

N° d'ordre : 2318

# THÈSE

PRÉSENTÉE À

## L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE  
DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

par **Hugues MASSÉ**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

### DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

---

#### COUPLAGES THERMOMÉCANIQUES LORS DE LA SOLIDIFICATION DE MATÉRIAUX POLYMÈRES

---

*Soutenue le :* 11 décembre 2000

*Après avis de :*

MM. J.B. SAULNIER, Professeur, Université de Poitiers ..... Rapporteur  
M. VINCENT, Directeur de recherche, CEMEF EMP ..... Rapporteur

*Devant la Commission d'examen formée de :*

MM. D. DELAUNAY, Directeur de Recherche CNRS, EPUN ..... Président  
É. ARQUIS, Professeur, Université Bordeaux I ..... Examineur  
J.P. CALTAGIRONE, Professeur, Université Bordeaux I ..... Rapporteur  
R. GÉNILLON, HDR, PDG CERAP ..... Examineur  
J.B. SAULNIER, Professeur, Université de Poitiers ..... Examineur  
M. VINCENT, Directeur de recherche, CEMEF EMP ..... Examineur



À mes parents,  
À mon frère.



# Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du laboratoire Modélisation Avancée des Systèmes Thermiques et Écoulements Réels de l'École Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux. Il a été effectué dans le cadre d'une bourse du ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche au travers du réseau de laboratoires Amélioration des Échanges Thermiques (AmETh).

Je tiens à remercier en premier lieu mon directeur de thèse Éric Arquis, Professeur à l'École Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux pour l'aide précieuse et la confiance qu'il m'a accordé durant ces années de thèse et de DEA. Outre ses qualités scientifiques que j'ai pu apprécier, sa conception d'une thèse ouverte sur le monde et parsemée d'échanges et de rencontres enrichissantes m'a permis de tirer de cette aventure une expérience positive. Que ce soit sur la route, par le fer, dans les airs ou en mer, les nombreux voyages que nous avons fait ensemble ont ajouté une note agréable et chaleureuse au travail quotidien.

Je remercie également Didier Delaunay, Directeur de Recherche du CNRS au laboratoire de thermocinétique de l'École Polytechnique Universitaire de Nantes pour avoir co-dirigé mes travaux. J'ai pu apprécier sa curiosité et sa rigueur scientifique au travers des nombreuses rencontres que nous avons eues. Ses nombreuses remarques m'auront permis d'améliorer la qualité de ce mémoire. Qu'il soit ici vivement remercié.

J'ai une pensée pour Philippe Le Bot, que j'apprécie beaucoup et avec qui nous nous sommes « creusés la tête » sur les problèmes thermomécaniques, et pour Stéphane Quilliet dont l'aide m'a été précieuse.

J'adresse mes remerciements à Jean-Paul Caltagirone, Professeur à l'Université Bordeaux I et directeur du laboratoire Modélisation Avancée des Systèmes Thermiques et

Écoulements Réels de l'ENSCPB pour m'avoir accueilli depuis le DEA dans son laboratoire.

J