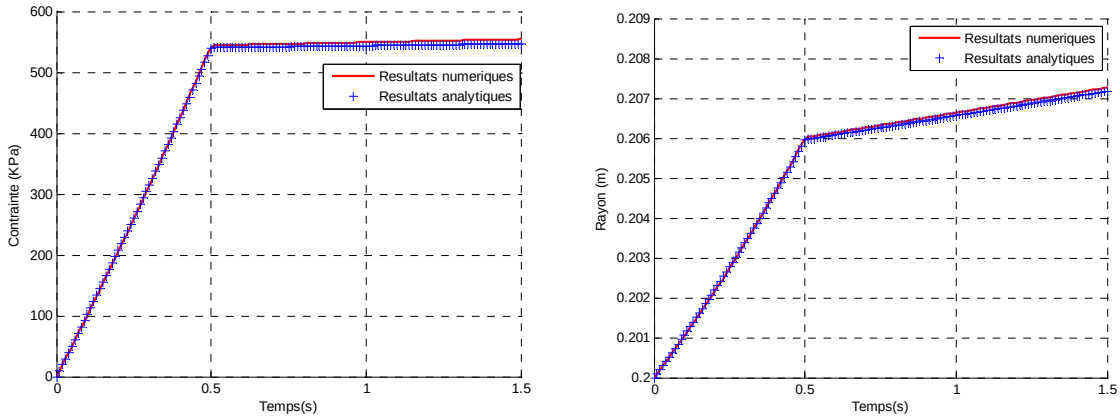
$$\frac{pR^{t+dt}}{2e^{t+dt}} = G\left(\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^2 - \frac{1}{\left(\lambda_e^{t+dt}\right)^4}\right) \tag{III.45b}$$

où $e^t \cdot R^t = e^{t+dt} \cdot R^{t+dt}$

Une fois connue l'évolution de λ_e , μ_e et R , celle de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ est donnée par l'équation III.43.

III.7.4.b Validation avec des propriétés constantes

On modélise une demie sphère par un quart de cercle discrétisé en 50 éléments coques axisymétriques. Les figures III.18(a) et III.18(b) présentent l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ et du rayon dans le cas d'une sphère mince soumise une pression interne *p*. La pression augmente linéairement à 100 KPa de 0s à 0.5s, et puis elle est égal à100 KPa jusqu'à 1.5s. Dans le cas où l'épaisseur *e* est égal à 20^{-2}m, le rayon *R* est égal à 20^{-1}m, le module de cisaillement *G* est égal à 3,29 MPa et la viscosité η est égal à 16,5 MPa.s, on obtient que les résultats analytiques sont bien concordant (erreur relative sur la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ inférieure à 0,25%) avec les résultats obtenus par ABAQUS.



(a) *(b)*

Figure III.18 : *Comparaison de l'évolution de la contrainte $\sigma_{\theta\theta}$ (a) et du rayon (b) à partir des solutions analytiques et numériques pour le cas de la sphère*

III.7.5 Simulation du soufflage libre

Dans cette section, on implémente le modèle visco-hyperélastique pour la simulation du soufflage libre de préforme et du soufflage avec canne d'étirage. On utilise des éléments coques axisymétriques de type Kirchhoff Love pour la simulation du procédé d'étirage soufflage. En parallèle, des soufflages de préformes sont réalisés expérimentalement.

III.7.5.a La partie expérimentale

L'équipe de Gary Menary de Queens'University of Belfast (QUB) travaille sur l'acquisition des données à partir du procédé d'étirage soufflage. La figure III.19 illustre l'équipement de soufflage.

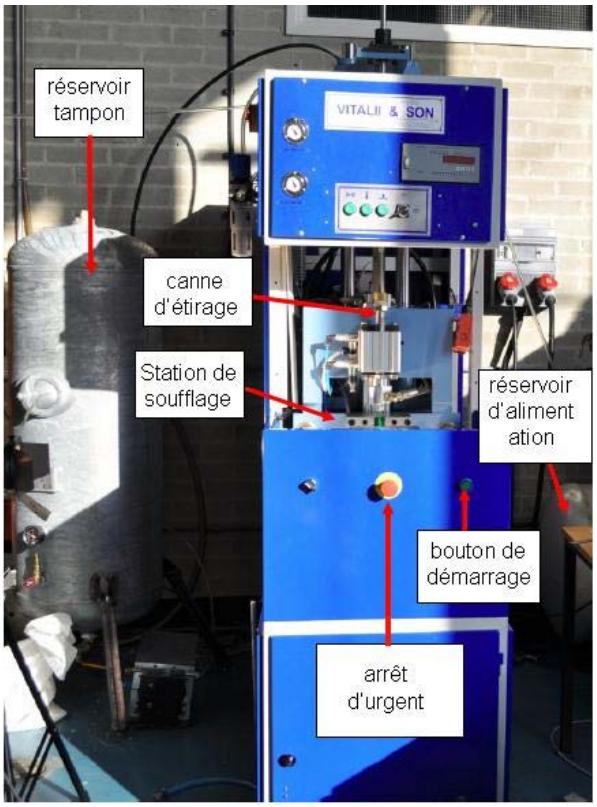


Figure III.19 : *Vue ensemble de la station de soufflage*

Un schéma simplifié du système pneumatique étirage soufflage est représenté dans la figure III.20. La machine est équipée d'un gros réservoir tampon qui stocke l'air à une pression manométrique maximum à 35 bar. Deux lignes pour les étapes pré-soufflage ('preblow') et de soufflage final ('final blow') sont reliées à ce réservoir. Pour l'étape de pré-soufflage, la pression est régulée à une pression de l'ordre de 6 à 10 bar en utilisant un régulateur de pression. Les deux lignes, pré-soufflage et soufflage final, se réunissent dans un bloc de soupapes d'arrêt ('shut off valve'), dont la fonction est d'ouvrir ou fermer la ligne de pré-soufflage suivie de la conduite de soufflage finale requis. La fonction de 'flow limiter valve' est de limiter le débit massique de l'air passant à travers la ligne, ce qui donne un meilleur contrôle sur le processus de soufflage.

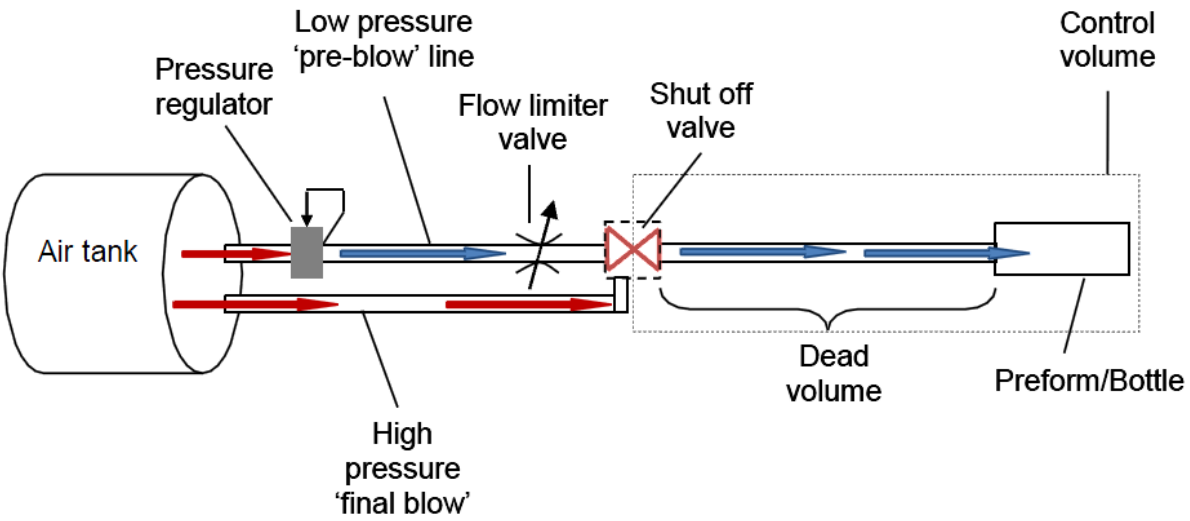


Figure III.20 : *Schéma de principe d'une machine du procédé [NAG 12]*

Plutôt que d'appliquer une pression sur le modèle, l'équipe de QUB impose le débit d'air qui vient remplir le volume interne de la préforme. C'est la loi des gaz parfait qui permet de déterminer la pression comme conditions aux limites dans la simulation du soufflage. Cette approche est assez classique (déjà utilisée dans [CHE 06]) car l'évolution de la pression dépend de la réaction du matériau et même mesurée lors d'un essai de soufflage ne peut être imposée telle quelle pour la simulation.

La figure III.21 illustre cette impossibilité : les résultats de la simulation du soufflage libre avec l'utilisation d'une pression mesurée en fonction du temps et ceux d'une simulation faite à partir du flux de masse soufflé sont comparés avec un soufflage réel. La simulation avec le débit d'air massique donné reproduit mieux le processus réel de soufflage. De plus, en utilisant l'entrée de débit d'air massique, il a également été constaté que le déplacement nodal et la force d'étirement dans la simulation de soufflage libre correspondent bien aux données expérimentales. En outre, la perte de contact entre la préforme et la canne d'étirage a été détecté par la simulation et effectivement observée dans l'expérience. Ce décollement ne peut pas être prédit par la méthode de l'entrée de pression directe.

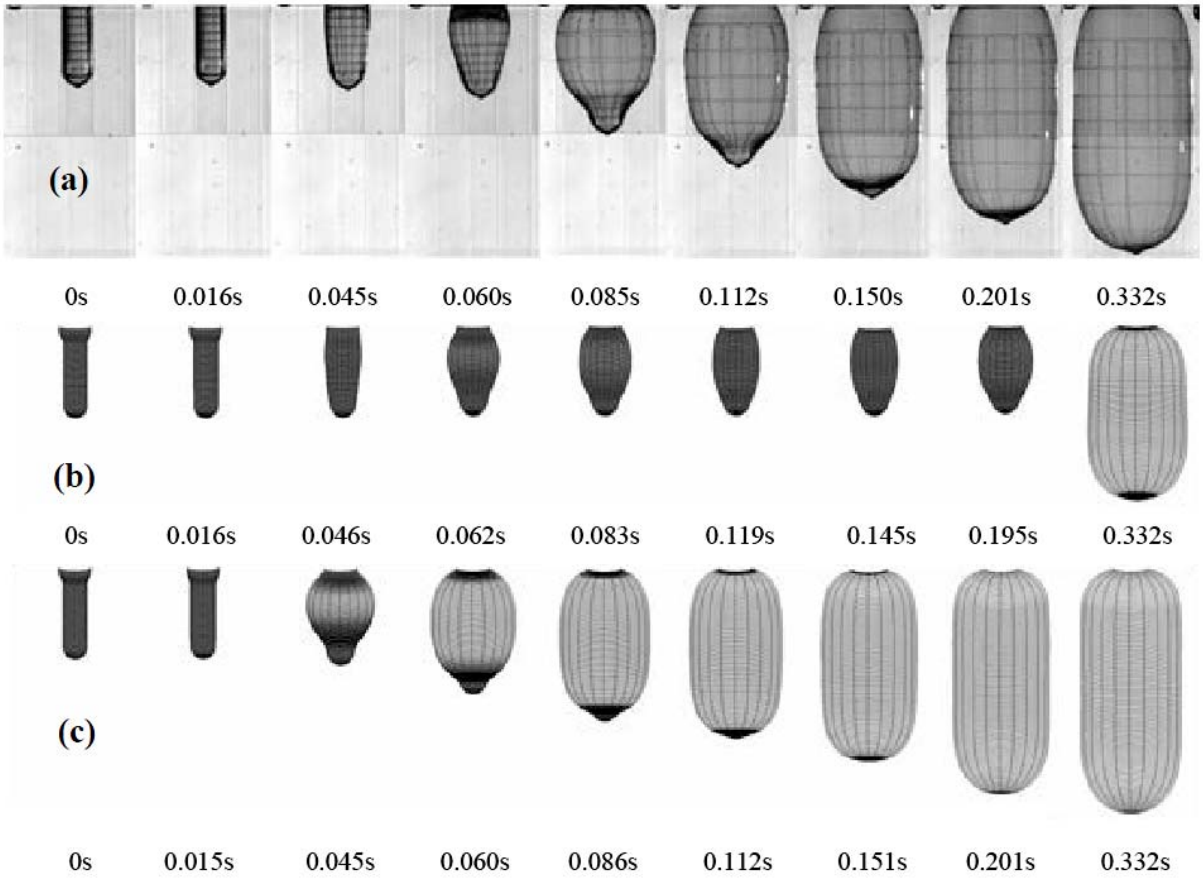


Figure III.21 : *L'évolution de la forme de préforme dans le procédé de soufflage libre : (a) Essais expérimentaux ; (b) Entrée de la pression ; (c) Entrée de débit d'air [TAN 08]*

Certains travaux de recherche [TAN 08, SAL 09, NAG 12] ont été menés sur la caractérisation du débit d'air massique et la construction un modèle de flux de masse qui pourrait être utilisé dans la simulation pour illustrer le processus.

La figure III.22 montre l'évolution de débit d'air massique en fonction du facteur de pression. Le débit à travers une petite section transversale, comme le 'flow limiter valve', est maximum lorsque la pression de sortie (P_{out}) est inférieure ou égal à 0,528 fois la pression d'entrée (P_{in}). L'écoulement dans cette région est appelée un écoulement sonique (choked flow), comme l'air se déplace à une vitesse égale à la vitesse du son et ne peut pas dépasser cette limite. D'autre part, lorsque la pression P_{out} augmente au-dessus de 0.528 fois de la pression P_{in}, le débit d'air est réduit. Finalement, il n'y a pas de flux qui se produit lorsque la pression P_{out} correspond à la pression P_{in} comme le montre la figure III.22. L'écoulement dans cette région est appelée flux débloqué (unchoked flow).

Un modèle de flux de masse qui contient les informations de débit d'air massique de ces deux régions peut être représenté par les équations suivantes [SAL 09] :
Pour la région 'unchoked'

$$\dot{m} = \frac{C_D A_T P_0}{\sqrt{RT_0}} \left(\frac{P_i}{P_0}\right)^{1/\gamma} \left\{ \frac{2\gamma}{\gamma - 1} \left[1 - \left(\frac{P_i}{P_0}\right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right] \right\}^{1/2} \qquad \text{(III.46a)}$$

Pour la région 'choked'

$$\dot{m} = \frac{C_D A_T P_0}{\sqrt{RT_0}} (\gamma)^{1/2} \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{(\gamma+1)/2(\gamma-1)} \quad \text{(III.46b)}$$

où C_D est le coefficient de décharge, A_T la section transversale de la buse (m^2), R la constante des gaz parfaits (J / kgK), γ le facteur de chaleur spécifique, P_0 la pression d'air dans la conduite d'alimentation (MPa), P_i la pression d'air dans le récipient (P_{out}) (MPa).

Dans l'équation III.46a et III.46b, le coefficient de décharge C_D et la section transversale de 'flow limiter valve' A_T ne sont pas connus. Cependant, pour un récipient de volume fixe connu en charge (sous pression), on peut déterminer le débit d'air massique dans la région 'choked flow' par l'équation III.46c et puis en égalisant les équations III.46c et III.46b, le produit de C_D et A_T peuvent être obtenues. En substituant ce produit dans l'équation III.46a, on trouve le débit d'air massique dans la région débloque 'unchoked flow'. Équation III.46c est basée sur la loi des gaz parfaits.

$$\dot{m} = \frac{dP}{dt} \frac{V}{RT} \quad \text{(III.46c)}$$

où dP/dt est le gradient de la courbe de pression en fonction du temps à l'intérieur du récipient (Pa/s), V le volume du récipient (m^3), R la constante de gaz spécifique (kJ/kgK), T la température absolue de l'air (K).

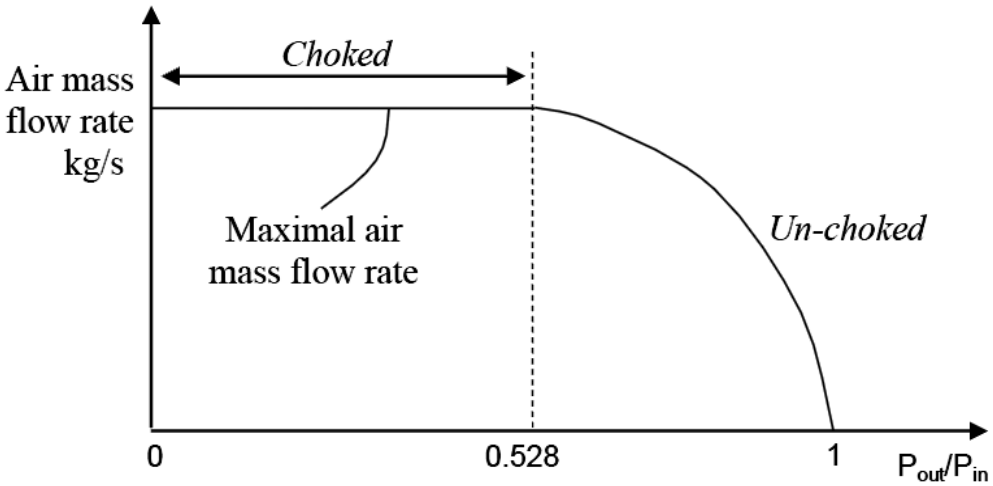


Figure III.22 : *Débit d'air en fonction du facteur de pression [SAL 09]*

III.7.5.b Maillage de la préforme

On maille la géométrie de la préforme et la canne d'étirage longitudinal par des éléments coques dans l'environnement ABAQUS. La figure III.23 présente 57 éléments coques sur la canne et 81 éléments sur la préforme. La géométrie de révolution de la préforme et de la canne a été exploitée pour réduire le temps de simulation par l'utilisation d'un modèle axisymétrique. Le modèle de débit d'air massique qui représente l'air qui s'injecte dans la préforme/bouteille est incorporé par échange de fluide entre composants (interaction fluide structure implantée dans ABAQUS).

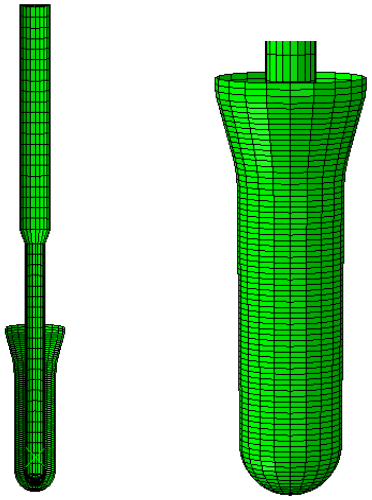


Figure III.23 : *Maillage de la préforme et de la canne*

III.7.5.c Résultats numériques

Le temps CPU (Pentium 4 2.66 GHz) pour la simulation du soufflage libre et de l'étirage soufflage est environ de 6 heures. La figure III.24 montre les résultats de simulation de soufflage libre (III.24a) et d'étirage soufflage (III.24b). On peut constater que les éléments dans la zone centre de la bouteille ne sont pas autant étirés suivant la direction longitudinale que peut l'être la vraie préforme soufflée.

La comparaison de cette forme finale par rapport à celle représentée Fig.III.21a n'est pas satisfaisante. On suppose que ce résultat provient du modèle de viscosité isotrope. En effet, une fois que les éléments sont bien étirés suivant la direction confidentielle, le comportement du PET atteint l'état de durcissement qui empêche la dilatation dans le sens longitudinal.

Ce problème est à rapprocher de celui de la piètre corrélation du modèle avec les essais biaxiaux séquentiels.

Pour résoudre ce problème, il est nécessaire de prolonger ce travail afin de prendre en compte une viscosité anisotrope, comportement plus réaliste du PET.

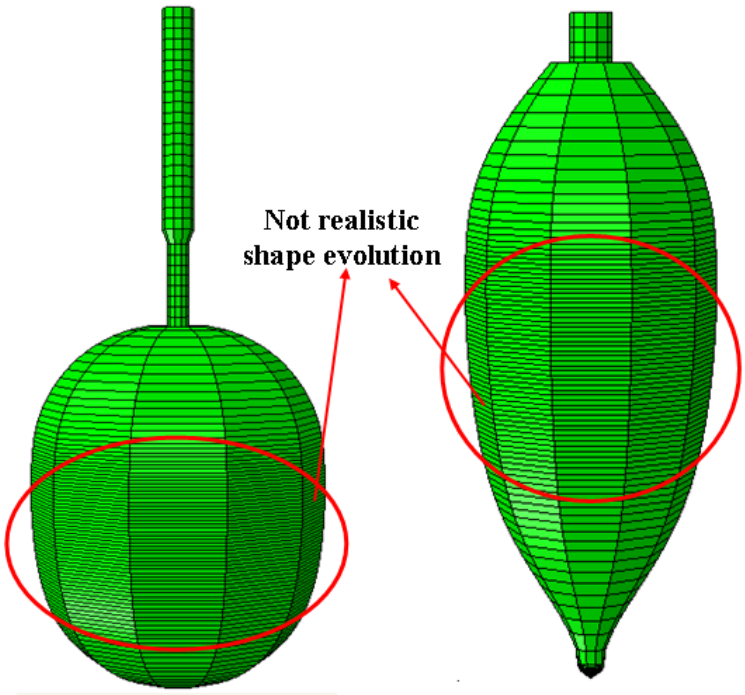


Figure III.24 : *Les résultats de simulation (a) soufflage libre ; (b) d'étirage soufflage*

III.8 Conclusion partielle

Nous avons simulé le phénomène de conduction thermique et reproduit le comportement visco-hyperélastique du PET en 2D contrainte plane et en axisymétrique par la méthode des éléments finis suivant une progression :

- *La formulation faible et implantation numérique*

Nous avons présenté la formulation faible et l'implantation numérique en 2D contraintes planes et en axisymétrique. Les résultats numériques sont comparés avec les résultats expérimentaux.

- *Le modèle thermo-mécanique*

Le couplage problème thermo-mécanique a été résolu pour la simulation et a nécessité une re-identification des paramètres du modèle pour rendre compte des effets d'auto-échaffements.

- *La simulation du soufflage de bouteille*

Nous avons implémenté le modèle visco-hyperélastique dans ABAQUS pour réaliser la simulation du procédé de soufflage. Les résultats des simulations montrent qu'il est nécessaire d'introduire une viscosité anisotrope dans le modèle. Nous allons discuter cette modification du modèle dans le chapitre suivant.

Bibliographie

[BRE 91] F. Brezzi, M. Fortin, Mixed and hybrid Finite Element Methods, Springer :New York, (1991).

[CHE 06] L. Chevalier, S. Maamar Y. Marco, G. Racineux, Simulation of free blowing of polyethylene terephthalate using a thermodynamic induced crystallisation model, Int. J. of Forming Processes, 9, 1, 29-59, 2006.

[COS 08] B. Cosson, Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement Thèse de doctorat, 2008.

[COS 09] B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Optimization of the thickness of PET bottle during stretch-blow molding by using a mesh-free (numerical) method. Int Polymer Process 24(3):223–233, 2009.

[HUG 87] J.R. Hugues. The finite element method, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, N-J. 07632, 1987.

[MEN 12] G.H. Menary, C.W. Tan, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, P.J. Martin. Biaxial Deformation of PET at Conditions Applicable to the Stretch Blow Molding Process. Polymer Engineering & Science, vol. 52, no3, pp. 671-688, 2012.

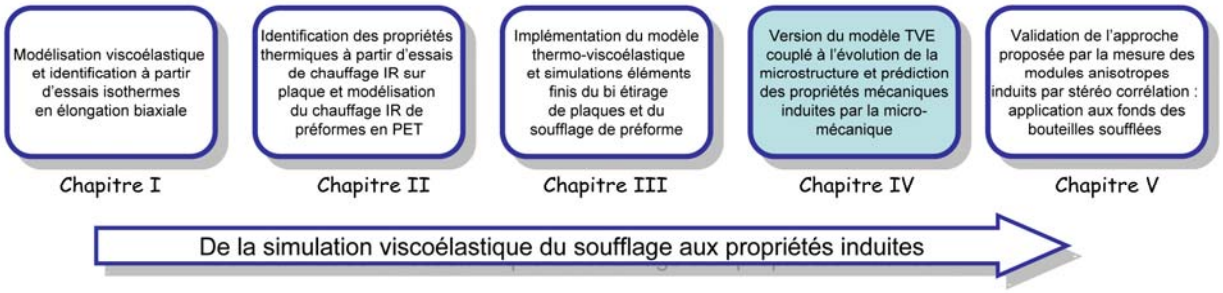
[NAG 12] C. Nagarajappa. Identification and validation of process parameters for stretch blow moulding simulation. Thesis for school of mechanical and aerospace engineering, Queen's university Belfast. 2012.

[SAL 09] Y.M. Salomeia. Improved understanding of injection stretch blow moulding trough instrumentation process monitoring and modeling. Thesis for school of mechanical and aerospace engineering, Queen's university Belfast. 2009.

[TAN 08] Tan, C. W.; Menary, G. H.; Armstrong, C. G.; Maheshwari, K.; Salomeia, Y.; Picard, M.; Billon, N.; Harkin-Jones, E. M. A.; and Martin, P. J.; "Modelling of the Injection Stretch Blow Moulding of PET Containers via Pressure-Volume-time (PVt) Thermodynamic Relationship," ESAFORM 2008.

[ZIE 00] O.C. Zienkiewicz. The finite element method. Volume1: The Basis. 2000.

Chapitre IV
Détermination des propriétés induites par homogénéisation micromécanique (chapitre de transition)



IV.1 Introduction

Les résultats du chapitre III qui concernent la simulation du procédé de soufflage de préforme avec le modèle visco-hyperélastique isotrope incitent à considérer de prendre en compte une viscosité pouvant évoluer de manière anisotropie afin de reproduire les proportions observées lors de soufflages réels. Dans ce chapitre, nous inspirant du travail de Cosson [COS 09], on propose de mettre en place une viscosité anisotrope dans le modèle de visco-hyperelastique du comportement du matériau. Avec ce modèle visco-hyperélastique anisotrope proposé, nous sommes capables d'obtenir une bonne évolution de la géométrie.

L'analogie avec le travail de Benoit Cosson ne s'arrête pas là. Dans [COS 12] il propose de coupler les paramètres du durcissement en fonction de paramètre microstructuraux : taux de cristallinité et l'orientation. Ainsi, tout en simulant le soufflage pour obtenir la forme et la distribution des épaisseurs de la bouteille finale, on peut aussi prédire le taux de cristallinité et l'orientation induite de sa microstructure en tous les points de la bouteille.

Ainsi, il serait possible, en utilisant les méthodes d'homogénéisation présentées dans la thèse de Benoît Cosson, de déterminer les propriétés élastiques de la bouteille finale.

Faute de temps, cette étape n'a pas été réalisée effectivement. La dernière section de ce chapitre rappelle les grandes lignes du travail de Benoit Cosson et la manière de le transposer à notre modèle. Ce chapitre apparait comme des perspectives du travail déjà réalisé mais nous avons choisi de le maintenir à cette place pour respecter la logique de la démarche globale de modélisation du procédé en vu de la prédiction des performances en service des bouteilles.

IV.2 Une viscosité anisotrope

On présente dans cette section la version du modèle avec la viscosité anisotrope afin de bien représenter la proportion diamètre / longueur de la bouteille lors de la simulation numérique. On propose d'écrire la viscosité sous la forme suivante :

$$\eta_i = \eta_0 \widetilde{h}_i\left(\overline{\varepsilon_v}\right) f\left(\overline{\dot{\varepsilon}}_v\right) \qquad i = 1,2,3 \qquad \text{(IV.1)}$$

$$\begin{cases} \tilde{h}_i\left(\overline{\varepsilon_v}\right)=\beta h_i\left(\overline{\varepsilon_v},\varepsilon_{vi}\right)+(1-\beta)h_{\max}\left(\overline{\varepsilon_v}\right) & avec \quad 0\le\beta\le 1 \qquad i=1,2 \\ \tilde{h}_i\left(\overline{\varepsilon_v}\right)=\bar{h}\left(\overline{\varepsilon_v}\right) & i=3 \end{cases} \tag{IV.2}$$

avec : $$h_i\left(\overline{\varepsilon_v},\varepsilon_{vi}\right)=\frac{\left(1-\exp\left(-K\overline{\varepsilon_v}+h_0\right)\right)}{\left(1-\varepsilon_{vi}/\varepsilon_{v\lim}\right)^N} \qquad i=1,2 \tag{IV.3a}$$

$$\bar{h}\left(\overline{\varepsilon_v}\right)=\frac{\left(1-\exp\left(-K\overline{\varepsilon_v}+h_0\right)\right)}{\left(1-\overline{\varepsilon_v}/\varepsilon_{v\lim}\right)^N} \tag{IV.3b}$$

$$h_{\max}\left(\overline{\varepsilon_v}\right)=\max(h_i\left(\overline{\varepsilon_v},\varepsilon_{vi}\right)) \qquad i=1,2 \tag{IV.3c}$$

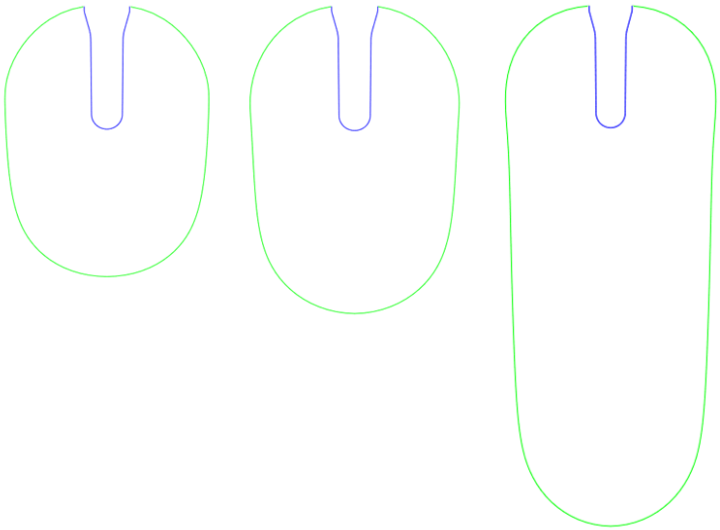
où i représente les trois directions principales, β est le paramètre d'anisotrope, lorsque $\beta = 0$ on trouve le cas isotrope. Ainsi, la direction la plus étirée va durcir, et participera via le coefficient β au durcissement dans les deux autres directions mais celles-ci, resteront plus souples et pourront continuer à se déformer.

Des essais réalisés à QUB montrent, couplés à des calculs, que les durcissements ne sont pas synchrones dans les directions longitudinales et circonférentielles. Notre modèle reproduit cela.

IV.3 Simulations avec le modèle anisotrope

IV.3.1 Simulation du soufflage

Nous représentons ici les résultats des simulations de soufflage en tenant compte du comportement anisotrope *via* un paramètre d'anisotropie β. Ce paramètre joue un rôle important dans l'élancement de la bouteille finale. La figure IV.1 illustre qu'avec différentes valeurs de ce coefficient, on obtient différentes évolutions de la géométrie et qu'ainsi on peut choisir le meilleur coefficient. On peut noter que β affecte seulement la longueur de la bouteille et que le rayon limite est toujours le même ce qui est normal car la valeur de viscosité dans le sens le plus étiré ne dépend pas de β dans le modèle. Dans le cas isotrope, $\beta = 0$, la bouteille simulée est trop courte. Plus β est grand, plus la bouteille est longue. Lorsque $\beta = 1$, la bouteille simulée est trop longue par rapport à la bouteille réelle.



(a) (b) (c)

Figure IV.1 : *Soufflage libre de bouteille (a) β =0 ; (b) β =0,5 (c) β =1*

C'est pour $\beta = 0,9$ que l'on obtient le meilleur rapport longueur-largeur (environ 3.1-3.2) de la bouteille (voir la figure IV.2). Cependant le volume de la bouteille est un peu trop grand par rapport aux résultats expérimentaux. L'épaisseur de la bouteille simulée est de l'ordre de 0,2 mm alors que celui dans les essais est de l'ordre de 0,4 mm.

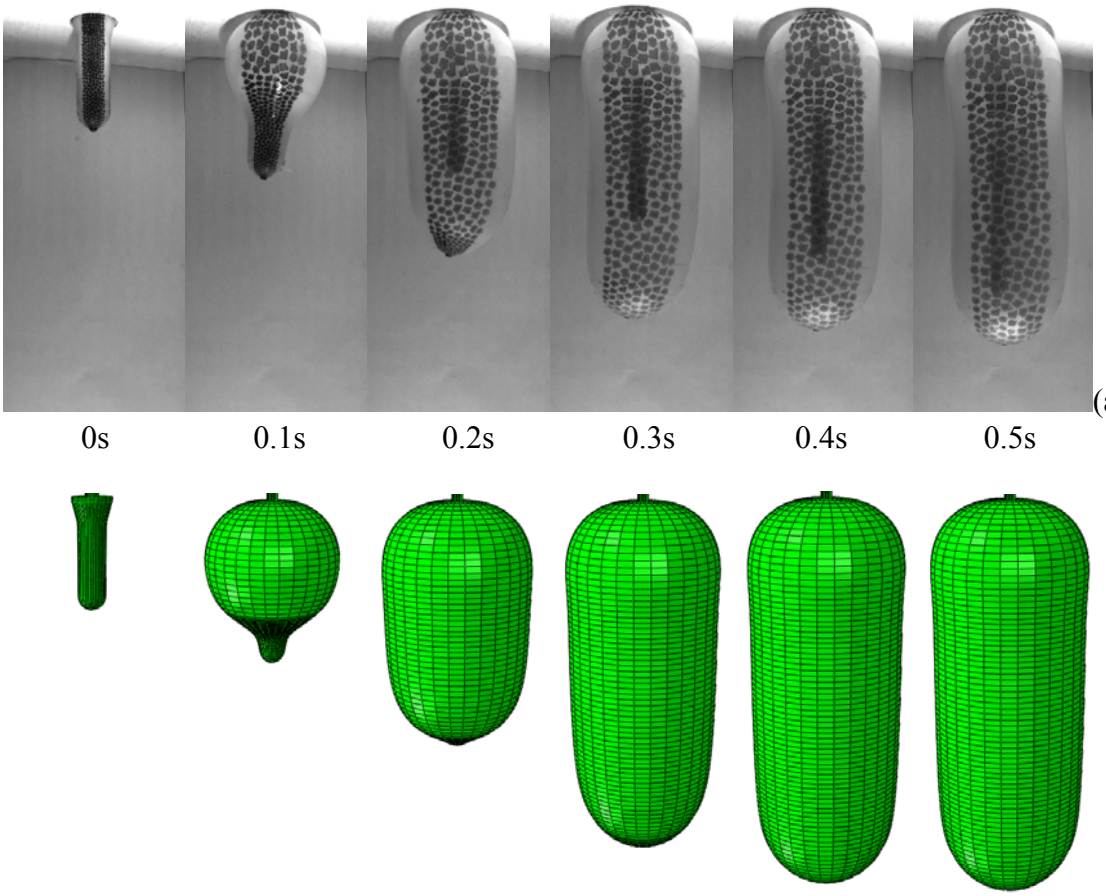


Figure IV.2 : *(a) Soufflage libre de la préforme ; (b) Simulation du Soufflage libre de la bouteille pour β =0,9*

IV.3.2 Simulation de l'essai d'élongation plane

Examinons le cas des essais d'élongation plane pour illustrer l'effet de l'anisotropie introduite dans modèle proposé dans la section IV.2. Notamment pour répondre à la question : β=0,9 permet-il aussi de bien représenter des essais non équilibrés ? Cette étude permettra aussi de mettre en évidence une différence importante entre l'introduction de l'anisotropie dans un modèle viscoplastique (telle que réalisée dans les travaux de Benoit Cosson) et le cas d'un modèle visco-élastique.

L'essai d'élongation plane est illustré dans la figure IV.3 : la plaque est soumise à une vitesse *V* suivant l'axe *X* alors que la déformation est maintenue nulle dans la direction Y. Compte tenu des axes de symétrie, le cas d'élongation peut aussi être simulé à l'aide d'un quart de la plaque.

La figure IV.4 montre le résultat expérimental de l'évolution des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} à la température 90°C pour une vitesse de déformation 2 s^{-1}. On peut constater que suivant l'axe *X*, il présente l'effet de durcissement qui commence à partir du temps 1s. Mais suivant l'axe *Y*, la contrainte σ_{yy} reste petite.

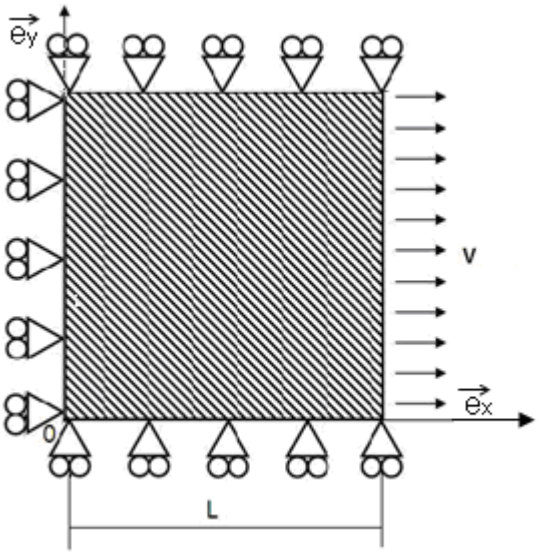


Figure IV.3 : *L'essai d'élongation plane*

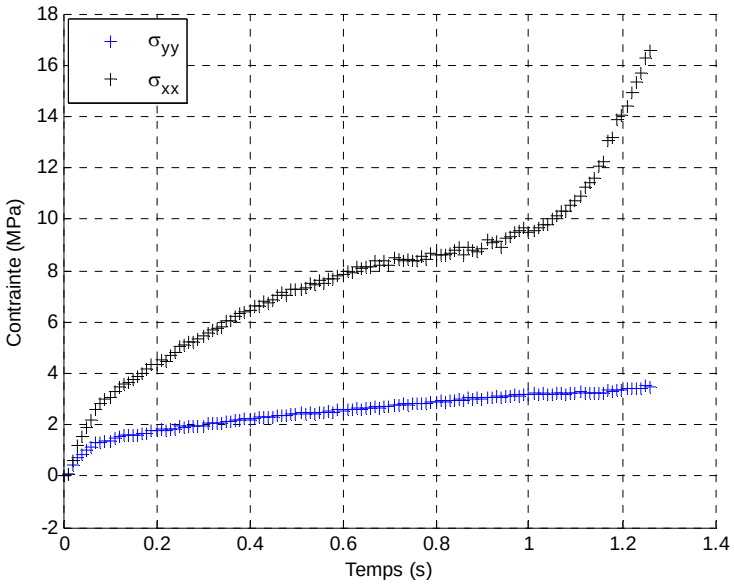
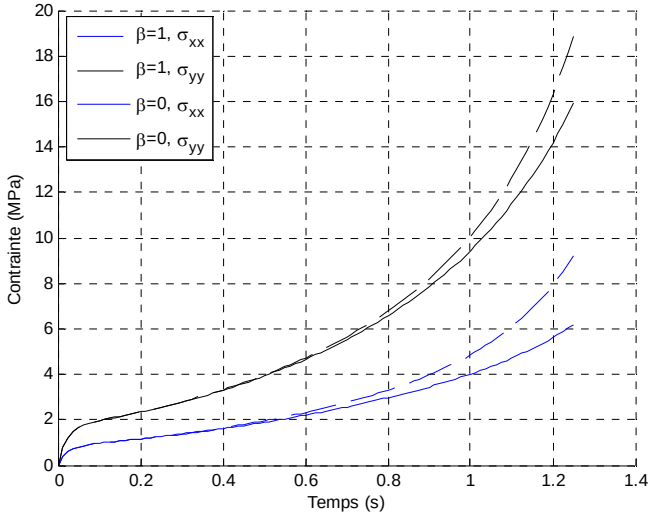
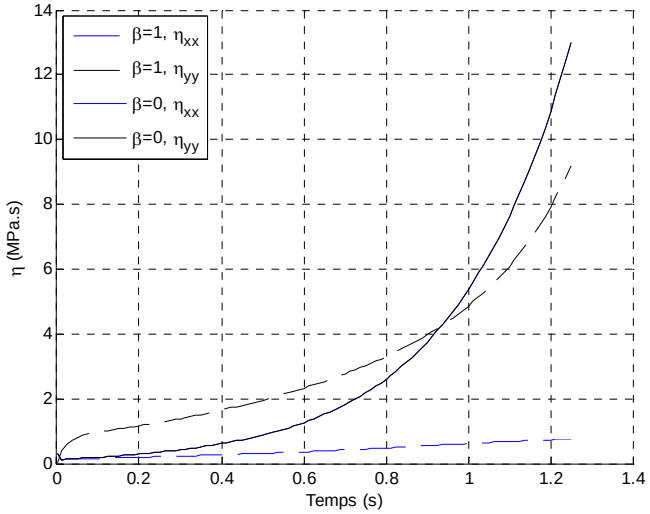


Figure IV.4 *: L'évolution expérimentale des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} à la température 90°C pour une vitesse de déformation 2 s^{-1}*

La figure IV.5 illustre l'effet des différentes valeurs de β (β =0, 1) sur l'évolution des contraintes et des viscosités suivant les axes X et Y. On peut voir que même pour β=1 et bien que la viscosité η_{yy} soit petite devant η_{xx}, la contrainte σ_{yy} est plus grande que celle du cas β=0. Cela provient de ce que dans le cas β=1, avec une petite viscosité η_{yy}, le tenseur de déformation de Cauchy gauche élastique B_{eyy} et le module de cisaillement G sont plus élevés que ceux dans le cas avec β plus petit.



(a)



(b)

Figure IV.5 *: Les résultats numériques à la température 90°C pour une vitesse de déformation 2 s^{-1} : (a) Evolution des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} pour β =0 et 1 ; (b) Evolution des viscosités η_{xx} et η_{yy} pour β =0 et 1*

Le cas d'élongation plane montre qu'avec la viscosité anisotrope et le module de cisaillement (la partie élastique) isotrope, la contrainte σ_{yy} est trop élevée par rapport aux résultats expérimentaux. Par conséquent, il faut envisager une forme anisotrope aussi pour la partie élastique si on souhaite reproduire de manière correcte les essais et par suite le soufflage.

Ces réflexions n'ont pas été poussées plus avant faute de temps mais constituent une étape à franchir pour de futurs travaux… de même que le couplage avec la microstructure.

IV.4 Couplage avec la microstructure

Dans cette section, nous allons rapidement rappeler la construction de la viscosité dépendante de la microstructure telle que Benoit Cosson l'avait présenté. Dans notre cas, l'état de la microstructure (l'orientation et le taux de cristallinité) est introduit dans la partie visqueuse du modèle visco-hyperélastique. L'évolution du taux de cristallinité est donnée par le modèle légèrement adapté d'Avrami [AHZ 03, DOU 00] :

$$X_c = X_c^{\infty} y \tag{IV.4}$$

$$\frac{dy}{dt} = A(T)\dot{\varepsilon}_{eq}\left[-\ln\left(1-(y-y_0)\right)\right]^{\frac{n-1}{n}}(1-y) \tag{IV.5}$$

$$\dot{\varepsilon}_{eq} = \max_{i=1,2,3}\left(\dot{\varepsilon}_{vi}\right) \tag{IV.6}$$

où y_0 est le taux de cristallinité réduit initial. Cette cristallinité est très faible initialement et 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 modèle visco-hyperélastique avec cristallisation induite peut être décrit par les équations suivantes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\eta_n \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{\hat{\sigma}}} - p\underline{\underline{I}} - q\underline{\underline{I}}\,,\ \underline{\underline{\hat{\sigma}}} = G\left(tr\left(\underline{\underline{B_e}}\right)\right)\underline{\underline{\hat{B}_e}} \tag{IV.7a}$$

$$\det \underline{\underline{B_e}} = 1 \tag{IV.7b}$$

$$div\left(\underline{V}\right) = 0 \tag{IV.7c}$$

$$\frac{\delta \underline{\underline{B_e}}}{\delta t} + \frac{G\left(tr\left(\underline{\underline{B_e}}\right)\right)}{\eta_i}\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\hat{B}_e}} = 0 \tag{IV.7d}$$

$$\eta_i = \eta_0(T)\,h_i\left(\varepsilon_{vi}, \overline{\varepsilon_v}\right) f\left(\overline{\dot{\varepsilon}_v}\right) g\left(y, y_0\right) \qquad i = 1,2,3 \tag{IV.7e}$$

L'effet de durcissement est liée à η_i qui varie en fonction de la cristallinité *y*. Il est nécessaire de proposer et identifier la fonction *g(y, y₀)* comme par exemple celle proposée par Cosson :

$$g\left(y, y_0\right) = \exp\left(a\frac{1-y_0}{1-y} + b\frac{y-y_0}{1-y_0} + c\left(\frac{y-y_0}{1-y_0}\right)^P\right) \tag{IV.7f}$$

où *a*, *b*, *c* et *P* sont des constantes à identifier. Il faut noter que *y* évolue avec la vitesse de déformation visqueuse aussi la dépendance en déformation visqueuse doit être simplifiée et la fonction :

$$h_i\left(\varepsilon_{vi}, \overline{\varepsilon_v}\right) = \exp\left(\lambda\left(\varepsilon_{vi} - \overline{\varepsilon_v}\right)\right) \tag{IV.7g}$$

où λ est une autre constante liée à l'anisotropie. Bien sûr une identification de ce modèle sur la base des essais équi-biaxiaux et de traction plane est nécessaire.

Munis de ce modèle, on réalise la simulation numérique du soufflage pour suivre l'évolution de la microstructure au cours du soufflage. Ainsi, outre la géométrie finale de la bouteille : forme, volume et épaisseurs, la simulation donne aussi accès à la répartition du taux de cristallinité dans la bouteille. La déformation anisotrope du réseau élastique permettra d'obtenir des informations sur l'orientation des chaines macromolécules.

On peut alors réaliser des calculs micromécaniques pour la détermination de la tenue d'une bouteille formée.

IV.5 De la microstructure aux propriétés en service

Durant le procédé de soufflage, la morphologie du PET évolue de “amorphe quasi isotrope” à “cristallin très orienté” notamment dans les régions les étirées de la bouteille. Le matériau, une fois à température ambiante peut-être considéré comme élastique et orthotrope. Les modules élastiques suivant les axes de la surface moyenne de la bouteille sont prédominant sur le comportement global que cette dernière pourra présenter. A l’inverse, le module suivant l’épaisseur a un impact quasi-nul.

Benoît Cosson, dans son travail de thèse [COS 08] développe une méthodologie permettant d’accéder aux modules élastiques induits.

On peut modéliser le PET semi cristallin comme un composite matrice-inclusion : la matrice est constituée de la phase amorphe et les inclusions modélisent la phase cristalline dispersée (en effet, la translucidité est préservée). Rutledge [RUT 97] a montré que le cristal de PET possède des symétries et peut être considéré comme isotrope transverse. La phase cristalline peut être considérée, (voir Bedoui *et al.* [BED 06]), comme des inclusions sphériques.

$$C_{crystal} = \begin{bmatrix} 118000 & 5700 & 5700 & 0 & 0 & 0 \\ 5700 & 7700 & 5460 & 0 & 0 & 0 \\ 5700 & 5460 & 7700 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2240 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3240 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3240 \end{bmatrix} \text{(MPa)} \qquad \text{(IV.8)}$$

Les calculs de micromécaniques réalisés par Cosson *et al.* [COS 12] sont basés sur les travaux de Walpole [WAL 81], modifié par Federico *et al.* [FED 04]. Ils dérivent du problème d’Eshelby qui donne la solution en contrainte et déformation d’une inclusion ellipsoïdale dans une matrice isotrope infinie. Dans le cas d’une inclusion isotrope transverse (avec axe d’isotropie confondu avec l’axe principal de l’ellipsoïde) la déformation dans l’inclusion dépend de la déformation imposée à la matrice loi de l’inclusion :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}\,\underline{\underline{\varepsilon}}^{\infty} \qquad \text{(IV.9)}$$

$$\underline{\underline{\underline{\underline{A}}}} = \left[\underline{\underline{\underline{\underline{I}}}} + \underline{\underline{\underline{\underline{S}}}} : \left(\underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}}^{-1} : \underline{\underline{\underline{\underline{C_i}}}} - \underline{\underline{\underline{\underline{I}}}} \right) \right]^{-1} \qquad \text{(IV.10)}$$

$\underline{\underline{\underline{\underline{A}}}}$ est le tenseur de localisation, $\underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}}$ et $\underline{\underline{\underline{\underline{C_i}}}}$ sont respectivement les tenseurs élastiques de la matrice et de l’inclusion, $\underline{\underline{\underline{\underline{I}}}}$ est le tenseur identité et $\underline{\underline{\underline{\underline{S}}}}$ le tenseur d’Eshelby qui dépend uniquement du coefficient de Poisson et du facteur de forme de l’inclusion. (voir figure IV.6).

$$\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} = \left[\sum_{r=0}^{N} c_r \underline{\underline{\underline{\underline{C_r}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{A_r}}}} \right] : \left[\sum_{r=0}^{N} c_r \underline{\underline{\underline{\underline{A_r}}}} \right]^{-1} \qquad \text{(IV.11)}$$

$$\sum_{r=0}^{N} c_r = 1 \qquad \text{(IV.12)}$$

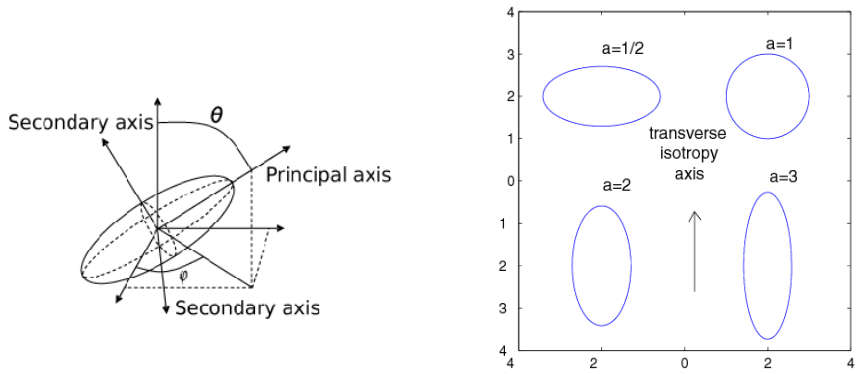
L’équation IV.11 donne une estimation du tenseur élastique effectif pour un composite à N+1 phases (la phase 0 est la matrice pour laquelle le tenseur d’Eshelby est égal à l’identité).

Chacune des N phases est constituée d'inclusions identiques (même orientation, même facteur de forme et même propriétés élastiques). c_r correspond à la fraction volumique de chaque phase. Dans le cas du PET biétiré, la distribution des cristaux est statistique : deux angles (θ et φ), sont nécessaires pour définir l'orientation d'une inclusion comme illustrés sur la Figure IV.6. Si on considère la moyenne de cette distribution, l'équation IV.11 peut alors s'écrire :

$$\underline{\underline{\underline{\underline{C}}}} = \left[(1-c)\underline{\underline{\underline{\underline{C_0}}}} + c \int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \underline{\underline{\underline{\underline{C_i}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{A_i}}}} \mathrm{d}a \right] : \left[(1-c)\underline{\underline{\underline{\underline{I}}}} + c \int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \underline{\underline{\underline{\underline{A_i}}}} \mathrm{d}a \right]^{-1} \tag{IV.13}$$

$$\int_{\mathbb{S}^{2+}} \psi \mathrm{d}a = 1 \tag{IV.14}$$

$\mathbb{S}^{2+}$ est la ½ sphère unitaire. ψ est la densité de probabilité des orientations d'inclusion. c est la fraction volumique de la phase cristalline.



(a) (b)

Figure IV.6 : *(a) Elliptical inclusion location defined by angles θ and φ,*
(b) Various inclusion shape factors

L'isotropie transverse nécessite que la fonction ψ soit indépendante de la variable φ (i.e. $\psi(\theta,\varphi) = \psi(\theta)$). La fonction proposée par Benoit Cosson est une fonction des déformations principales (figure IV.7). Si le matériau n'est pas étiré, la déformation (nulle) est isotrope et la densité ne dépend pas de l'orientation ($\psi(\theta) = \pi/2$).

$$g(\theta) = \left(1-\chi^2\right)\left(1+\exp\left(\frac{\theta - \frac{\pi}{2}\chi^{1/2}}{\chi^2}\right)\right)^{-1} + \chi^2 \tag{IV.15}$$

$$\psi(\theta) = \frac{g(\theta)}{2\pi \int_0^{\pi/2} g(\theta')\sin(\theta')d\theta'} \tag{IV.16}$$

$$\chi = \exp\left(\beta_e\left(\varepsilon_{II} - \varepsilon_{III}\right)\right) \quad \text{with: } \varepsilon_I < \varepsilon_{II} < \varepsilon_{III} \tag{IV.17}$$

ε_k ($k = I, II, III$) sont les déformations principales : lesquelles ? Les déformations totales ou les déformations élastiques ? χ est une fonction qui représente le niveau de déformation : $\chi = 1$ correspond à un matériau non étiré et isotrope, $\chi = 0$ correspond à une orientation parfaite de tous les cristaux dans la même direction.

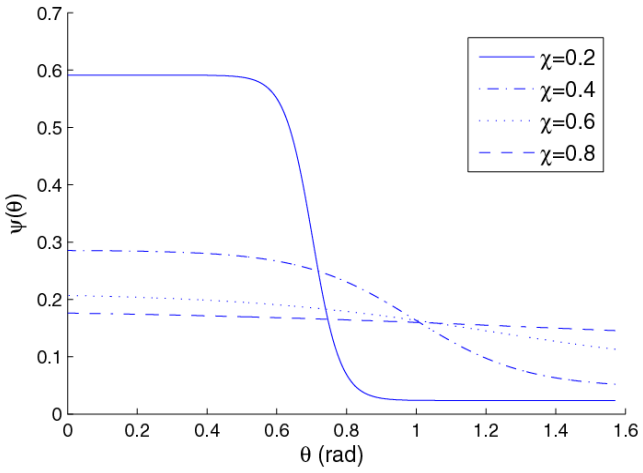


Figure IV.7 : *Density distribution of inclusion orientation ψ(θ) for various values of strain level χ*

La figure IV.8 montre l'influence du facteur de forme de l'inclusion sur le module effectif du milieu homogénéisé media. Plus le facteur de forme est important et plus la différence entre les propriétés dans le plan et transversalement au plan est importante.

Des mesures de modules faites lors de la thèse de Benoît Cosson ont permis d'identifier le facteur de forme moyen et le coefficient d'anisotropie βe : $\alpha = 5$ et $\beta_e = 2$. Dans ce cas, la prédiction du modèle micromécanique de l'équation IV.14 et les résultats de mesures de la figure IV.9(a) et de la figure IV.9(b) est plutôt bonne.

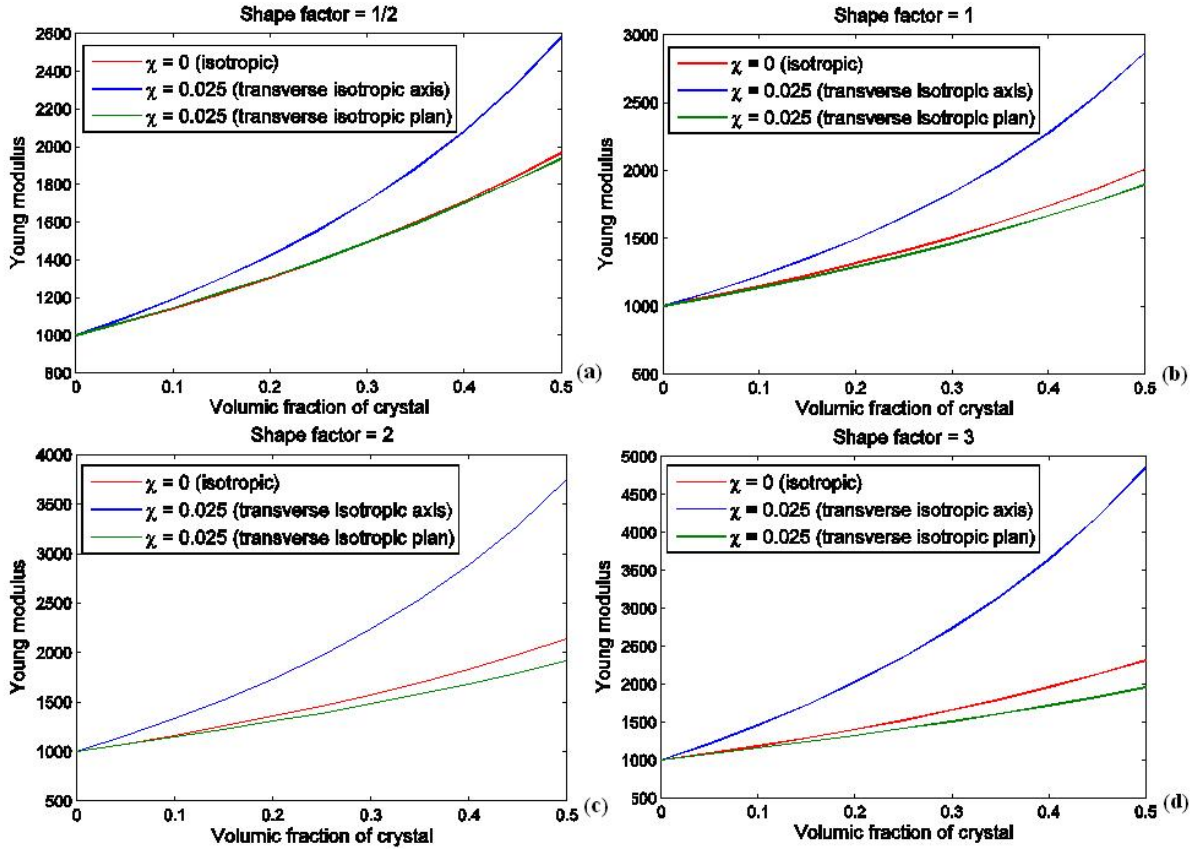


Figure IV.8 : *Estimation of Young's modulus for various values of inclusion shape factor [COS 08]*

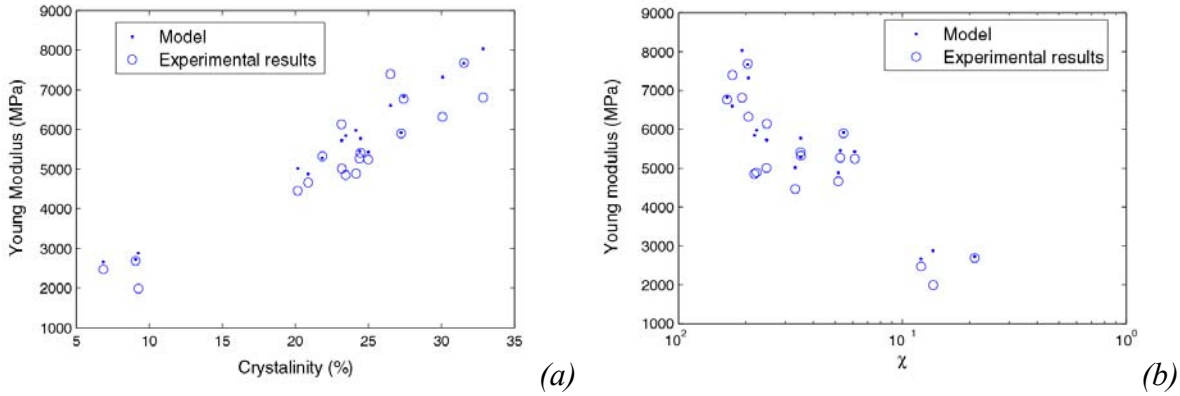


Figure IV.9 : *Young modulus versus (a) crystallinity and (b) strain level*

On peut considérer que cette approche, qui a fait ses preuves avec le modèle viscoplastique, peut s'adapter sans grandes difficultés au cas visco-élastique. Il restera néanmoins à régler le problème de l'interphase amorphe au sein des sphérolites. Cette phase emprisonnée entre les cristallites est plus rigide que la phase amorphe et plus souple que la phase cristalline…

IV.6 Conclusion

On a proposé une viscosité orthotrope dans le modèle du comportement afin d'améliorer les résultats de simulation du soufflage. Nous avons ajusté la valeur du paramètre anisotrope pour bien représenter la forme de la bouteille finale. Néanmoins la corrélation n'est pas tout à fait satisfaisante sur le volume interne. Il reste donc quelques sous étapes à affiner pour finaliser l'étape décrite dans la vignette du chapitre IV.

Bibliographie

[AHZ 03] S. Ahzi, A.Makradi,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.

[BED 06] F. B´edoui, J. Diani , G. R´egnier, W. Seiler, Micromechanical modeling of isotropic elastic behavior of semicrystalline polymers, Acta Materialia, 54, 1513-1523, 2006.

[COS 08] B. Cosson, Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement Thèse de doctorat, 2008.

[COS 09] B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Optimization of the thickness of PET bottle during stretch-blow molding by using a mesh-free (numerical) method. Int Polymer Process 24(3):223–233, 2009.

[COS 12] B. Cosson, L. Chevalier, G. Régnier. Simulation of the stretch blow moulding process: from the modelling of themicrostructure evolution to the end-use elastic properties of polyethylene terephthalate bottles, International Journal of Material Forming, Volume 5, Number 1, 39-53, 2012.

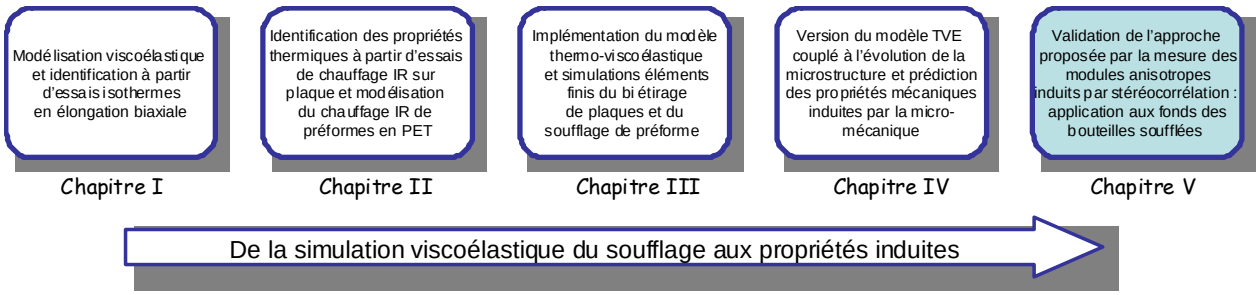
[DOU 00] A.K. Doufas, A.J. McHugh, C. Miller, Simulation of melt spinning including flow-induced crystallization Part I. Model development and predictions, J. Non- Newtonian Fluid Mech. 92 27-66, 2000.

[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.

[RUT 97] G.C. Rutledge, Thermomechanical Properties of the Crystal Phase of Poly(ethylene terephthalate) by MolecularModeling,Macromolecules, 30, 2785-2791, 1997.

[WAL 81] L.J. Walpole, Elastic Behavior of Composite Materials : Theoretical Foundations, Advances in Applied Mechanics, 21, 169-242, 1981.

Chapitre V
Identification des caractéristiques élastiques orthotropes et hétérogènes sur des fonds de bouteilles soufflées



V.1 Introduction

Les changements de microstructure influent fortement sur le comportement final du matériau mis en forme. L'analyse microstructurale peut être réalisée par diffraction des rayons X. Parmi les techniques existantes, les plus couramment utilisées sont la diffraction aux grands angles (WAXS) et aux petits angles (SAXS). Les différences d'intensité observées en SAXS sont liées à la différence de densité électronique entre la phase amorphe et la phase semi-cristalline [PIC 07]. Ces mesures permettent de quantifier l'évolution de la microstructure.

Dans l'étude de Hanley *et al.* [HAN 06], les résultats SAXS permettent de déterminer la position des maxima d'intensité diffractée dans les bases pétaloïdes des bouteilles en PET. Une région amorphe a été identifiée dans la région d'injection avec une bi-axialement orientée, alors que dans les régions des pieds et des vallées de la bouteille de bases, la phase semi-cristalline apparait.
Par une technique beaucoup plus rudimentaire, en chauffant les bouteilles soufflées suffisamment haut au dessus de T_g, on peut voir, sur la figure V.1, que les fonds de bouteilles réchauffés « blanchissent » au voisinage du point d'injection. Ceci est un signe de cristallisation thermique, alors que la zone des pieds reste translucide car elle avait déjà cristallisée à cause de l'étirage mécanique auparavant.

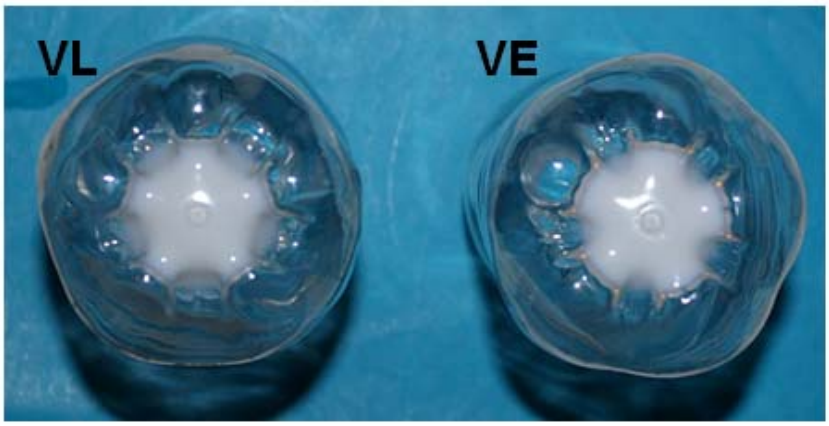


Figure V.1 : *Fonds pétaloïdes VL et VE ayant été réchauffés vers 150°C (entre Tg et Tm) où on voit apparaître des zones blanches lorsque le comportement était préalablement amorphe*

Via le changement de morphologie, les propriétés mécaniques finales des bouteilles en PET

par d'étirage et soufflage dépendent de l'histoire de la déformation pendant le procédé de mise en forme [CHE 99]. Il est nécessaire de connaître ces propriétés si on souhaite réaliser la simulation de l'écrasement d'une bouteille (top load test), du gonflage (burts test) ou de la tenue au stress crazing (Carter test). Dans les fonds pétaloïdes de bouteille, l'histoire de la déformation est très différente d'une région à l'autre des pieds et le processus d'étirage et soufflage - moulage induit une distribution hétérogène du module de Young. La manière dont le PET a été étiré a une influence importante sur la rigidité du matériau.

Par conséquent, tant que les propriétés mécaniques ne sont pas précisées, il est difficile de réaliser la simulation par éléments finis du comportement d'une bouteille soufflée sous pression ou soumise à un test d'écrasement. Chevalier *et al.* [CHE 99] ont obtenu des valeurs des modules élastiques dans la région régulière d'une bouteille à partir des mesures sur des éprouvettes découpées longitudinalement et transversalement. Ils ont mis en évidence le caractère fortement orthotrope du comportement dans cette zone.

Récemment, Benoît Cosson [COS 08] a présenté une modélisation globale du procédé de bi-étirage soufflage prenant en compte l'évolution de la microstructure du matériau pour prévoir le comportement élastique final de la bouteille. La prédiction des modules de Young sur le contour cylindrique de la bouteille soufflée est validée par la mesure : la simulation donne des résultats précis et les modules prévus dans la région régulière de la bouteille, où le PET est fortement étiré dans les directions ortho-radiales et longitudinales, sont très proches des modules expérimentaux mesurés. Les grandes lignes de ce travail ont été résumées dans le chapitre précédent.

Dans ce chapitre, nous présentons une étude réalisée sur des formes 3D soufflées afin de déterminer la distribution de modules élastiques induits dans une partie complexe de la bouteille : la base pétaloïde. Le PET n'est pas autant étiré dans cette région lors du procédé et les propriétés mécaniques sont plus faibles que dans la région centrale de la bouteille. De plus, la figure V.1 a montré que la microstructure était aussi très différente entre les pieds et la zone près du point d'injection : parce que les allongements sont hétérogènes dans cette région, la distribution de modules sera hétérogène aussi.

Le découpage d'éprouvettes dans cette zone 3D est très délicate et les éprouvettes de taille inévitablement petite et donc difficile à tester sur une machine d'essai traditionnelle. Aussi, nous présentons ici, une procédure d'identification pour définir la distribution de modules élastiques dans les fonds pétaloïdes. La procédure implique une phase expérimentale où une technique de stéréo corrélation est développée pour construire le champ de déformations sur la surface 3D de la base pétaloïde.

La technique de la corrélation d'images a été développée au début des années 80 : Peters *et al.* [PET 82, PET 83], Sutton *et al.* [SUT 83], par exemple, ont appliqué cette technique dans la mécanique des corps rigides, en particulier pour les problèmes 2D ([HE 84, SUT 86, BRU 89]). Cette technique est maintenant largement utilisée pour mesurer, la réponse mécanique d'un matériau hétérogène sous déformation plane ou contrainte plane ([REY 99, YAN 06]). Plus tard, la corrélation d'image a été étendue aux problèmes 3D ([LUO 94, HEL 96, GAR 99]) en utilisant un système de stéréovision avec deux caméras de reconnaître des objets 3D. Garcia *et al.* [GAR 02] ont utilisé cette technique pour mesurer une surface 3D initiale et le champ de déplacement de cette même surface. Le principe de la triangulation est utilisé dans ce travail. Mistou *et al.* [MIS 03] ont déterminé les coordonnées 3D à partir de l'intersection de deux lignes optiques provenant de deux points. Une difficulté de cette technique est

d'établir la correspondance entre la paire d'images numériques. La technique de corrélation stéréo a été proposée et appliquée par Hamid depuis 1996. Hild *et al.* [HIL 99] ont développé dans l'environnement Matlab, un logiciel de corrélation nommé 'Correli' qui permet de comparer les deux images numériques. Les calculs de corrélation sont effectués dans l'espace de Fourrier en utilisant des transformées rapides de Fourrier (FFT). Des études récentes ([RET 07, RET 09]) utilisent une technique étendue pour la corrélation d'images qui, couplé avec la X-FEM peut atteindre des discontinuités dans le champ de déplacement indépendamment du choix de maillage. D'autres extensions de la technique ont été proposées par Roux *et al.* [ROU 08] : à partir d'images numériques obtenues par microtomographie X, le champ de déplacement 3D de l'intérieur d'un objet peut être construit. Dans ce travail, nous utilisons le logiciel Correli étendu aux grandes déformations pour l'étude des polymères et présenté dans Chevalier *et al.* [CHE 01, CHE 02]. Nous appliquons cette technique dans le cas 3D des fonds pétaloïdes.

Ces résultats expérimentaux sont comparés avec des simulations par éléments finis réalisés sur la même géométrie. La comparaison mène à la distribution des propriétés élastiques sur cette surface. Les développements sont illustrés sur deux designs différents de fonds pétaloïdes qui présentent des comportements très différents lors de la mise sous pression des bouteilles au cours de l'essai ESC. Les deux bases sont nommées VE (vallée étroite) et VL (vallée large) en référence à la région entre deux pieds.

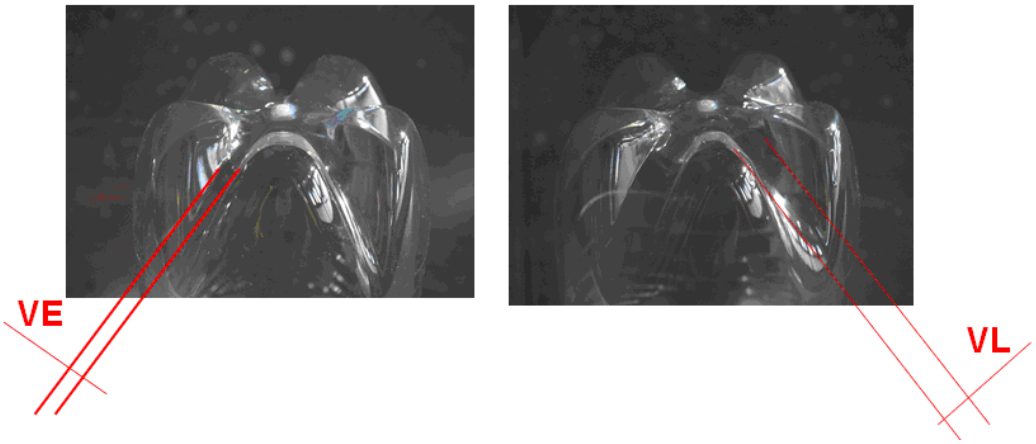
Dans la première partie dans ce chapitre, l'essai ESC est décrit et illustré par les différences très nettes de résultats entre les deux fonds (VE et VL). Nous présentons ensuite la construction d'une surface 3D à partir de deux images numériques par la technique de stéréo corrélation et nous évaluons quantitativement l'exactitude de la méthode par deux géométries critiques : un cylindre (détermination du rayon) et d'un bloc anguleux (détection de l'angle).
Dans la partie suivante, les aspects théoriques du calcul du champ de déformation membranaire sur le fonds de bouteille 3D sous pression est présenté. En parallèle, une modélisation par éléments finis d'une bouteille PET sous pression interne est également présentée. Des simulations numériques ont été réalisées d'abord sous l'hypothèse que le PET était élastique isotrope. Le champ de contraintes ainsi obtenu, peu sensible aux propriétés de rigidité, permet une évaluation des modules élastiques.

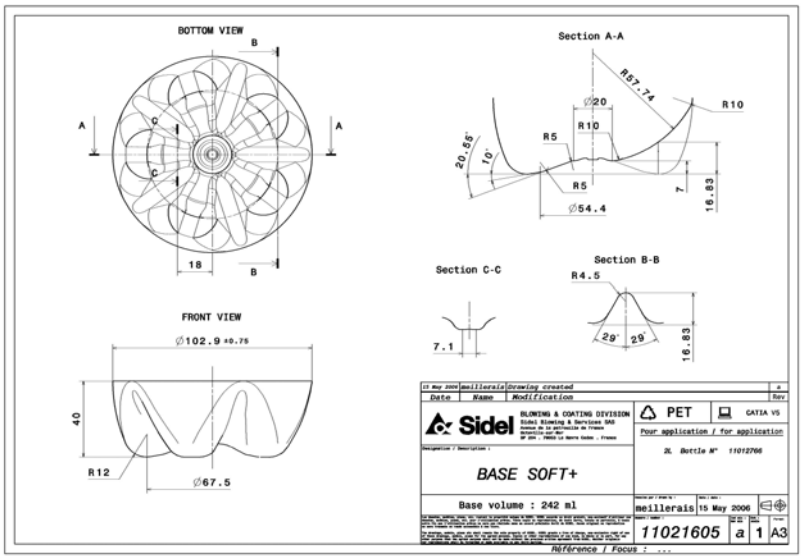
Un processus itératif de correction des modules est alors mis en place et au bout de quelques itérations, le champ de déformations mesurés et les champs des contraintes calculées permettent d'identifier la distribution du module de Young orthotrope. Avec les propriétés identifiées, on re-modélise le fond des bouteilles pour obtenir le nouveau champ des contraintes. Le processus itératif converge assez vite pour obtenir les propriétés orthotropes.

V.2. Procédure expérimentale

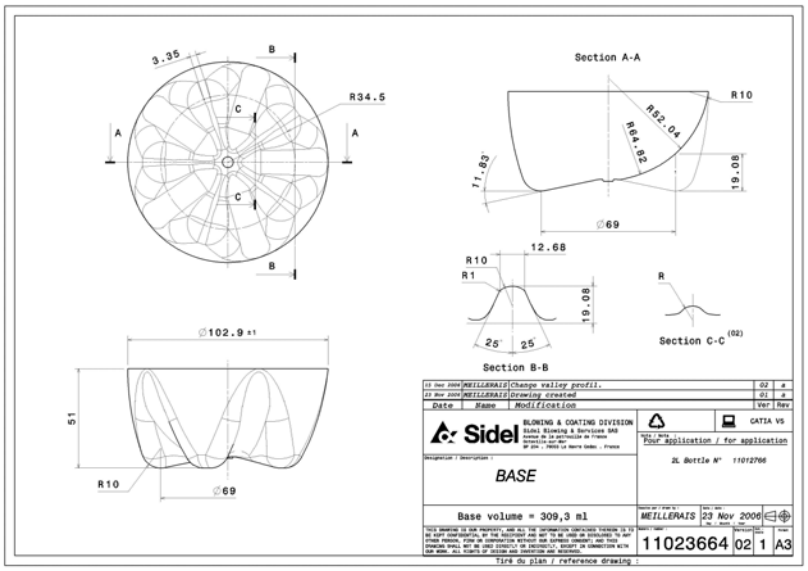
V.2.1. Contexte de l'étude : deux fonds de bouteilles comparés au travers du test ESC

En collaboration avec Sidel qui souhaitait tester deux designs de fonds de bouteilles pétaloïdes de géométrie différentes, une étude des propriétés du matériau dans la zone du fond qui exhibent des comportements radicalement différents, notamment au test ESC. Le premier fond (VL) est conçu avec des vallées de grande largeur entre chacun des cinq pieds et les flancs de pieds sont presque parallèles. Le deuxième type de fond (VE) présente une petite vallée entre deux pieds et les flancs des pieds sont donc moins raides que ceux du fond VL (voir la figure V.2).





(VE)



(VL)

Figure V.2 : *Vallée étroite (VE) entre les pieds ou vallée large (VL) entre les pieds*

Le test Carter, Environmental Stress Cracking (ESC), valide la tenue des fonds à l'une des causes les plus fréquentes de rupture fragile de polymères thermoplastiques : le stress cracking. Dans le cadre du test ESC, on mesure la durée durant laquelle la bouteille résiste à une pression de 5,3 bar lorsque son fond est immergé dans une solution de soude à 0,2%. La

bouteille doit tenir 10 minutes avant d'éclater pour que la série d'où elle provient soit déclarée valide. La rupture s'initie à partir de fissures naissant le plus souvent sur les flancs des vallées entre les pieds. La géométrie et la structure de la matière dans cette zone sont particulièrement complexes.

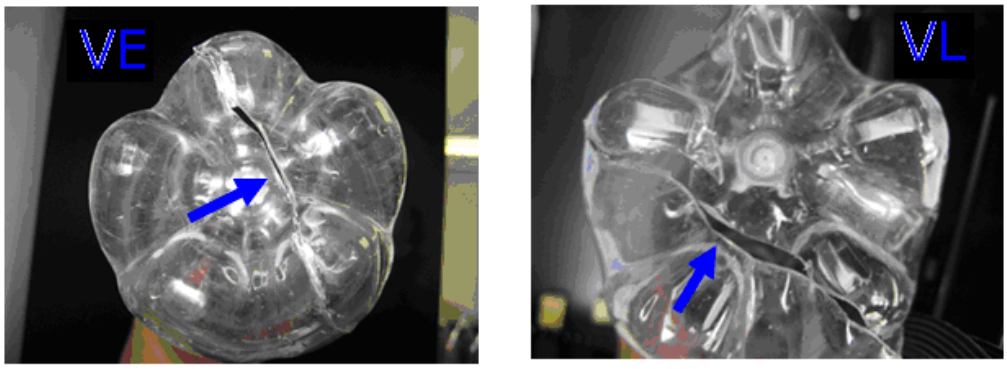


Figure V.3 : *Fissuration des pieds lors du test ESC*

Dans le tableau V.1, on peut voir que l'écart type de la durée du test avant rupture est presque la même pour les deux conceptions du fond pétaloïde, mais la valeur moyenne est clairement plus basse pour la petite vallée, la plupart des bouteilles évaluées ne peuvent pas atteindre les 10 minutes et la conception n'est pas validée.

Tableau V.1. Comparaison des résistances
au test ESC entre les fonds VE et VL

	VL	VE
Temps moyen	51,3	17,7 min
Ecart type	13,6	14,2 min
Temps Minimum	21,0	1,0 min
Temps Maximum	> 60,0	58,0 min

En construisant la fonction de densité de probabilité pour "la durée avant le cracking", on peut définir la région de confiance pour 95 % des tests sur chaque conception (voir la figure V.4). Dans le cas VL, la région de confiance est [28,5 - 74,1 min] : la fenêtre est largement au-dessus de 10 min aussi très peu de bouteilles seront rejetées. Dans le cas VE, en revanche, la région de confiance est [1,2 - 47 min] : la borne inférieure est très nettement en dessous de 10 min. La fonction de répartition nous permettrait de calculer la probabilité de rupture en dessous de 10 minutes mais cette conception ne permet clairement pas de satisfaire les critères de tenue au test ESC.

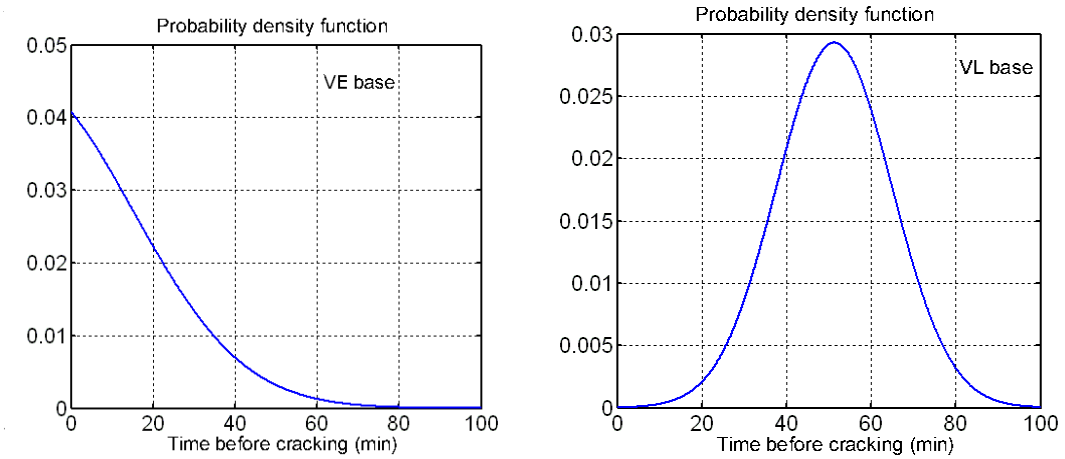


Figure V.4 : *Fonction de densité de probabilité pour le temps avant cracking. Le fond VL résiste beaucoup mieux que VE*

Dans les sections suivantes, compte tenu des modifications des élasticités induites par le procédé, on peut penser que la différence de performance provient d'une différence de propriétés mécanique. On cherche donc à expliquer l'origine de cette différence en analysant les déformations de ces fonds pétaloïdes sous pression.

V.2.2. Méthode utilisant la stéréo corrélation

Afin de connaître les coordonnées tridimensionnelles d'une surface 3D à l'aide de deux caméras, on utilise le principe de triangulation [GAR 02, MIS 03]. Étant donnés deux points homologues dans les deux images stéréoscopiques, il leur correspond deux rayons optiques dans l'espace, l'intersection de ces deux rayons conduit aux coordonnées tridimensionnelles du point de la scène correspondant. On cherche la correspondance des points homologues par auto corrélation d'images à l'aide du logiciel Correli [HIL 99] développé sous Matlab.

Dans ce travail, on utilise la base de CorreliGD déjà présentée dans [CHE 01] pour développer la technique de stéréo corrélation. Compte tenu de la distance faible entre les deux caméras (200 mm) et celle, plus importante, entre le support des caméras et l'objet mesuré (supérieure à 1800 mm), le problème géométrique de triangulation peut être simplifié et réduit à une simple relation de linéarité entre les décalages des points entre les deux images et la profondeur z de la surface.

A partir de deux caméras visant la même zone sous un angle différent ($\pm\alpha$ sur la figure V.4), chaque point M de coordonnées (x, y, z) dans l'espace est représenté par deux points, à savoir M_1 dans l'image 1 et M_2 dans l'image 2. Le décalage δV observé entre ces deux points est proportionnel à la cote z de M.

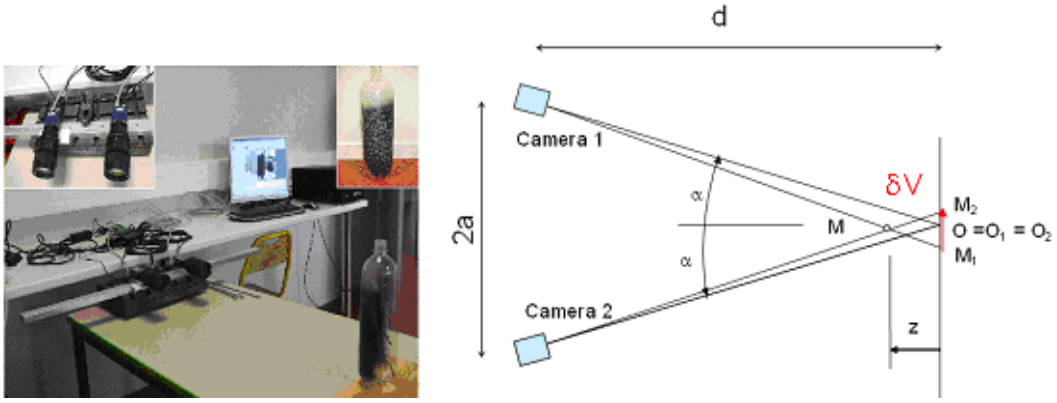


Figure V.5 : *Principe de la stéréo corrélation, deux caméras CCD sont utilisées et les déplacements apparents δU et δV servent à la détermination de la profondeur z*

Si les deux caméras sont fixées dans le même plan horizontal et qu'on règle les focales à l'identique, alors la composante de déplacement vertical δU est nulle, et il ne reste que le décalage horizontal (composante de déplacement δV) entre les deux images. La triangulation donne la relation géométrique :

$$z = -\frac{d}{2a + \delta V}\delta V \approx -\frac{d}{2a}\delta V \qquad \text{(V.1)}$$

On note $2a$ la distance entre les deux caméras et d la distance entre la bouteille et le point milieu entre les deux caméras.

Ainsi la mesure de champ se fait en 2 étapes : (1) prise de 2 images décalées sans pression pour la détermination des coordonnées initiales x, y, z de chaque point de la zone filmée et en connaissant les coordonnées (x, y, z) de tous les points, on peut reconstruire la forme de l'éprouvette en 3D ; (2) mise en pression et prise de 2 images décalées de la même façon pour la détermination des coordonnées finales X, Y, Z de chaque point de la configuration déformée. Avec ces informations, il est ensuite possible de déterminer toutes les composantes des déformations.

Correli est un logiciel qui fonctionne dans l'environnement Matlab. Basé sur un algorithme de corrélation, il permet de déterminer le champ de déplacement de surfaces planes en utilisant une technique de corrélation d'images numériques. Cette technique consiste à apparier les points correspondants entre l'image d'une surface prise avant déformation et l'image de cette surface prise après déformation.

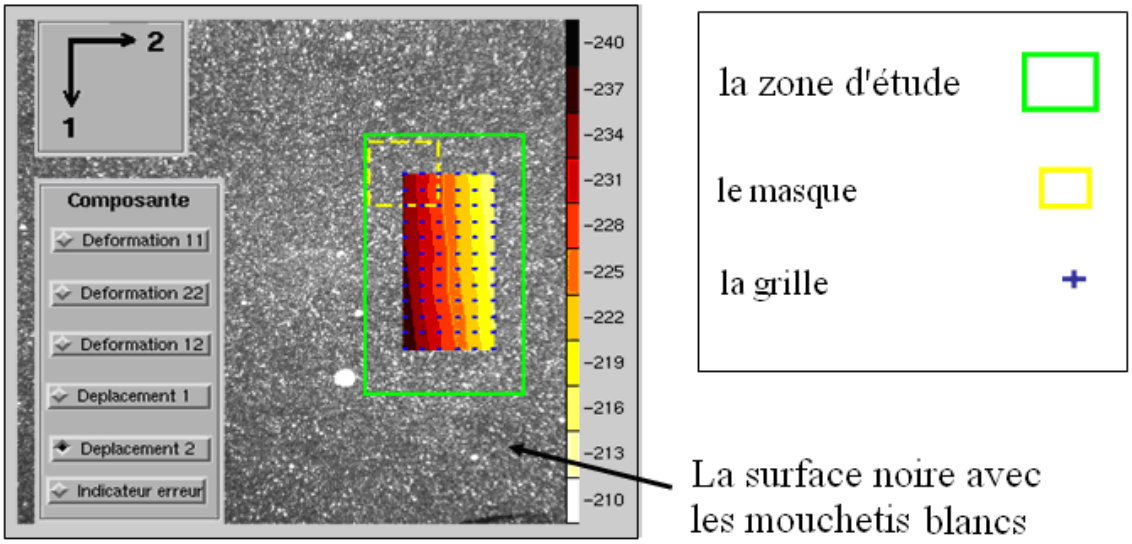


Figure V.6a : *Illustration des paramètres : zone d'étude, le masque et le pas des grilles*

Pour déterminer le champ de déplacement d'une image déformée par rapport à une image de référence, on doit choisir une zone d'étude correspondante sur chaque image (voir la figure V.6a). La procédure de corrélation d'images du logiciel consiste à retrouver dans la zone d'étude considérée la correspondance entre les points des deux images prises à des instants différents. On doit définir ensuite dans la zone d'étude considérée le pas de la grille qui s'étendra sur toute la zone et qui servira de repère pour comparer les deux images, ainsi que la taille du masque, dans lequel le logiciel cherchera les points. Le masque et la grille sont indépendants (voir la figure V.6b).

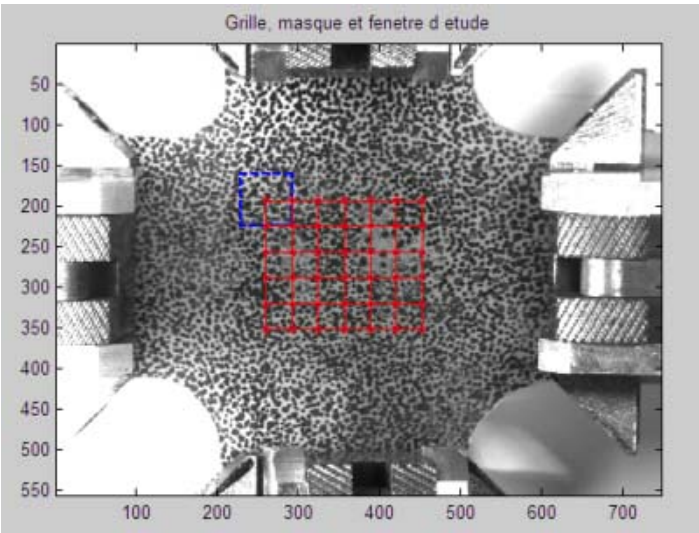


Figure V.6b : *La grille rouge a un pas de 32 pixels, et le masque bleu une taille de 64 pixels*

En utilisant les résultats obtenus par le logiciel (composante de déplacement horizontal δV) on peut calculer z. Et en connaissant les coordonnées (x, y, z) de tous les points, on peut reconstruire la forme de l'objet en 3D. Les petites différences de focale et le défaut de parallélisme entre les deux caméras induisent une rotation entre les deux images. Donc il apparaît qu'une opération de recalage est nécessaire (de manière à annuler δU) de plus un lissage est réalisée afin d'éliminer le « bruit » de la méthode de corrélation (voir la figure V.7). Cette opération est gérée en utilisant la méthode des moindres carrés pour l'évaluation du meilleur plan tangent dans la zone du voisinage du point étudié.

L'amplitude de cette zone est fixée par le paramètre t qui définit le nombre de cellules à prendre en compte dans les deux directions x et y autour du point étudié. Il convient de noter que la valeur de t est liée à la taille de la grille : le même t aura un effet différent sur le lissage sera différent si le pas de grille est grand ou faible.

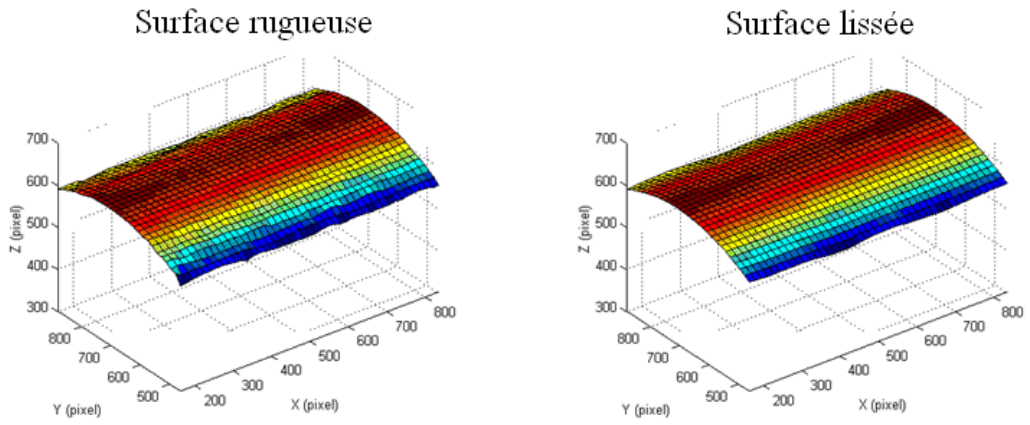


Figure V.7 : *Visualisation de la surface avant et après le lissage*

La section suivante permet de vérifier que la méthode reproduit vraiment la forme 3D de l'objet mesuré. On fera nos tests sur des objets de tailles comparables à celle de la bouteille et nous pourrons discuter le choix des paramètres.

V.2.3 Validation sur deux cas particuliers : le rayon d'un cylindre et la mesure d'un angle

Dans cette partie, on s'intéresse à la construction d'une surface 3D de deux images numériques et nous évaluons quantitativement l'exactitude de la méthode pour deux cas : un cylindre et d'un bloc (figure V.8) d'une taille comparable à celle d'une des bouteilles étudiées.

Figure V.8 : *Un cylindre et un bloc pour valider la construction d'une surface 3D*

V.2.3.a Valider les dimensions

On s'intéresse à la dimension caractéristique du cylindre : son rayon. Le rayon du cylindre est égal à 44.65 mm, la valeur de *a* (1/2 distance entre les caméras) est fixée à 100 mm et la valeur de *d* est de l'ordre de 2 m de sorte que l'angle entre les caméras n'excède pas 2α où α = 0.05 rad. Si α est plus grand, le déplacement apparent nécessite soit un développement géométrique plus complexe, ou une grande taille de masque (typiquement plus grand que le déplacement apparent maximal entre les deux images).

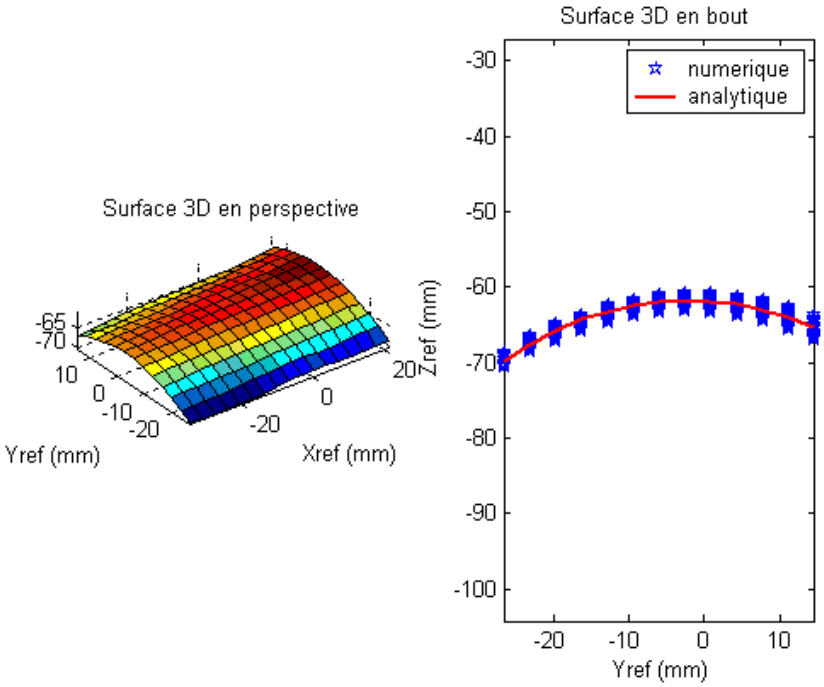


Figure V.9 : *Visualisation des surfaces du cylindre*

Dans ces conditions, la technique de stéréo corrélation appliquée au cylindre permet de déterminer le rayon du cylindre qui s'adapte au mieux aux points mesurés : cette optimisation se fait par la méthode de moindre carrée.

En comparaison du rayon mesuré sur la pièce et converti en pixel (447 pixel) *via* l'échelle de la photo, on peut avoir les résultats par analyse d'images dans la figure V.9.

Ce rayon varie bien sûr avec la valeur de *d* donnée (qui est délicate à mesurée et que l'on fixe à partir de l'étalonnage sur le bloc cylindrique) et le rayon du cylindre est obtenu pour d=1850 mm (voir la figure V.10). C'est la valeur qui prend en compte la focale des caméras et la position du point de référence de l'objet 3D. Le point de référence est celui pour lequel le déplacement apparent $\delta V = 0$ et cela définit l'origine *z*.

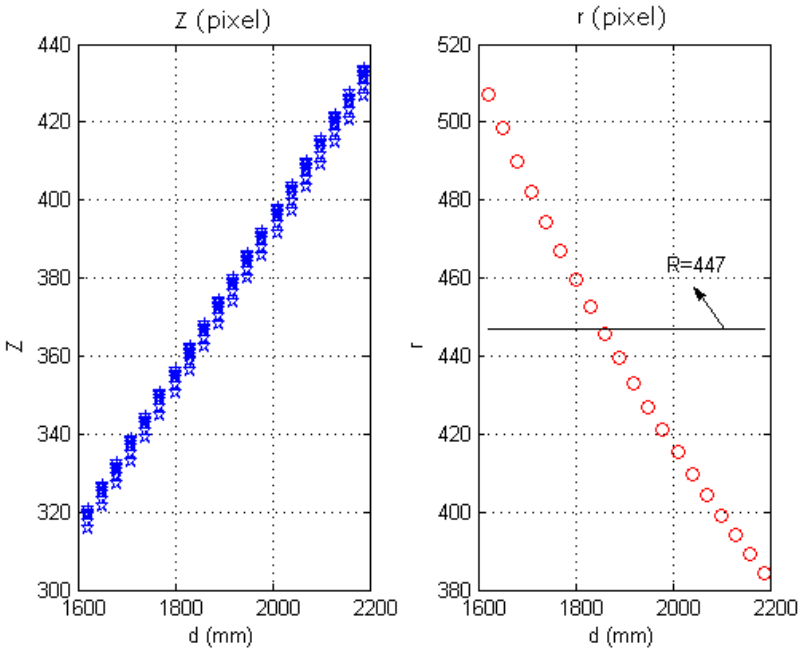


Figure V.10 : *Facteur 'd' de la transformation en 'Z'*

V.2.3.b Valider l'angle droit du bloc

Dans le cas du bloc, on est intéressé par la représentation précise d'un angle vif de 90°. Pour évaluer la capacité de la technique pour déterminer l'angle 90° entre les 2 côtés, nous utilisons la méthode des moindres carrés, une fois de plus, pour déterminer les équations des meilleurs plans. Le produit entre les coefficients des deux équations, qui doit être égal à -1si l'angle vaut 90° (voir la figure V.11) est calculé et comparé à l'objectif.

La précision de mesure de formes 3D par stéréovision dépend de 3 facteurs :
- la taille des masques *M*
- le pas entre masques *s*
- la taille de la zone de lissage *t*

Dans le cas étudié, la taille des masques nécessaire pour arriver à convergence est 128 pixel. Si on prend une taille plus petite (64 ou 32 pixel) dans cette zone, on voit mal la forme 3D ; elle est extrêmement perturbée quand la taille des masques est trop petite devant le déplacement mesuré. D'abord, quand la taille de masque *M* égale à 128 pixel, il apparaît que les meilleurs résultats sont obtenus quand le pas est petit (*S* environ 8 à 16 pixel) et le paramètre de lissage *t* est petit ($t = 2$). Dans cette condition, l'erreur sur la valeur d'angle est inférieur à 1° et "le rayon d'arrondi r" entre les côtés est moins de 3 mm sur un côté qui mesure 100 mm. Cette dernière précision sur la "netteté" d'un angle est directement liée aux facteurs de 'pas' et le paramètre de lissage t aussi influence de la "netteté" de l'angle, la plus petite valeur donne les meilleurs résultats. Ces paramètres semblent être aussi le meilleur choix pour la précision de dimension de cylindre.

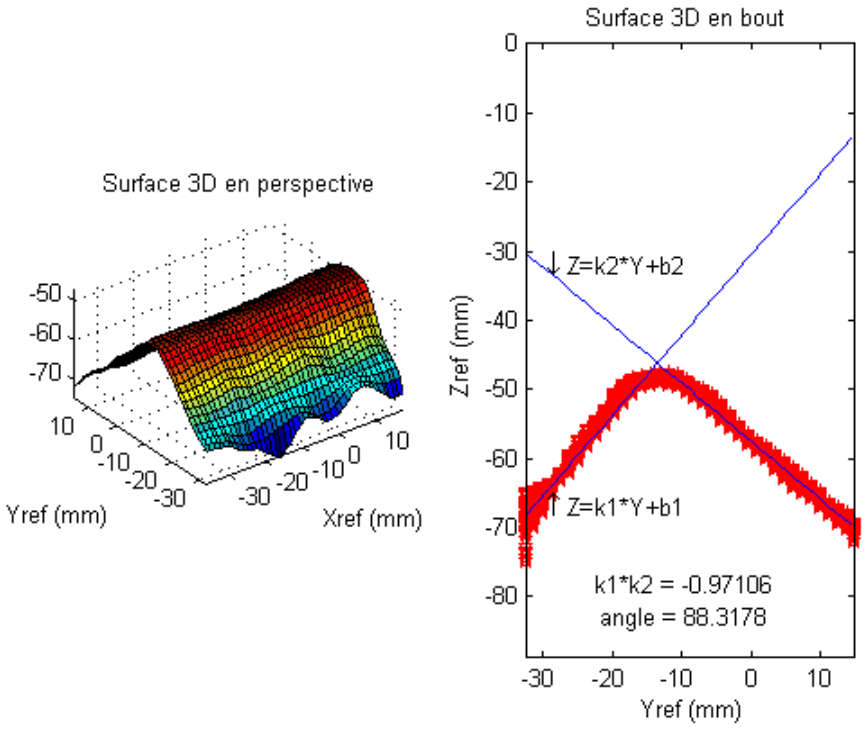


Figure V.11 : *Visualisation des surfaces du pavé*

A partir de ces deux validations, la mesure Correli permet de construire la surface 3D. On peut maintenant l'utiliser dans le fond de bouteille pour identifier le champ de déformation.

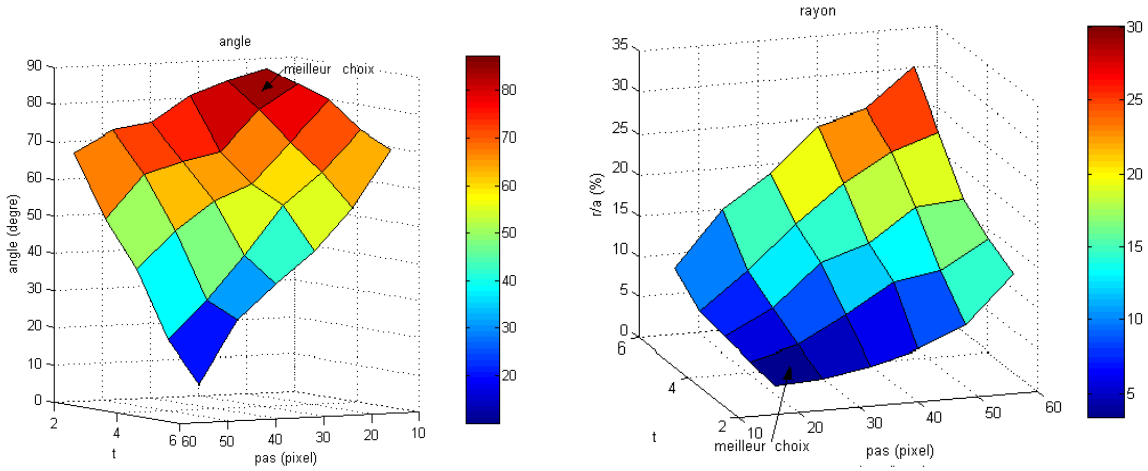
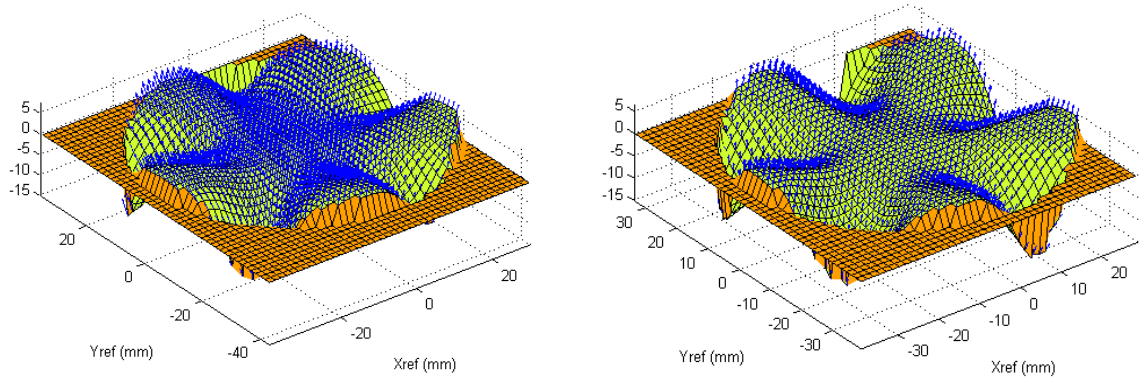


Figure V.12 : *Le meilleur choix des paramètres*

A partir de cet étalonnage et du choix optimal des paramètres (voir la figure V.12), la stéréo corrélation nous permet de construire la surface 3D du fond pétaloïde.

Ces paramètres ont été retenus pour la visualisation des fonds 3D. En comparant la surface initiale du fond avec la surface déformée du même fond sous une pression interne de 5 bar, on peut déterminer les composantes du déplacement (U, V, W) pour chaque point du fond. La Figure V.13 visualise la surface initiale et le champ de déplacement de la surface initiale et déformée, dans les fonds VE et VL.



(a) (b)

Figure V.13 : *La visualisation du champ de déplacement dans une zone circulaire autour du point d'injection (PI) du fond lorsque les bouteilles sont sous la pression interne, (a) fond VE ; (b) fond VL*

Dans la figure V.13a, le fond VE, on peut voir l'effet de la pression interne : point d'injection et pieds se déplacent ensemble dans la direction Z. C'est à dire qu'il y a une expansion globale de la bouteille due à la pression interne. Alors que pour le fond VL (la figure V.13b), on peut voir que le comportement sous la pression est totalement différent : les pieds se déplacent dans la direction Z tandis que le point d'injection ne se déplace pratiquement pas. La géométrie VL du fond conduit à un phénomène de flexion où chaque pied pivote autour du point d'injection, un peu comme si les pieds se repliaient vers l'axe de la bouteille.

Les deux fonds réagissent différemment à la pression. Pour autant, leurs performances à l'essai ESC sont-elles différentes à cause des différences de propriétés ou à cause de cette différence de cinématique des pieds ? Pour trancher cette question, nous allons coupler des calculs éléments finis de bouteille sous pression avec les résultats de mesures de déformation.

V.2.4 Évolution d'épaisseur

Des calculs par éléments finis sont faits avec le logiciel Patran à partir de fichier CAO fournit par Sidel. Un maillage de type coque est construit dans le module 'mesh'. Comme les épaisseurs sont variables dans le fond de la bouteille, on doit renseigner l'épaisseur de la coque au moment de sa création. Pour cela, des mesures d'épaisseur ont été réalisées avec un pied à coulisse sur les fonds le long des vallées et sur les pieds. Compte tenu de la faible différence entre l'évolution de l'épaisseur du coté pieds et du côté vallée, une même fonction d'interpolation est choisie pour décrire l'évolution de l'épaisseur suivant le rayon par rapport à l'axe longitudinal de la bouteille. Les deux fonctions qui permettent de modéliser l'évolution d'épaisseur dans les cas VE et VL (voir la figure V.14) s'écrivent :

Dans le cas VE :

$$\begin{aligned} &r < 2{,}5 \quad f(r) = 3{,}8 \\ &r \geq 2{,}5 \quad f(r) = 3{,}10 * \exp(-((r - 8{,}791)/12{,}23)^2) + 1{,}457 * \exp(-((r + 6{,}361\times10^4)/5{,}066\times10^4)^2) \end{aligned} \qquad \text{(V.2a)}$$

Dans le cas VL :

$$\begin{aligned} &r < 2{,}5 \quad f(r) = 3{,}54 \\ &r \geq 2{,}5 \quad f(r) = 3{,}197 * \exp(-((r - 9{,}055)/15{,}43)^2) + 3{,}07 * \exp(-((r + 9{,}9\times10^4)/6{,}628\times10^4)^2) \end{aligned} \qquad \text{(V.2b)}$$

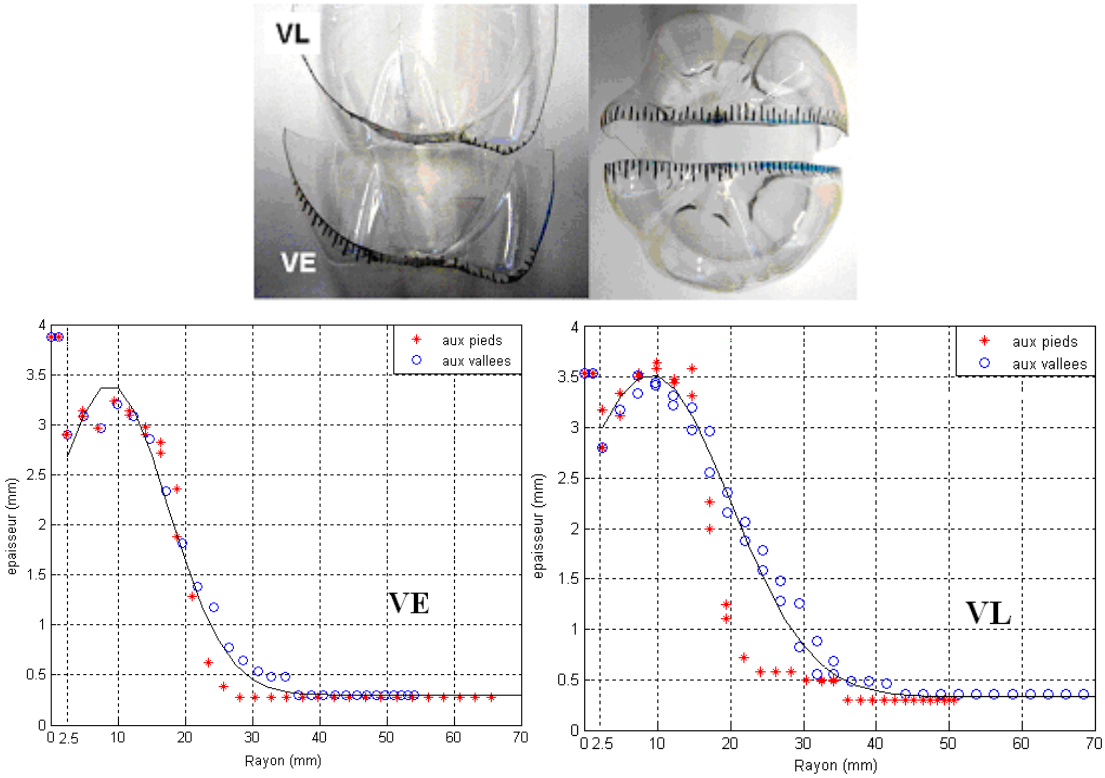


Figure V.14 : *Evolution de l'épaisseur*

V.3 Détermination numérique des déformations et des contraintes

V.3.1 Détermination du champ de déformation

V.3.1.a Calcul du champ de déformation membranaire

L'étape de construction de la surface 3D permet de déterminer la coordonnée z pour chaque point de la surface projetée dans le plan $\left(\vec{x},\vec{y}\right)$: la technique utilisée pour la détermination du déplacement des points d'une surface du type z = f(x,y) consiste à compléter les composantes U, V par la composante W obtenue par comparaison des coordonnées z de la surface déformée avec celle de la surface initiale. Puisque toutes ces fonctions dépendent des coordonnées x et y des images initiales, on peut calculer les tenseur des déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}_{3D}$ par :

$$\begin{aligned} &\varepsilon_{XX} = \frac{\partial U}{\partial x}; \varepsilon_{YY} = \frac{\partial V}{\partial y}; \varepsilon_{ZZ} = 0 \\ &\varepsilon_{XY} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x}\right); \varepsilon_{XZ} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right); \varepsilon_{YZ} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial W}{\partial y}\right) \end{aligned} \qquad \text{(V.3)}$$

Pour en déduire les déformations de membranes, c'est-à-dire les déformations dans la surface, on fait la projection des composantes de la matrice des déformations 3D ci-dessus, dans le plan tangent à la surface au point M. Pour cela il est nécessaire de construire en chaque point M de la surface, un repère local $\left(M,\vec{n},\vec{t},\vec{s}\right)$. Les paragraphes qui suivent rappellent les différentes étapes de cette construction ainsi que les relations qui en découlent.

Considérons la figure V.15 qui donne une représentation du problème : on cherche à connaître les composantes des vecteurs qui forment le plan tangent à la surface en M. Les coordonnées de M sont x, y et z dans le repère où $\vec{Z}$ est l'axe suivant lequel on mesure la « profondeur » de

la surface. $\vec{t_x}$ et $\vec{t_y}$ sont les deux vecteurs du plan tangent qui se projettent respectivement en $\vec{X}$ et $\vec{Y}$. Ces deux vecteurs permettent de calculer le vecteur normal $\vec{n}$ au plan tangent.

Si la surface est définie par les coordonnées x, y et $z = f(x, y)$ des points qui constituent sa surface moyenne. Si on considère la courbe C_x tracée sur la surface, définie par y = constante et passant par le point M, on peut exprimer le vecteur tangent $\vec{t_x}$ par :

$$\vec{t_x} = \frac{\partial \overrightarrow{OM}}{\partial s_x} \tag{V.4}$$

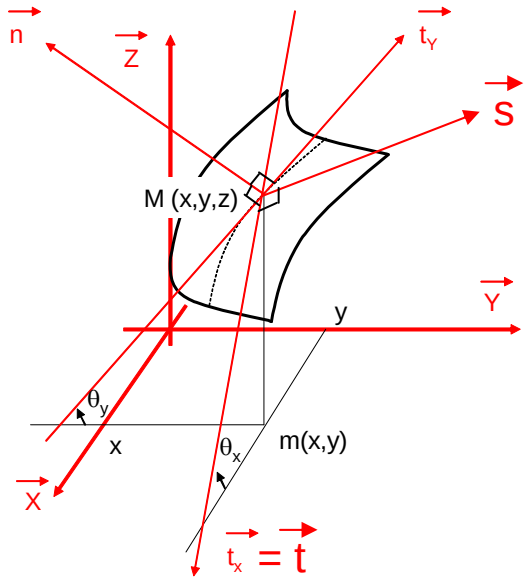


Figure V.15 : *La géométrie de la surface (a)*

où s_x est l'abscisse curviligne de C_x telle que :

$$ds_x = dx\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2} \tag{V.5}$$

Sous une forme plus développée :

$$\vec{t_x} = \frac{\partial \overrightarrow{OM}}{\partial s_x} = \frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2}}\vec{X} + \frac{\frac{\partial f}{\partial x}}{\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2}}\vec{Z} = \cos\theta_x \vec{X} - \sin\theta_x \vec{Z} \tag{V.6}$$

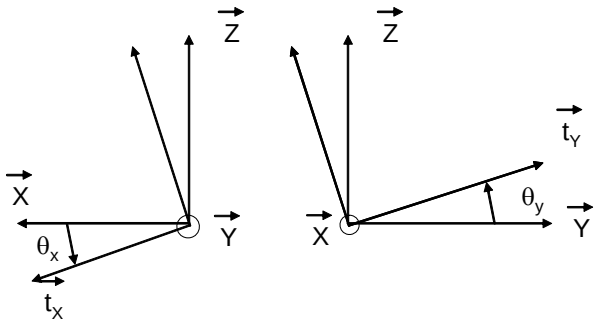


Figure V.15 : *La géométrie de la surface(b)*

De la même manière en parcourant une courbe C_y définie par x=constante, on peut définir le vecteur $\vec{t_y}$:

$$\vec{t_y} = \frac{\partial \overrightarrow{OM}}{\partial s_y} = \frac{1}{\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}}\vec{Y} + \frac{\frac{\partial f}{\partial y}}{\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2}}\vec{Z} = \cos\theta_y \vec{Y} + \sin\theta_y \vec{Z} \qquad \text{(V.7)}$$

Remarque : sauf configuration exceptionnelle, $\vec{t_x}$ et $\vec{t_y}$ ne sont pas deux vecteurs orthogonaux. Néanmoins, comme ils appartiennent tous les deux au plan tangent et qu'ils ne sont pas égaux, on peut calculer $\vec{n}$ en faisant :

$$\vec{n} = \frac{\vec{t_x} \wedge \vec{t_y}}{\left\|\vec{t_x} \wedge \vec{t_y}\right\|} = \frac{1}{\cos^2\theta_x + \sin^2\theta_x \cos^2\theta_y}\begin{bmatrix} \sin\theta_x \cos\theta_y \\ -\cos\theta_x \sin\theta_y \\ \cos\theta_x \cos\theta_y \end{bmatrix} \qquad \text{(V.8)}$$

Par la suite, si on privilégie la direction $\vec{t_x} = \vec{t}$ par exemple, on construit une base orthonormée liée à la surface en complétant les axes $\vec{n}$ et $\vec{t}$ par un second vecteur du plan tangent $\vec{s}$:

$$\vec{s} = \vec{n} \wedge \vec{t} = \frac{1}{\cos^2\theta_x + \sin^2\theta_x \cos^2\theta_y}\begin{bmatrix} \cos\theta_x \sin\theta_x \sin\theta_y \\ \cos\theta_y \\ \cos^2\theta_x \sin\theta_y \end{bmatrix} \qquad \text{(V.9)}$$

La connaissance des angles θ_x et θ_y en chaque point de la surface permet la détermination des coordonnées des 3 vecteurs de la base locale $\left(\vec{t}, \vec{s}, \vec{n}\right)$:

$$\vec{t} = \begin{bmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{bmatrix}; \vec{s} = \begin{bmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{bmatrix}; \vec{n} = \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{bmatrix} \qquad \text{(V.10)}$$

Compte tenu du choix fait, la composante t_y est nulle ici.

Le calcul des déformations membranaires $\underline{\varepsilon}_{2D}$ se fait par projection de la matrice de déformation tridimensionnelle $\underline{\varepsilon}_{3D}$ dans le plan tangent. En effet, si on considère un vecteur $\overrightarrow{dl_0}$ qui caractérise le voisinage du point M dans la position repos (position 0), il se transforme en vecteur $\overrightarrow{dl}$ dans la configuration déformée. La variation de longueur de ce vecteur quelconque du plan tangent définit la déformation membranaire par :

$$\delta(dl^2) = 2\overrightarrow{dl_0}^T . \underline{\underline{\varepsilon}}_{(2D)} . \overrightarrow{dl_0} \qquad \text{(V.11)}$$

Ce qui se développe :

$$
\begin{aligned}
\delta(dl^2) &= \delta(\overrightarrow{dl}^T.\overrightarrow{dl}) \\
&= \overrightarrow{dl_0}^T.\delta(\overrightarrow{dl}) + \delta(\overrightarrow{dl}^T).\overrightarrow{dl_0} \\
&= \overrightarrow{dl_0}^T.\Pi\overrightarrow{dU} + \overrightarrow{dU}^T\Pi^T.\overrightarrow{dl_0} \\
&= \overrightarrow{dl_0}^T.\Pi\overline{\overline{\text{grad}}}\overrightarrow{U}\Pi^T.\overrightarrow{dl_0} + \overrightarrow{dl_0}^T\Pi.\overline{\overline{\text{grad}}}^T\overrightarrow{U}\Pi^T.\overrightarrow{dl}_0 \\
&= \overrightarrow{dl_0}^T.\Pi\left(\overline{\overline{\text{grad}}}\overrightarrow{U} + \overline{\overline{\text{grad}}}^T\overrightarrow{U}\right)\Pi^T.\overrightarrow{dl_0} \\
&= 2\overrightarrow{dl_0}^T.\Pi\underline{\underline{\varepsilon}}_{(3D)}\Pi^T.\overrightarrow{dl_0}
\end{aligned}
\tag{V.12}
$$

où Π est l'opérateur de projection. Par identification, on en tire :

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_{(2D)} = \Pi\ \underline{\underline{\varepsilon}}_{(3D)}\ \Pi^T \tag{V.13}$$

L'opérateur de projection s'écrit :

$$\Pi = \begin{pmatrix} t_x & t_y & t_z \\ s_x & s_y & s_z \end{pmatrix} \tag{V.14}$$

On en déduit donc les composantes $\varepsilon_{tt}, \varepsilon_{ss}, \varepsilon_{ts}$ de $\underline{\underline{\varepsilon}}_{(2D)}$ par les relations suivantes :

$$\varepsilon_{tt} = \varepsilon_{xx}t_x^{\ 2} + \varepsilon_{yy}t_y^{\ 2} + 2\varepsilon_{xy}t_xt_y + 2\varepsilon_{xz}t_xt_z + 2\varepsilon_{yz}t_yt_z \tag{V.15}$$

$$\varepsilon_{ss} = \varepsilon_{xx}s_x^{\ 2} + \varepsilon_{yy}s_y^{\ 2} + 2\varepsilon_{xy}s_xs_y + 2\varepsilon_{xz}s_xs_z + 2\varepsilon_{yz}s_ys_z \tag{V.16}$$

$$\varepsilon_{ts} = \varepsilon_{xx}s_xt_x + \varepsilon_{yy}s_yt_y + \varepsilon_{xy}\left(s_xt_y + s_yt_x\right) + \varepsilon_{xz}\left(s_xt_z + s_zt_x\right) + \varepsilon_{yz}\left(s_yt_z + s_zt_y\right) \tag{V.17}$$

V.3.1.b Application aux fonds de bouteilles

En utilisant la stéréo corrélation comme présentée dans les sections précédentes, on détermine le champ de déformation sur la peau extérieure du fond de bouteille sous une pression de 5 bar. On définit une grille d'étude rectangulaire plus grande que le diamètre extérieur de la bouteille et on ne traite que les points situés dans la zone d'étude circulaire pour le tracé des surfaces et le calcul des déformations (voir figure V.16).

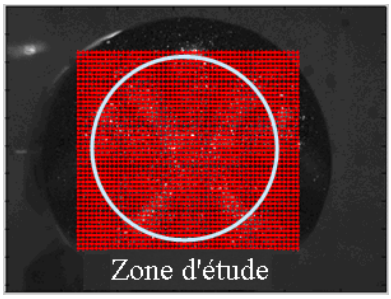


Figure V.16 : *Zone d'étude*

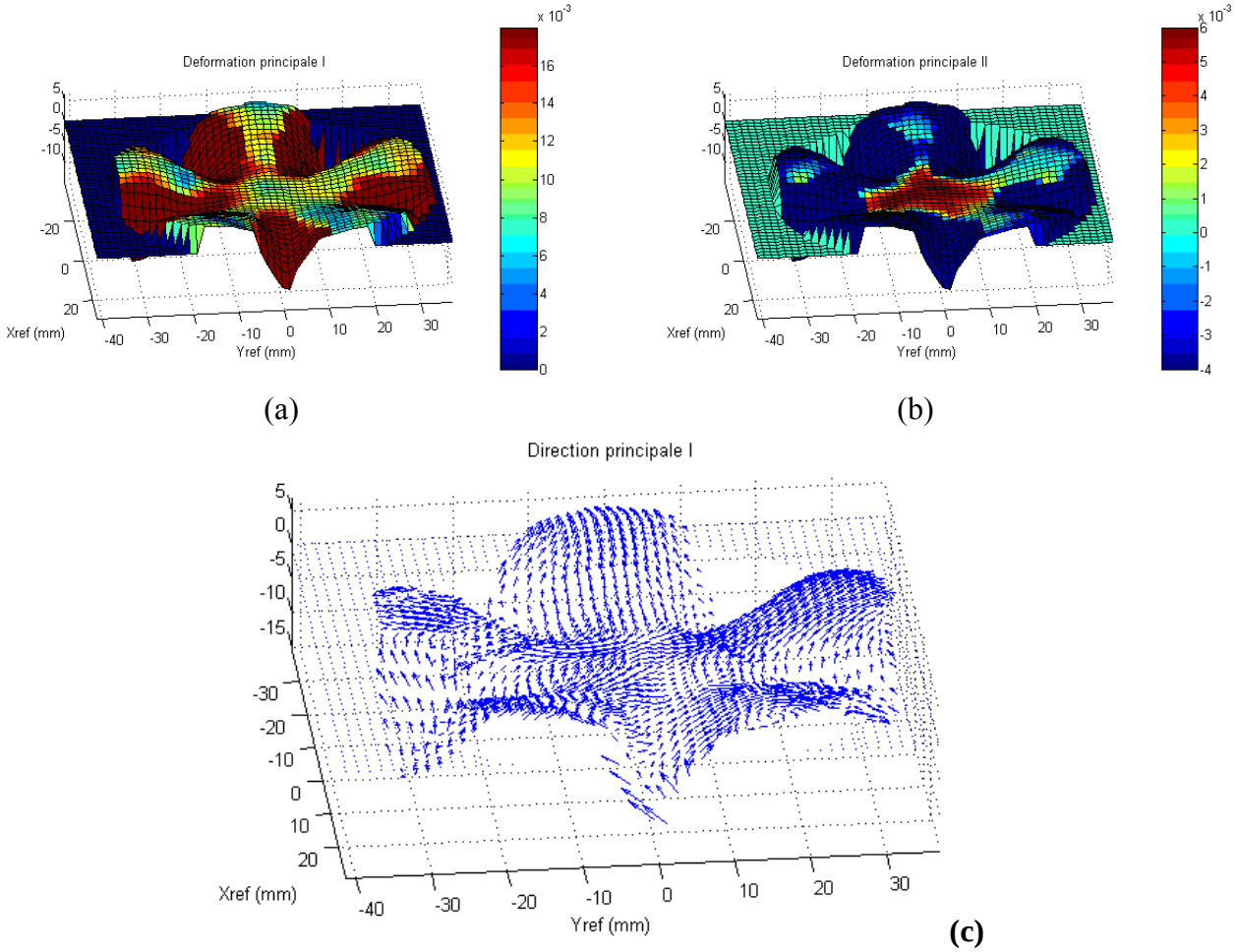
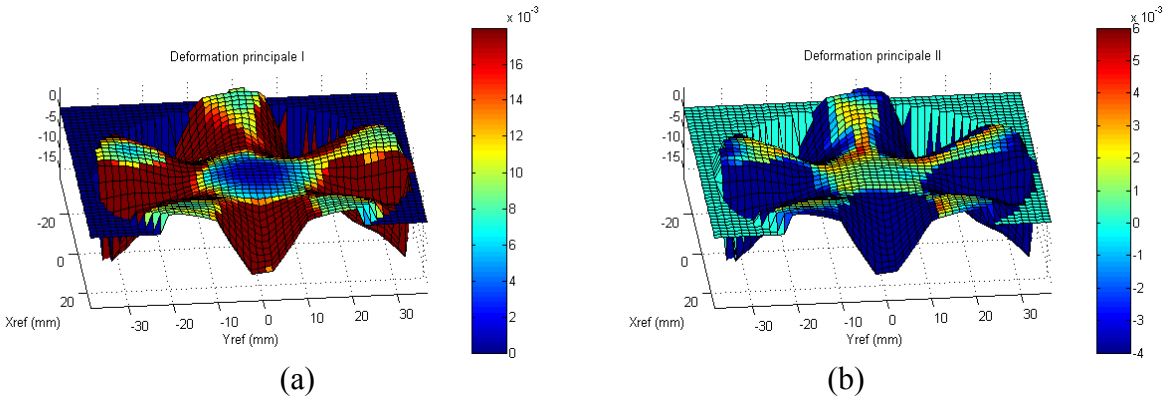
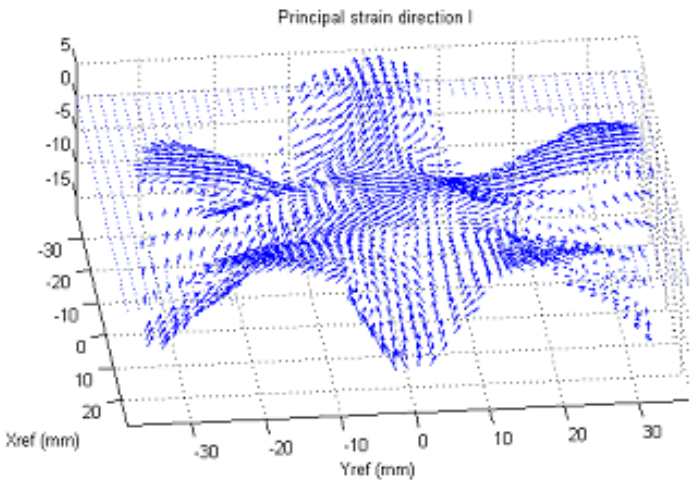


Figure V.17 : (a) *Les déformations principales I ; (b) les déformations principales II ; (c) la direction principale 1 sous pression 5 bar du fond VE*





(c)

Figure V.18 : (a) *Les déformations principales I ; (b) les déformations principales II ; (c) la direction principale 1 sous pression 5 bar du fond VL*

On voit que pour deux géométries différentes de fonds pétaloïdes (VE et VL), les champs de déformations ne sont pas identiques. La figure V.17, pour le fond VE, montre que la déformation principale ε_1 vaut presque 0,6 % dans la zone du point d'injection (PI), elle atteint 1 % dans les pieds et augmente plus vite (supérieure à 1,8 %) dans les vallées. ε_2 est positive autour du point d'injection et négative dans les autres zones, notamment dans les vallées. La figure V.18 nous montre le même phénomène dans le fond VL.

On peut constater que ε_1 et ε_2 au PI sont plus faibles dans le cas VL que dans le cas VE. L'écart entre les valeurs dans les pieds et dans les vallées est plus grand dans le cas VL que dans le cas VE. Sur la figure V.17, on a aussi tracé les directions principales pour le cas VE. Dans les vallées, l'étirage radial est la déformation principale la plus importante. Sur les flancs, les directions principales sont perpendiculaires à la ligne de plus grande pente. Dans les pieds, les déformations sont plus fortes dans le sens radial. On retrouve les mêmes propriétés dans le cas VL.

Sur la figure V.19, nous nous concentrons autour de la zone du PI où l'état de contrainte est quasi biaxial : ε_{xx} (points cercles) et ε_{yy} (points étoiles) sont pratiquement égaux. On peut voir que le comportement du fond VE est quasi linéaire sous la pression interne de 0 à 5 bar. Lorsque la pression augmente au delà de 5 bar, le comportement n'est plus élastique. Pour le fond VL, le comportement est non-linéaire. C'est a priori, un effet géométrique. La géométrie des pieds conduit à un premier effet de flexion lorsque les pieds se rejoignent vers l'axe de la bouteille. Ceci induit une compression sur la peau extérieure de la surface de la bouteille. Puis, lorsque la pression augmente, le gonflage de la bouteille a un effet opposé, et la déformation devient positive. On peut également remarquer que, pour la même pression (5 bars), le niveau de la déformation est environ six fois plus faible pour les VL que pour VE. C'est une différence importante qui peut être mise en relation avec la meilleure tenue des bases VL dans les essais ESC.

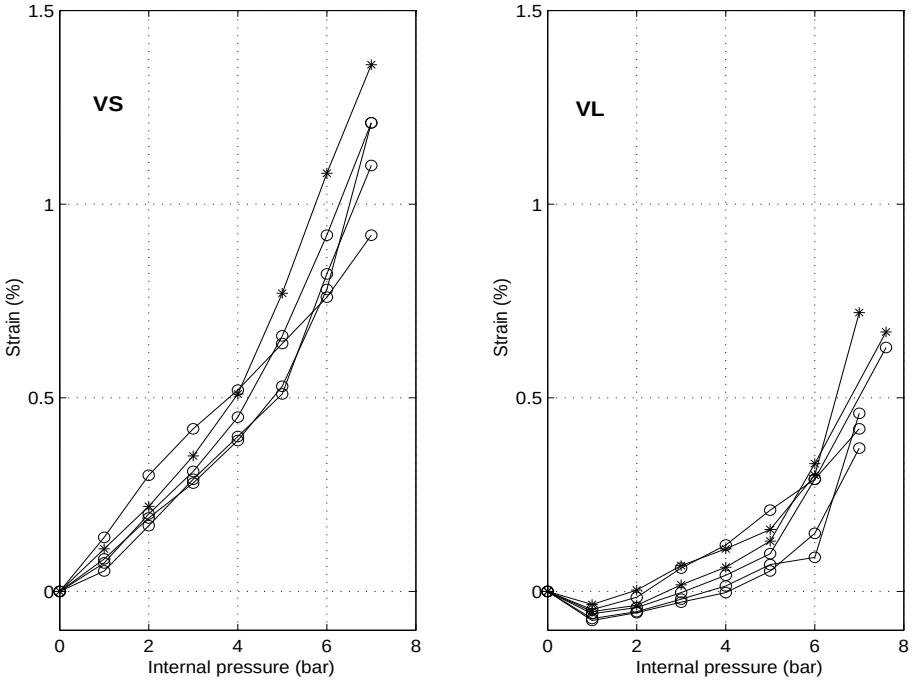


Figure V.19 : *L'évolution de la déformation sous la pression au PI , ε_{xx} (points cercles) et ε_{yy} (points étoiles), gauche, fond VE ; droite, fond VL*

V.3.2 Calcul par éléments finis des fonds de bouteille

Pour initier le processus d'identification, nous supposons que le champ des contraintes dépend plus de la pression interne imposée que de la nature anisotrope du comportement élastique. Cette hypothèse est valable dans une zone régulière comme la partie cylindrique de la bouteille où les contraintes circonférentielles et longitudinales sont liés à la pression interne P par les relations $\sigma_\theta = PR/e$ and $\sigma_z = PR/2e$, où R est le rayon du cylindre et e est l'épaisseur. Ce devrait être différent dans la région où la géométrie est plus compliquée, mais, comme le champ de contraintes est directement liée à la pression interne, nous pensons obtenir une bonne évaluation du champ de contraintes.

La simulation numérique par éléments finis du problème mécanique est effectuée avec les logiciels Patran-Nastran. On utilise des éléments de coques élastiques à 3 nœuds. Toute la bouteille est maillée avec ces éléments (voir la figure V.20). Pour le calcul, le module de Young est supposé uniforme et égal à 1200 MPa, le coefficient de poisson égal à 0,38 [CHE 99]. Le chargement est imposé via une pression interne et à l'instar du problème de cylindre sous pression, nous supposons que la distribution des contraintes ne dépend que de la pression et de la géométrie mais non du module. Un comportement homogène isotrope élastique est utilisé pour cette estimation des contraintes. L'épaisseur du modèle suit la loi identifiée lors des mesures.

Les contraintes principales dans le fond VE sont représentées dans la figure V.21.

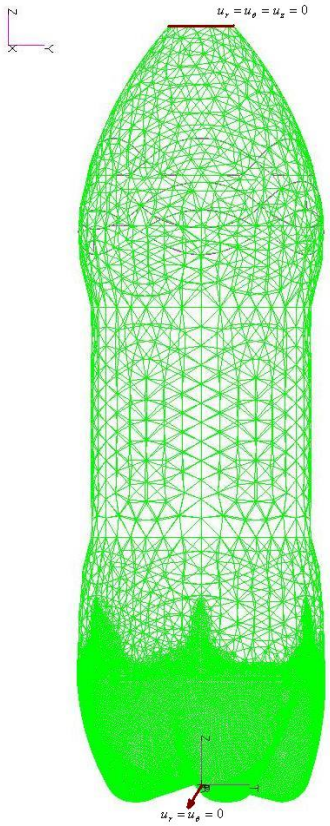


Figure V.20 : *Maillage de la bouteille avec 48567 nœuds*

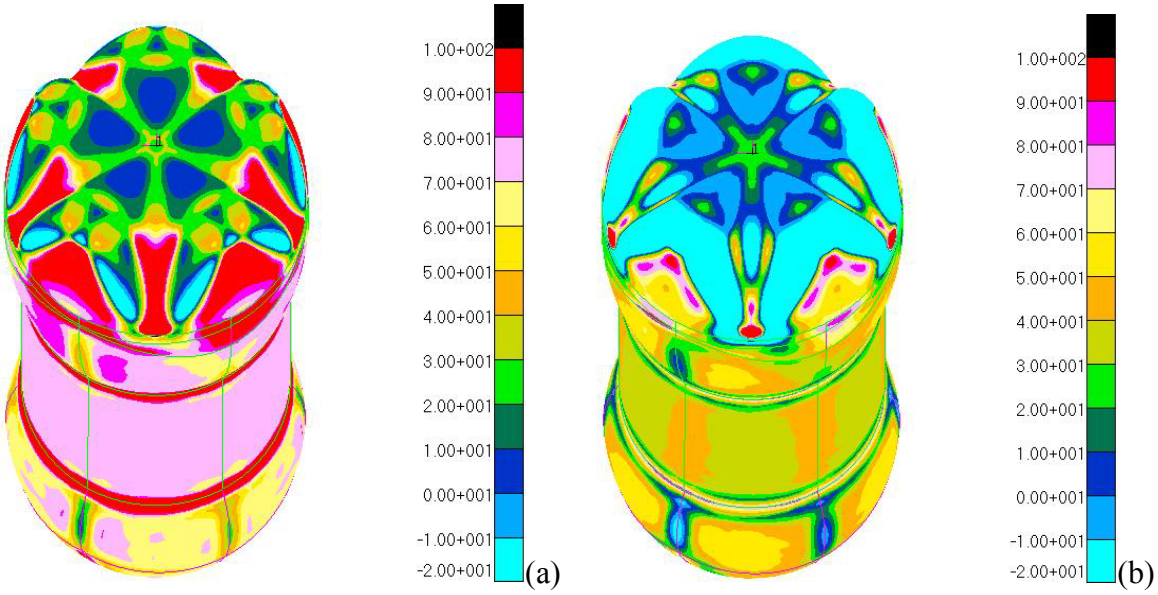
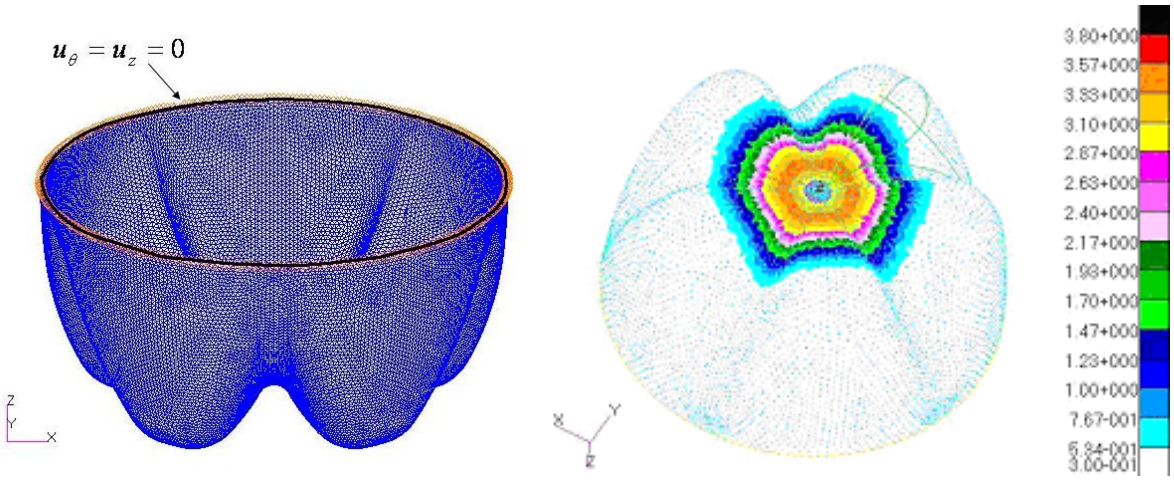


Figure V.21 : *Résultats des simulations numériques de la bouteille, (a) les contraintes principales maximales σ_1 ; (b) les minimales σ_2*

La simulation sur la bouteille entière est assez coûteuse. Dans la suite, on se focalise sur le fond pétaloïde. 24000 nœuds sont utilisés pour la simulation numérique (Figure V.22). On impose des conditions en déplacement $u_\theta = u_z = 0$ sur le cercle supérieur du fond de bouteille (quand z est maximum), la pression est égale à 5 bar (même condition que pour les mesures par stéréo corrélation). La figure V.22b montre la mise en œuvre de l'évolution de l'épaisseur sur le fond. Une loi de comportement élastique homogène, isotrope (E = 1200

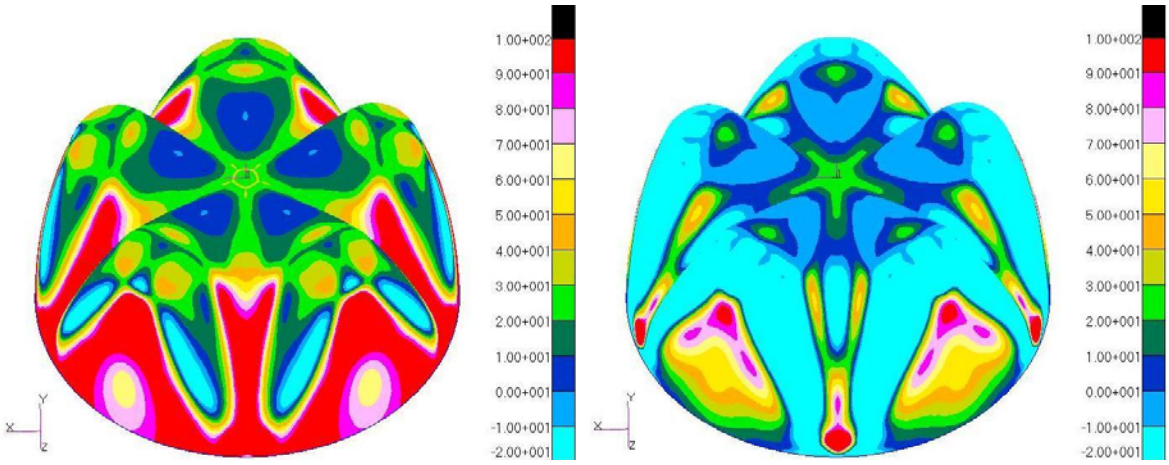
MPa et υ = 0,38) a été utilisée pour ces calculs.



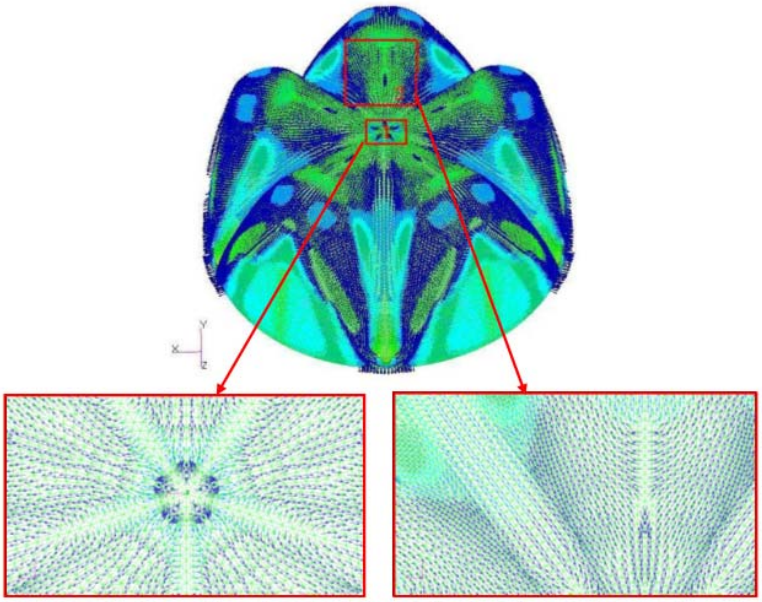
(a) (b)

Figure V.22 : *Maillage du fond pétaloïde avec 24000 nœuds. (a) Les conditions aux limites* $u_\theta = u_z = 0$ *imposées sur le cercle supérieur. (b) Visualisation de l'évolution d'épaisseur*

Les contraintes principales maximales σ_1 et les contraintes principales minimales σ_1 sont représentés dans la Figure V.13a et 13b, les deux sont en tension sur la surface extérieure de la bouteille. On peut comparer la direction principale I (Figure V.23c) liée avec les contraintes avec la direction principale I liée avec les déformations (Figure V.17c) : cette direction est radiale dans la vallée et presque partout sur les pieds. Nous pouvons remarquer quelques différences sur les bords des pieds et aussi le long de l'axe de symétrie des pieds, où la direction principale I devient circonférentielle. Cela peut causer des difficultés pour l'identification.



(a) (b)



(c)

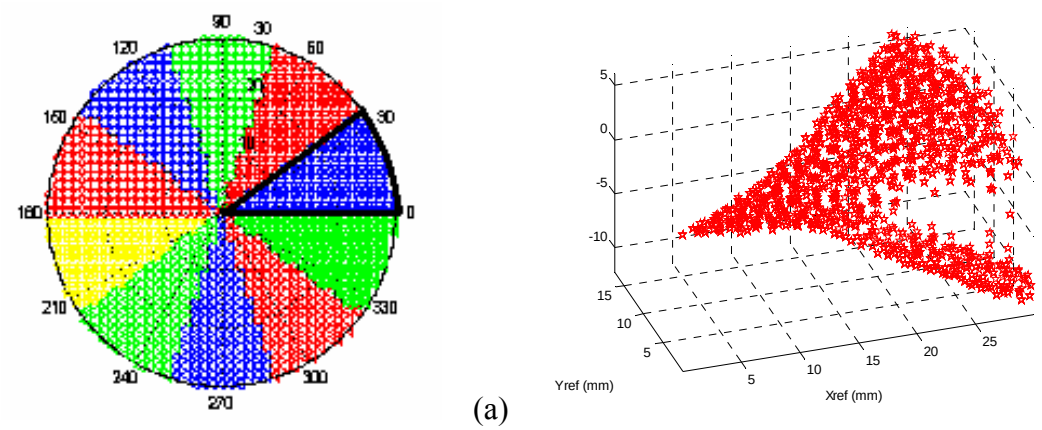
Figure V.23 : *Résultats des simulations numériques au cas VE, (a) les contraintes principales maximales σ_1 ; (b) les minimales σ_2 dans la peau extérieure du fond ; (c) la direction principale I*

V.4 Résultats et discussion

V.4.1 Post-traitement pour le champ de déformations

Les contraintes obtenues par éléments finis respectent parfaitement la symétrie de part et d'autre des pieds et est parfaitement reproduite sur les 5 pieds. Ce n'est pas tout à fait le cas des résultats expérimentaux. L'identification des propriétés peut être réalisée si l'on effectue un post-traitement pour la symétrisation et un lissage sur le champ de déformations. A partir des résultats illustrés dans la figure V.17, la surface du fond est divisée en 10 parties identiques, chaque partie contient 1/2 pied et 1/2 de la vallée (voir la figure V.24a). On superpose toutes les données sur une partie et ensuite nous nous concentrons sur cette partie représentative (voir la figure V.24b).

La méthode des moindres carrés est appliquée pour identifier une évolution de fonction d'interpolation pour cette surface. La figure V.25 montre les déformations lissées sur cette partie 3D. La figure V.26 représente une surface parfaitement symétrique est reconstruite par réflexion et rotation de cette partie. De la même manière, le champ de déformation principale parfaitement lisse et symétrique est reconstruit (voir la figure V.27).



(a) (b)

Figure V.24 : *La symétrisation des déformations principales, (a) le fond décompose en 10 parties identiques ; (b) les données sur cette partie représentative*

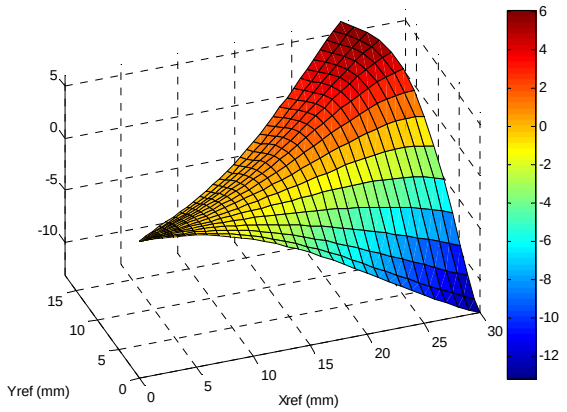


Figure V.25 : *Le champ de déformations sur la 1/10 surface après le lissage*

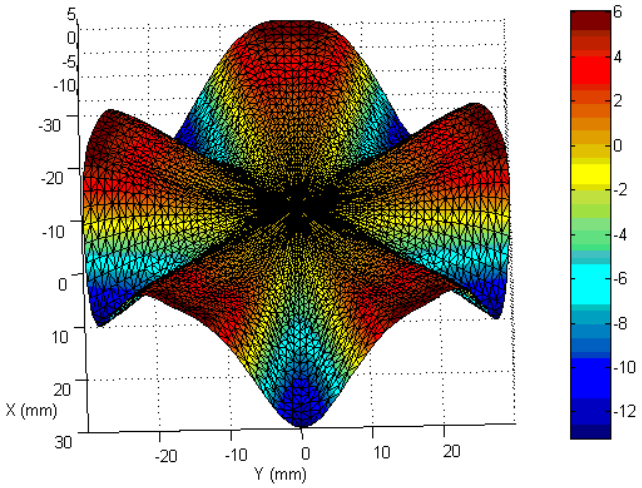
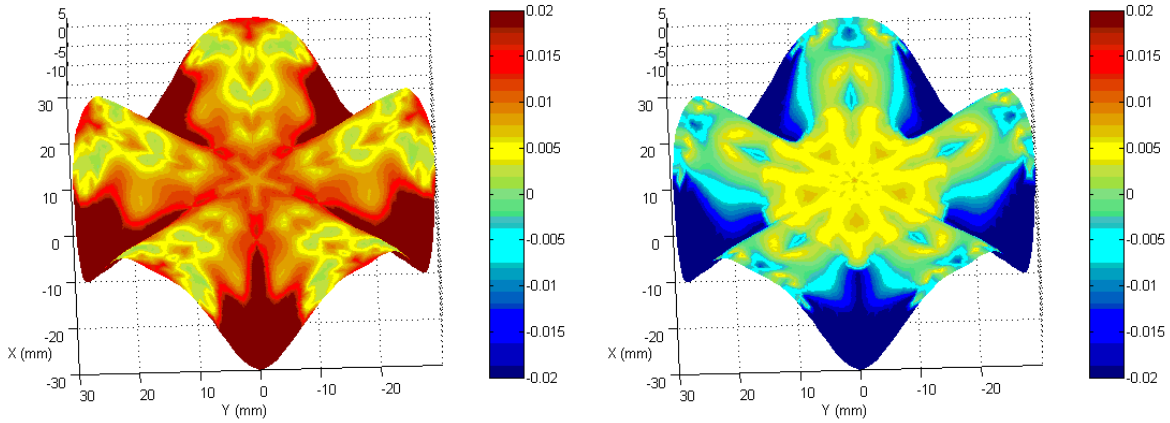


Figure V.26 : *Une surface du fond parfaitement symétrique*



(a) (b)

Figure V.27 : *(a) Déformation principale I du fond VE après le post-traitement ; (b) Déformation principale II du fond VE après le post-traitement*

V.4.2 Principe de l'identification

Par stéréo corrélation, nous avons déterminé les déformations principales membranaires ε_1 et ε_2 associées aux deux directions principales $\vec{k_1}$ et $\vec{k_2}$ du plan tangent à la surface extérieure de la bouteille sous pression. Par éléments finis, nous avons déterminé les contraintes principales σ_1 et σ_2 associées aux deux mêmes directions principales $\vec{k_1}$ et $\vec{k_2}$. L'angle entre les directions principales et les directions d'orthotropie du matériau est noté φ (voir la figure V.28).

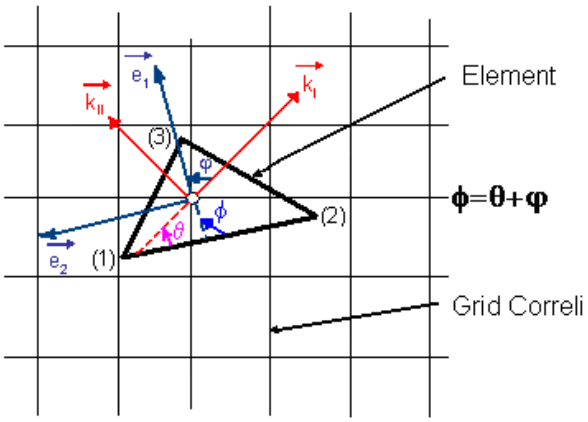


Figure V.28 : *Les directions principales et les directions d'orthotropie*

On peut donc écrire les déformations et les contraintes dans le repère d'orthotropie à partir des déformations principales I, II et des contraintes principales I, II :

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_I \cos^2\varphi + \varepsilon_{II}\sin^2\varphi & \sigma_1 &= \sigma_I \cos^2\varphi + \sigma_{II}\sin^2\varphi \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_I \sin^2\varphi + \varepsilon_{II}\cos^2\varphi \ , & \sigma_2 &= \sigma_I \sin^2\varphi + \sigma_{II}\cos^2\varphi \\ \gamma_{12} &= 2(\varepsilon_{II} - \varepsilon_I)\cos\varphi\sin\varphi & \tau_{12} &= 2(\sigma_{II} - \sigma_I)\cos\varphi\sin\varphi \end{aligned} \qquad \text{(V.18)}$$

Pour identifier le comportement élastique orthotrope il convient donc de déterminer les 6 caractéristiques E_1, E_2, υ_{12}, υ_{21},G, φ à partir des équation V.18 et V.19 :

$$\varepsilon_1 = \frac{\sigma_1}{E_1} - \frac{\upsilon_{21}\sigma_2}{E_2}$$
$$\varepsilon_2 = \frac{\sigma_2}{E_2} - \frac{\upsilon_{12}\sigma_1}{E_1} \qquad avec: \quad \frac{\upsilon_{12}}{E_1} = \frac{\upsilon_{21}}{E_2} \tag{V.19}$$
$$\gamma_{12} = \frac{\tau_{12}}{G}$$

Il n'y a que 4 équations pour 6 paramètres. Pour chaque point M étudié (figure V.29), nous prenons en compte les relations du voisinage de ce point. L'amplitude du voisinage est fixée par le paramètre T. Pour T=1, on peut obtenir 36 équations et utiliser la méthode des moindres carrés pour identifier les 6 caractéristiques E_1, E_2, υ_{12}, υ_{21},G, φ.

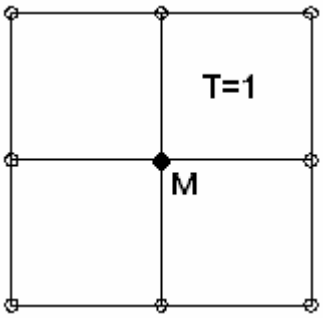
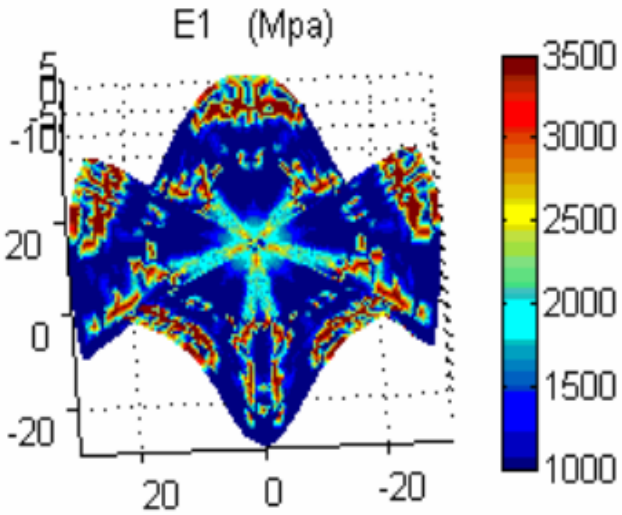


Figure V.29 : *Identification sur le point M et la taille du voisinage de ce point T*

La figure V.30 nous montre que E_1 et E_2 n'évoluent pas de la même façon : le comportement est orthotrope. E_1 et E_2 sont faibles et presque égaux dans les vallées : le matériau reste isotrope et amorphe dans ces zones. E_1 augmente sur les pieds mais pas E_2 : l'étirage durant le soufflage semble être plutôt uni axial et, compte tenu de la 1ère direction principale, plutôt radial sur les pieds.



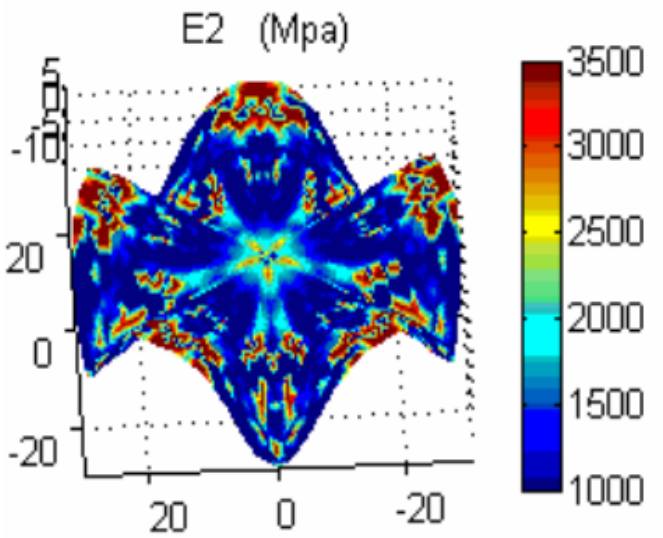


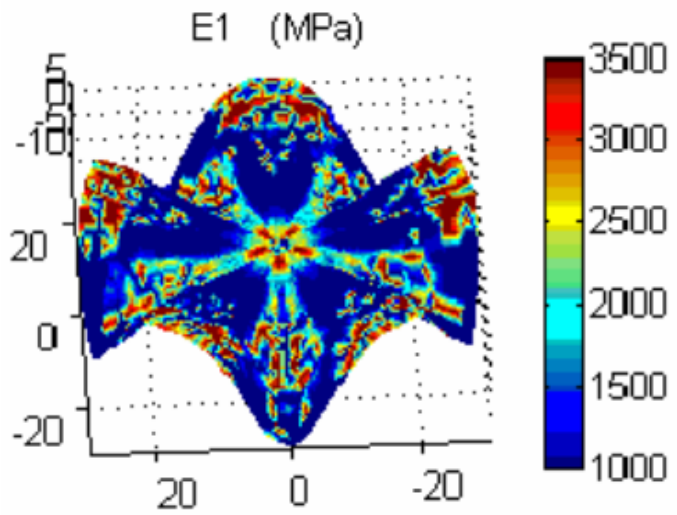
Figure V.30 : *Module de Young E_1 et E_2 du fond de VE*

On peut conclure que le renforcement ne se fait pas de la même façon dans les deux directions. E_1 et E_2 sont quasi identiques au point d'injection (PI) : à cet endroit l'étirage est bi axial équilibré et comme l'épaisseur est grande, le PET n'est pas orienté et on s'attend à avoir $E_1 = E_2 = 1900$ MPa.

V.4.3 Procédure d'identification des propriétés orthotropes

Pour valider l'hypothèse sur les contrainte qui dépendent peu du choix d'une élasticité isotrope pour le calcul par éléments finis, on réinjecte les propriétés identifiées dans le modèle éléments finis. On réalise un nouveaux calcul éléments finis avec cette fois des propriétés orthotropes et par le même processus, on identifie le nouveau champ de modules E_1 et E_2. On itère 50 fois ce processus : calculs des contraintes et identifications des modules E_i (voir figure V.31).

Sur la figure V.32, on peut voir que dès la première itération (calcul isotrope), les E_i sont quasiment identifiés. Un calcul isotrope à pression imposée donne donc bien les contraintes et des E_i proches de ceux déterminés par un calcul orthotrope. Les valeurs E_i au PI, malgré les petites oscillations, converge après très peu d'itération. Le tableau V.2 montre les valeurs de modules E_i du fond VE de la première identification et après 50 itérations.



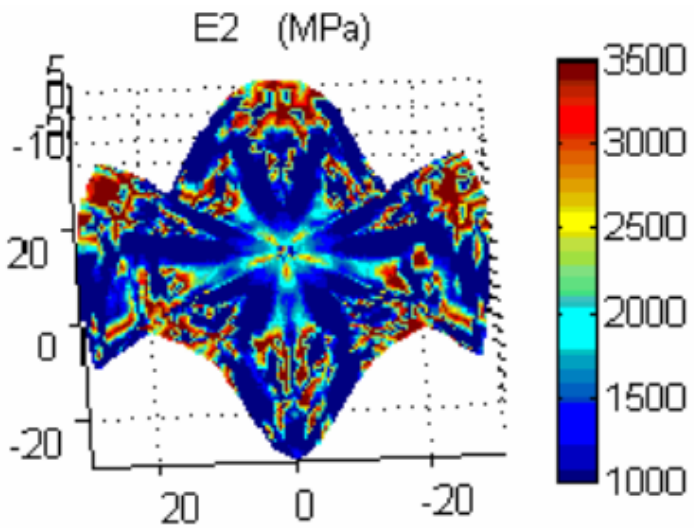


Figure V.31 : *Module de Young E_1 et E_2 du fond de VE après 50 itérations*

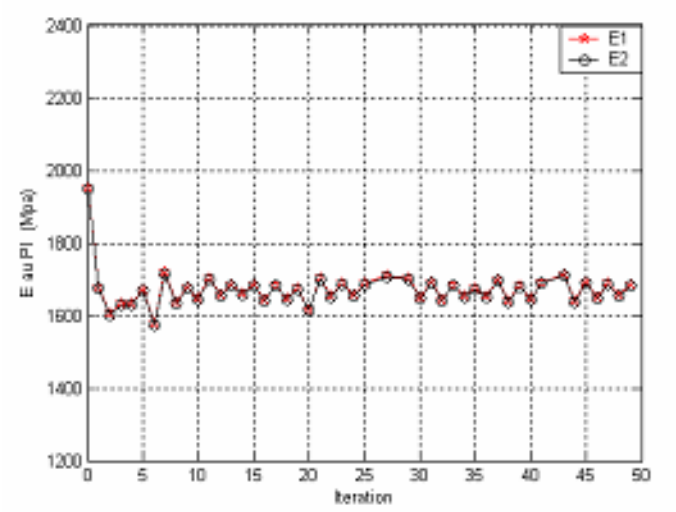


Figure V.32 : *Evolution des valeurs de module E_1 et E_2 au PI. En ce point les 2 valeurs sont identiques*

Tableau V.2. Les modules de Young premières identifiés et après 50 itérations du fond VE

	$E_1^{(0)}$ (MPa)	$E_2^{(0)}$ (MPa)	$E_1^{(50)}$ (MPa)	$E_2^{(50)}$ (MPa)
PI	1900	1900	1700	1700
pieds	2000	1600	2100	1600
vallée	2000	1500	2600	1900

V.4.4 Le cas VL

Le cas VL est plus complexe. Nous avons vu que les déformations n'évoluaient pas proportiellement à la pression et ce caractère non linéaire ne nous autorise pas à identifier les modules E_i à partir du calcul éléments finis linéaire dans ce cas.

L'évolution des déformations et des contraintes sous l'effet de la pression dans la zone du point d'injection est assez linéaire pour le fond de VE. Pour le fond VL, elle est clairement non linéaire avec une déformation négative au début de la mise sous pression de 1-2bar, et une augmentation à partir de 3 bar (voir la figure V.33). Ce phénomène de 'respiration' peut

expliquer la différence de comportements pour VE et VL au test ESC mais rend la procédure d'identification plus complexe puisqu'il faut procéder à une simulation non linéaire pour VL.

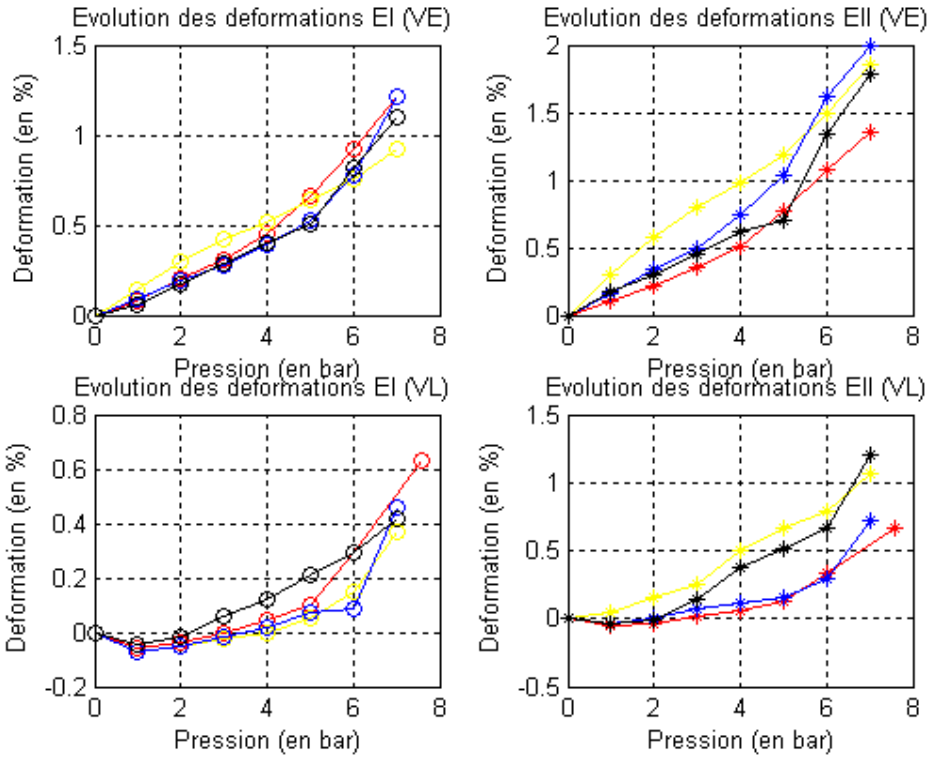
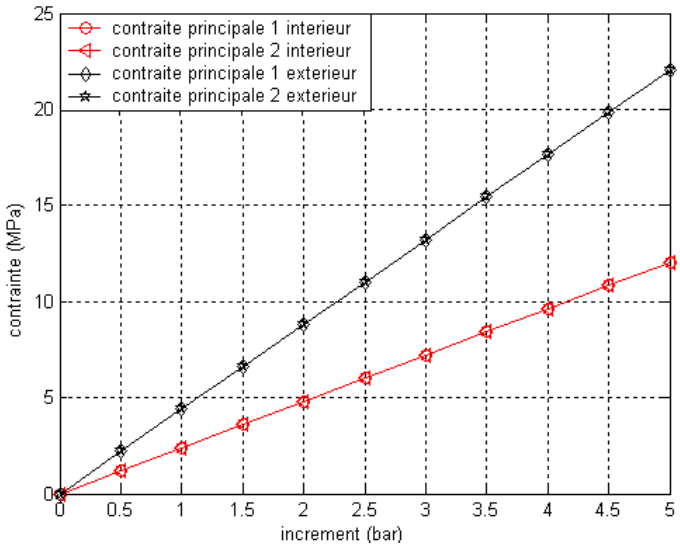
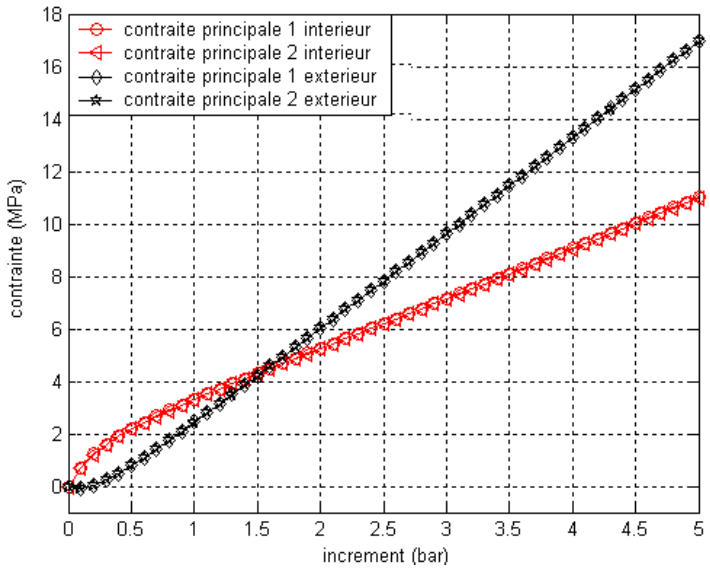


Figure V.33 : *Evolution des déformations sous l'effet de la pression dans la zone du point d'injection, les deux figures du haut présentent le cas VE, celles du bas, le cas VL*



(a)



(b)

Figure V.34 : *Evolution des contraintes dans la zone du point d'injection au cas VE (à gauche) et au cas VL (à droite)*

La figure V.34 montre le même phénomène : l'évolution des contraintes principales pour le fond VE est linéaire alors qu'elle est bien non linéaire pour le fond VL. Il reste néanmoins une contradiction pour le cas VL car si le comportement est isotrope au point PI, l'allure de contrainte principale extérieure devrait passer par une phase négative pour 1-2 bar et redevenir positive suivant ainsi l'évolution des déformations. Ce n'est pas le cas et cela est certainement dû aux conditions limites trop rigidifiantes si on ne procède qu'à la simulation éléments finis sur le fond et non sur toute la bouteille.

V.5 Conclusion partielle

Des mesures de champs de déformations membranaires ont été réalisées sur des fonds pétaloïdes de bouteilles en PET, des surfaces très fortement non planes. La validité de la mesure a été vérifiée à l'aide de mesures sur des solides étalons de dimensions voisines.
Des simulations numériques ont été réalisées sous l'hypothèse que le PET était élastique isotrope. Le champ de contraintes ainsi obtenu, peu sensible aux propriétés de rigidité, permet une évaluation des modules élastiques.

Le PET des fonds pétaloïdes est clairement hétérogène et assez anisotrope dès qu'on s'éloigne du point d'injection. Les tensions les plus fortes sont radiales et compte tenu des déformations radiales mesurées, c'est dans cette direction que le matériau se renforce le plus lors du soufflage. Un processus itératif converge assez vite pour obtenir les propriétés orthotropes. Finalement, les contraintes principales et les E_i déterminés par un calcul isotrope sont assez proches des contraintes et des E_i déterminées à l'issue de ce processus. Les valeurs atteignent leur convergence après quelques itérations de calculs. Ce qui confirme que, à pression imposée, le champ des contraintes dépend très peu du comportement.

Les vallées larges (VL) présentent un comportement élastique non linéaire lors de la mesure des déformations, ceci est confirmé par les contraintes obtenues par la simulation numérique. La procédure d'identification est donc plus complexe, mais ces deux observations expliquent, par un effet de « respiration » des pieds, la différence de performance au test ESC.

Les résultats ainsi obtenus pourront être comparés à l'estimation des modules induits par al simulation du procédé lorsque l'étape intermédiaire décrite en fin de chapitre IV sera mise au point.

Bibliographie

[BRU 89] Bruck, H.A., McNeill, S.R., Sutton, M.A., Peters, W.H.. Digital image correlation using Newton–Raphson method of partial differential correction, Exp Mech 29 (3), 261–267, (1989).

[CHE 99] Chevalier, L., Linhone, C., Regnier, G.. Induced crystallinity during stretch-blow moulding process and its influence on mechanical strength of poly(ethylene terephthalate) bottles. Plastics rubber and composites 28, 8, 393-401, (1999).

[CHE 01] Chevalier,L., Calloch, S., Hild, F., Marco, Y.. Digital image correlation used to analyze the multiaxial behavior of rubber-like materials. European Journal of Mechanics - A/Solids, 20 (2), 169-187, (2001).

[CHE 02] Chevalier, L., Marco, Y.. Tools for multiaxial validation of behavior laws chosen for modeling hyper-elasticity of rubber-like materials. Pol. Eng. Sci., 42, 280-298, (2002).

[COS 08] B. Cosson. Modélisation et simulation numérique du procédé de soufflage par bi-orientation des bouteilles en PET : évolution de microstructure, évolution de comportement. PhD Thesis University Paris-Est. (2008).

[GAR 99] Garcia, D., Orteu, J.J.. 3D Deformation measurement using stereo-correlation applied to the forming of metal or elastomer sheets, in: Proceedings of the International Workshop on Video-controlled Materials Testing and In-situ Microstructural Characterization, Nancy, France, November 16–18, 1999.

[GAR 02] Garcia, D., Orteu, J.J., Penazzi, L.. A Combined Temporal Tracking and Stereocorrelation Technique for Accurate Measurement of 3D Displacements: Application to Sheet Metal Forming, Journal of Materials Processing Technology, 125-126, 736-742, (2002).

[HAN 06] Hanley, T., Sutton, D., Cookson, D., Kosior, E., Knott, R.. Molecular morphology of petaloid bases of PET bottles: A small-angle X-ray scattering study. J. Applied Polymer Science, 99, 6, 3328-3335, 2006.

[HE 84] He, Z.H., Sutton, M.A., Ranson, W.F., Peters, W.H.. Two-dimensional fluid velocity measurements by use of digital speckle correlation techniques, Exp Mech 24 (2), 117–121, (1984).

[HEL 96] Helm, J.D., McNeill, S.R., Sutton, M.A.. Improved 3D image correlation for surface displacement measurement, Opt. Eng., 35 (7), 1911–1920, (1996).

[HIL 99] F. Hild, J.N. Périé, M. Coret. Mesure de champs de déplacement 2D par intercorrélation d'images : CORRELI2D, internal report 230, LMT-Cachan. (1999).

[LUO 94] Luo, P.F., Chao, Y.J., Sutton, M.A.. Application of stereo vision to 3D deformation analysis in fracture experiments, Opt. Eng., 33 (3), 981–990, (1994).

[MIS 03] Mistou, S., Karama, M., Dalverny, O., Siguier, J.M., Guigue-Joguet, P.. Mesure 3D sans contact des déplacements et déformations sur des films plastiques transparents par stéréo-corrélation3D non-contact measurement of strain and displacement on transparent plastic films by stereo correlation. Mécanique & Industries, 4 (6), 637-664, (2003).

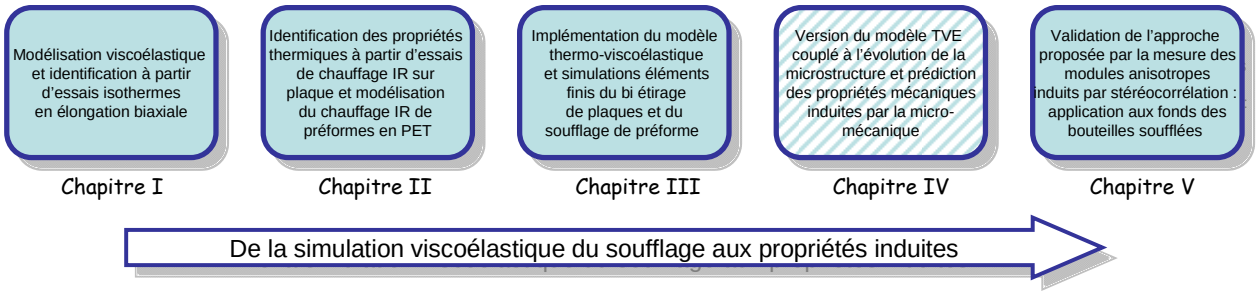
[PET 82] Peters, W.H., Ranson, W.F.. Digital imaging techniques in experimental stress analysis, Opt. Eng., 21 (3), 427–431, (1982).

[PET 83] Peters, W.H., Ranson, W.F., Sutton, M.A., Chu, T.C., Anderson, J.. Application of digital correlation methods to rigid body mechanics, Opt. Eng., 22 (6), 738–742, (1983).

[PIC 07] Picard, M., Billon, N.. Microstructural Evolution of PET under Stretching and during Stretch Blow Moulding. 10th ESAFORM Conference on Material Forming, Zaragoza, SPAIN, 907, 801-806, (2007).

[RET 07] Réthoré, J., Roux, S., Hild, F.. From pictures to extended finite elements: extended digital image correlation (X-DIC). Comptes Rendus Académie des Sciences : Mécanique, 335 (3), 131-137, (2007).
[RET 09] Réthoré, J., Roux, S. and Hild, F.. An extended and integrated digital image correlation technique applied to the analysis fractured samples, Eur. J. Comput. Mech. 18, 285-306, (2009).
[REY 99] Reynolds, A.P., Duvall, F.. Digital image correlation for determination of weld and base metal constitutive behavior, Welding J., 78 (10), 355s–360s, (1999).
[ROU 08] Roux, S., Hild, F., Viot, P., Bernard, D.. Three-dimensional image correlation from X-ray computed tomography of solid foam Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 39, (8), 1253-1265, (2008).
[SUT 83] Sutton, M.A., Wolters, W.J., Peters, W.H., Ranson, W.F. and McNeill, S.R.. Determination of displacements using an improved digital correlation method, Image Vision Comput., 1 (3), 133–139, (1983).
[SUT 86] Sutton, M.A., Cheng, M., Peters, W.H., Chao, Y.J., McNeill, S.R.. Application of an optimized digital correlation method to planar deformation analysis, Image Vision Comput., 4 (3), 143–150, (1986).
[YAN 06] Yan, J., Sutton, M.A., Reynolds, A.P., Samer, A., Horsley, D.. Characterization of heterogeneous response of pipeline steel weld using digital image correlation. In: Proceedings of the 2006 SEM annual conference and exposition on experimental and applied mechanics, June 4–7 2006, St Louis, Missouri, USA, 1, 90–96, (2006).

Conclusion et perspectives
De la simulation viscoélastique du soufflage aux propriétés induites



1. Conclusion

Pendant cette thèse, afin de permettre à termes une simulation numérique du procédé qui prenne en compte les modifications de propriétés en cours de soufflage, nous avons décrit le comportement du PET par un modèle visco-hyperélastique original en grandes déformations. L'identification des paramètres de ce modèle couplé à la thermique a été réalisé à partir des données expérimentales très récentes de tension biaxiale à des conditions de vitesse et de température proches du procédé et suivant une procédure qui permet de mettre en évidence une courbe maitresse (indépendante de la vitesse de déformation) pour la partie visqueuse.

En parallèle, les aspects thermiques, qui s'avèrent fondamentaux pour le procédé, sont explorés *via* une identification des propriétés thermiques réalisée sur la base d'essais de chauffage infrarouge et de mesure de champs par caméra thermique. La proximité de Tg rend les propriétés mécaniques très sensibles aux moindres variations de température aussi est-il particulièrement important de prédire correctement les conditions thermique initiales de la préforme avant soufflage. De plus, la très forte viscosité à ces températures génère une dissipation importante et qui contribue à l'auto échauffement du matériau modifiant les propriétés mécaniques au cours du temps.

Nous avons implémenté ce modèle dans le logiciel ABAQUS et simulé le gonflage des préformes par la méthode des éléments finis. Des soufflages de préformes ont été aussi réalisés expérimentalement afin de comparer la prédiction de l'évolution de la forme et la répartition finale des épaisseurs avec celles mesurée pendant et après le soufflage. Les premières simulations de soufflage doivent être ajustées et il est nécessaire d'introduire un cas anisotrope dans le modèle du comportement. On a proposé une viscosité orthotrope pour bien présenter la forme de la bouteille finale. On obtient le meilleur rapport longueur - largeur de la bouteille, cependant le volume est un peu trop grand par rapport celui de la bouteille réelle. Par conséquence, il faut envisager une forme anisotrope aussi pour la partie élastique.

Le soufflage des bouteilles en PET génère des modifications importantes des propriétés mécaniques du matériau comme le montre l'étude de caractérisation des propriétés hétérogènes et anisotropes réalisée sur le fond pétaloïde, une partie 3D de géométrie complexe de bouteille soufflée présentée en fin de mémoire. Nous avons mis au point une étude des propriétés induites par comparaison essais calculs via des mesures par stéréo corrélation faites sur les fonds de bouteilles pétaloïdes afin d'estimer les modules élastiques orthotropes sur des zones difficilement accessibles à des découpages d'éprouvettes.

Cette étude complète d'autres mesures de modules élastiques réalisées sur les parties plus régulières de la bouteille qui seront à confronter aux prédictions d'une simulation du procédé pour lequel notre modèle thermo-visco-hyperélastique sera couplé à l'évolution des paramètres de cristallisation (ou de densification) de la microstructure. La question de la relation entre l'anisotropie induite et l'orientation des macromolécules reste posée. De même, la contribution du renforcement provenant de la phase visqueuse par rapport à la phase élastique dans les propriétés élastiques induites doit faire l'objet d'une réflexion.

2. Perspectives

2.1 Validation par les effets de retour élastique

Une modélisation visco-hyperélastique est capable de prendre en compte les effets de retour élastique que l'on observe expérimentalement lorsqu'on stoppe brutalement la pression lors du soufflage des préformes. La confrontation de la prédiction du modèle dans cette situation avec des soufflages interrompus permettra de valider la performance du modèle.

L'équipe de QUB procède aussi à des simulations très précises du soufflage en utilisant une modélisation visco-élasticité aussi proposée par Buckley à l'origine. Dans ce modèle, deux branches viscoélastiques sont mises en parallèle : la première possède une élasticité non linéaire représentée par un modèle de réseaux associé à une viscosité des enchevêtrements ; la seconde présente une élasticité linéaire associée en série à une partie visqueuse. Ce modèle présente suffisamment de paramètres (dont certains présentent un sens assez physique) pour bien représenter les essais de traction équiaxiaux aussi bien synchronisés que séquencés. Le durcissement provient essentiellement de la partie élastique non linéaire.

La confrontation de notre modèle avec ce celui utilisé à QUB est intéressante car si les deux représentent aussi bien les essais sur les plaques et les soufflages libres, il est vraisemblable qu'ils se démarqueront dans leur manière de reproduire le retour élastique.

Il est donc prévu de continuer notre collaboration et de réaliser des essais expérimentaux et la simulation numérique pour la comparaison.

2.2 Couplage avec l'évolution de la microstructure

Outre la prédiction de la cinématique de gonflage des bulles et la répartition des épaisseurs par la simulation numérique afin de réduire la durée des phases de réglage et de design des bouteilles, l'industriel du soufflage est aussi intéressé par la prédiction de la tenue des bouteilles aux tests de validation : burst test, top load test, ESC test… Dans la 2nde partie du chapitre IV, nous présentons la démarche déjà mise en œuvre lors d'une précédente thèse pour une version viscoplastique du comportement du PET et que nous voulons étendre à une modélisation viscoélastique afin de réaliser des simulations numériques avec le modèle couplé à la microstructure.

Il est nécessaire de valider l'aptitude de la forme proposée à reproduire le comportement des essais biaxiaux équilibrés ou séquencé et ensuite d'identifier les paramètres des fonctions de la cristallinité introduites dans le modèle visco-hyperélastique. L'étape suivante consistera à valider la prédiction de la répartition du taux de cristallinité et la géométrie finale de la bouteille obtenue par simulation faite par des mesures de microstructure sur des échantillons prélevés sur différentes parties d'une bouteille soufflée dans les mêmes conditions..

2.3 Prédiction des propriétés induites par homogénéisation micromécanique

Connaître la microstructure finale est une condition nécessaire mais non suffisante pour prédire le comportement de la bouteille soufflée lors des tests de validation évoqués plus haut. Les techniques d'homogénéisation présentées dans la thèse de Benoît Cosson permettront de passer de l'état de la microstructure aux coefficients d'élasticité du matériau devenu anisotrope.

Durant l'étape de représentation, il faut d'abord déterminer la nature des constituants homogènes du milieu hétérogène. Ensuite, il faut connaître leurs propriétés physico-mécaniques et 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. Néanmoins, la question de la superposition des contributions des phases visqueuse et élastique du modèle se pose.

Durant l'étape de localisation, on détermine les champs microscopiques des déformations et des contraintes en fonction des champs macroscopiques appliqués au matériau homogénéisé. Enfin, après avoir menées à bien les deux premières étapes, on applique un schéma d'homogénéisation pour avoir une estimation du comportement effectif.

La validation de cette approche se fera alors en comparant les comportements effectifs estimés avec les comportements obtenus lors de sollicitations sur des bouteilles soufflées dans les mêmes conditions que la simulation. Notamment, les résultats présentés dans le chapitre V sur les fonds de bouteilles pétaloïdes seront exploités à cette fin. Les propriétés élastiques orthotropes induites, les directions d'orthotropie obtenues seront autant d'éléments pour comparer avec les résultats obtenus par la simulation.

Comme l'illustre le schéma introductif, c'est sur l'étape 4 qu'il convient maintenant de concentrer nos efforts. Un post-doc ou une nouvelle thèse devrait être lancées sur ce sujet.

Annexe A : Contraintes en élongation par différents modèles viscoélastiques

A.1 Maxwell surconvecté

Dans le cas d'une élongation uniaxiale à vitesse de déformation constante β suivant l'axe $\underline{X}$, les tenseurs de taux de déformation $\underline{\underline{D}}$ et des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ s'expriment :

$$\underline{\underline{D}} = \begin{bmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & -\beta/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\beta/2 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{A.1}$$

Quand on résout numériquement le cas de l'étirage en régime stationnaire, le tenseur des taux de rotation $\underline{\underline{\Omega}}$ est nul et la dérivée convective du tenseur des extra-contraintes est de la forme :

$$\frac{\delta \underline{\underline{S}}}{\delta t} = \begin{bmatrix} -2a\beta S_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & a\beta S_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & a\beta S_{zz} \end{bmatrix} \tag{A.2}$$

La loi de comportement de Maxwell donne donc :

$$\begin{bmatrix} (1-2a\beta\theta)S_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & (1+a\beta\theta)S_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & (1+a\beta\theta)S_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\eta_0\beta & 0 & 0 \\ 0 & -\eta_0\beta & 0 \\ 0 & 0 & -\eta_0\beta \end{bmatrix} \tag{A.3}$$

A.2 Giesekus

En régime stationnaire, lorsqu'on développe l'équation de Giesekus et la dérivée convective, on aboutit au système suivant :

$$\begin{bmatrix} \frac{\alpha}{G}S_{xx}^2 + (1-2a\beta\theta)S_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{G}S_{yy}^2 + (1+a\beta\theta)S_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\alpha}{G}S_{zz}^2 + (1+a\beta\theta)S_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\eta_0\beta & 0 & 0 \\ 0 & -\eta_0\beta & 0 \\ 0 & 0 & -\eta_0\beta \end{bmatrix} \tag{A.4}$$

On obtient la contrainte longitudinale suivante :

$$\sigma = \eta \frac{3a\theta\beta + \sqrt{(1-2a\theta\beta)^2 + 8\alpha\theta\beta} - \sqrt{(1+a\theta\beta)^2 - 4\alpha\theta\beta}}{2\alpha\theta} \tag{A.5}$$

A.3 Phan Thien et Tanner

En régime stationnaire, la loi de comportement P.T.T. donne :

$$\begin{bmatrix} AS_{11} + (1-2a\beta\theta)S_{11} & 0 & 0 \\ 0 & AS_{22} + (1+a\beta\theta)S_{22} & 0 \\ 0 & 0 & AS_{33} + (1+a\beta\theta)S_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\eta_0\beta & 0 & 0 \\ 0 & -\eta_0\beta & 0 \\ 0 & 0 & -\eta_0\beta \end{bmatrix}$$

$$\text{où } A = \frac{\alpha}{G}(S_{11} + S_{22} + S_{33}) \tag{A.6}$$

Dans ce cas là, les calculs analytiques sur les valeurs interdites de β deviennent laborieux et la détermination de la viscosité élongationnelle sera menée de manière numérique ; elle est obtenue comme racine d'un polynôme.

Annexe B : Calcul des doubles contractions

(**i**) Dans le cas 2D en contrainte plane :
Le terme déviatorique $\underline{\underline{\hat{B}}}_e$ s'écrit :

$$\underline{\underline{\hat{B}}}_e = \left(\underline{\underline{B}}_e\right) - \frac{tr\left(\underline{\underline{B}}_e\right)}{3}\underline{\underline{I}} \tag{B.1}$$

Les calculs pour le problème 2D contrainte plane :

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e \underline{\underline{D}}(\Delta V)\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{e11} & 0 & B_{e12} \\ 0 & B_{e22} & B_{e12} \\ B_{e12} & B_{e12} & (B_{e11}+B_{e22}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D(\Delta V)_{11} \\ D(\Delta V)_{22} \\ D(\Delta V)_{12} \end{Bmatrix} \tag{B.2}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e \underline{\underline{\Omega}}(\Delta V)\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 & 0 & -B_{e12} \\ 0 & 0 & B_{e12} \\ 0 & 0 & B_{e11}-B_{e22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D(\Delta V)_{11} \\ D(\Delta V)_{22} \\ D(\Delta V)_{12} \end{Bmatrix} \tag{B.3}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{D}}\Delta\underline{\underline{B}}_e\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & D_{12} \\ 0 & D_{22} & D_{12} \\ D_{12} & D_{12} & (D_{11}+D_{22}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e11} \\ \Delta B_{e22} \\ \Delta B_{e12} \end{Bmatrix} \tag{B.4}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{\Omega}}\Delta\underline{\underline{B}}_e\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\Omega_{12} \\ 0 & 0 & \Omega_{12} \\ \Omega_{12} & -\Omega_{12} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e11} \\ \Delta B_{e22} \\ \Delta B_{e12} \end{Bmatrix} \tag{B.5}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{\hat{B}}}_e\Delta\underline{\underline{B}}_e\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} \hat{B}_{e11} & 0 & \hat{B}_{e12} \\ 0 & \hat{B}_{e22} & \hat{B}_{e12} \\ \hat{B}_{e12} & \hat{B}_{e12} & (\hat{B}_{e11}+\hat{B}_{e22}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e11} \\ \Delta B_{e22} \\ \Delta B_{e12} \end{Bmatrix} \tag{B.6}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e\Delta\underline{\underline{\hat{B}}}_e\right) = \underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e\Delta\underline{\underline{B}}_e\right) - \underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e\left(\frac{tr\left(\Delta\underline{\underline{B}}_e\right)}{3}\underline{\underline{I}}\right)\right) \tag{B.7}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e\Delta\underline{\underline{B}}_e\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{e11} & 0 & B_{e12} \\ 0 & B_{e22} & B_{e12} \\ B_{e12} & B_{e12} & (B_{e11}+B_{e22}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e11} \\ \Delta B_{e22} \\ \Delta B_{e12} \end{Bmatrix} \tag{B.8}$$

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \underline{\underline{B}}_e\left(\frac{tr\left(\Delta\underline{\underline{B}}_e\right)}{3}\underline{\underline{I}}\right) = \underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e\left(\Delta\underline{\underline{B}}_e : \underline{\underline{I}}\right)\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{e11} & B_{e11} & 0 \\ B_{e22} & B_{e22} & 0 \\ 2B_{e12} & 2B_{e12} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e11} \\ \Delta B_{e22} \\ \Delta B_{e12} \end{Bmatrix} \tag{B.9}$$

(**ii**) Les calculs pour le problème axisymétrique :

$$\underline{\underline{B}}_e^{\,*} : \left(\underline{\underline{B}}_e \underline{\underline{D}}(\Delta V)\right) = \begin{Bmatrix} B^*_{e11} \\ B^*_{e22} \\ B^*_{e12} \\ B^*_{e33} \end{Bmatrix}^T \begin{bmatrix} B_{e11} & 0 & B_{e12} & 0 \\ 0 & B_{e22} & B_{e12} & 0 \\ B_{e12} & B_{e12} & (B_{e11}+B_{e22}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{e33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D(\Delta V)_{11} \\ D(\Delta V)_{22} \\ D(\Delta V)_{12} \\ D(\Delta V)_{33} \end{Bmatrix} \tag{B.10}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{B_e}}\,\underline{\underline{\Omega(\Delta V)}}\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -B_{e12} & 0 \\ 0 & 0 & B_{e12} & 0 \\ 0 & 0 & (B_{e11} - B_{e22}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D(\Delta V)_{11} \\ D(\Delta V)_{22} \\ D(\Delta V)_{12} \\ D(\Delta V)_{33} \end{Bmatrix} \tag{B.11}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{D}}\,\Delta\underline{\underline{B_e}}\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & D_{12} & 0 \\ 0 & D_{22} & D_{12} & 0 \\ D_{12} & D_{12} & (D_{11} + D_{22}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e\,11} \\ \Delta B_{e\,22} \\ \Delta B_{e\,12} \\ \Delta B_{e\,33} \end{Bmatrix} \tag{B.12}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{\Omega}}\,\Delta\underline{\underline{B_e}}\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\Omega_{12} & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_{12} & 0 \\ \Omega_{12} & -\Omega_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e\,11} \\ \Delta B_{e\,22} \\ \Delta B_{e\,12} \\ \Delta B_{e\,33} \end{Bmatrix} \tag{B.13}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{\hat{B}_e}}\,\Delta\underline{\underline{B_e}}\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} \hat{B}_{e11} & 0 & \hat{B}_{e12} & 0 \\ 0 & \hat{B}_{e22} & \hat{B}_{e12} & 0 \\ \hat{B}_{e12} & \hat{B}_{e12} & (\hat{B}_{e11} + \hat{B}_{e22}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{B}_{e33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e\,11} \\ \Delta B_{e\,22} \\ \Delta B_{e\,12} \\ \Delta B_{e\,33} \end{Bmatrix} \tag{B.14}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{B_e}}\,\Delta\underline{\underline{B_e}}\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} B_{e11} & 0 & B_{e12} & 0 \\ 0 & B_{e22} & B_{e12} & 0 \\ B_{e12} & B_{e12} & (B_{e11} + B_{e22}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{e33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e\,11} \\ \Delta B_{e\,22} \\ \Delta B_{e\,12} \\ \Delta B_{e\,33} \end{Bmatrix} \tag{B.15}$$

$$\underline{\underline{B_e}}^{*} : \underline{\underline{B_e}}\left(\frac{tr\left(\Delta\underline{\underline{B_e}}\right)}{3}\underline{\underline{I}}\right) = \underline{\underline{B_e}}^{*} : \left(\underline{\underline{B_e}}\left(\Delta\underline{\underline{B_e}} : \underline{\underline{I}}\right)\right) = \begin{Bmatrix} B^{*}_{e\,11} \\ B^{*}_{e\,22} \\ B^{*}_{e\,12} \\ B^{*}_{e\,33} \end{Bmatrix}^{T} \begin{bmatrix} B_{e11} & B_{e11} & 0 & B_{e11} \\ B_{e22} & B_{e22} & 0 & B_{e22} \\ 2B_{e12} & 2B_{e12} & 0 & 2B_{e12} \\ B_{e33} & B_{e33} & 0 & B_{e33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta B_{e\,11} \\ \Delta B_{e\,22} \\ \Delta B_{e\,12} \\ \Delta B_{e\,33} \end{Bmatrix} \tag{B.16}$$

Annexe C : Dérivées de Gâteaux

A partir des résidus présentés dans l'équation III 20, on calcule les dérivées de Gâteaux pour chaque résidu :

$$\begin{cases} D_{\Delta V}\{R_1\} = 2\eta_n \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \Delta \underline{\underline{D}} d\Omega \\ D_{\Delta p}\{R_1\} = -\int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{I}} P d\Omega \\ D_{\Delta q}\{R_1\} = -\int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{I}} p d\Omega \\ D_{\Delta B_e}\{R_1\} = \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : G(\varepsilon_e) \Delta \underline{\underline{B}}_e d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{D}}^* : \underline{\underline{B}}_e D_{\Delta B}\{G(\varepsilon_e)\} d\Omega \\ D_{\Delta T}\{R_1\} = 0 \end{cases} \tag{C.1}$$

$$\begin{cases} D_{\Delta V}\{R_2\} = -\int_\Omega p^* \underline{\underline{I}} : \Delta \underline{\underline{D}} d\Omega \\ D_{\Delta p}\{R_2\} = 0 \\ D_{\Delta q}\{R_2\} = 0 \\ D_{\Delta B_e}\{R_2\} = 0 \\ D_{\Delta T}\{R_2\} = 0 \end{cases} \tag{C.2}$$

$$\begin{cases} D_{\Delta V}\{R_3\} = 0 \\ D_{\Delta p}\{R_3\} = 0 \\ D_{\Delta q}\{R_3\} = 0 \\ D_{\Delta B_e}\{R_3\} = -\int_\Omega q^* (\det B_e - 1) \underline{\underline{I}} : \Delta \underline{\underline{B}}_e d\Omega \\ D_{\Delta T}\{R_3\} = 0 \end{cases} \tag{C.3}$$

$$\begin{cases} D_{\Delta V}\{R_4\} = 2\int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \underline{\underline{B}}_e \Delta \underline{\underline{\Omega}} d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \underline{\underline{B}}_e \Delta \underline{\underline{D}} d\Omega \\ D_{\Delta p}\{R_4\} = 0 \\ D_{\Delta q}\{R_4\} = 0 \\ D_{\Delta B_e}\{R_4\} = \int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \Delta \underline{\underline{\dot{B}}}_e d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \underline{\underline{\Omega}} \Delta \underline{\underline{B}}_e d\Omega - 2\int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \underline{\underline{D}} \Delta \underline{\underline{B}}_e d\Omega + \\ \int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)} \underline{\underline{B}}_e \Delta \underline{\underline{\hat{B}}}_e d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)} \underline{\underline{\hat{B}}}_e \Delta \underline{\underline{B}}_e d\Omega + \int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : \underline{\underline{B}}_e \underline{\underline{\hat{B}}}_e D_{\Delta B} \left\{ \frac{G(\varepsilon_e)}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)} \right\} d\Omega \\ D_{\Delta T}\{R_4\} = \int_\Omega \underline{\underline{B}}_e^* : G(\varepsilon_e) \underline{\underline{B}}_e \underline{\underline{\hat{B}}}_e D_{\Delta T} \left\{ \frac{1}{\eta(\varepsilon_v, \dot{\bar{\varepsilon}}_v, T)} \right\} d\Omega \end{cases} \tag{C.4}$$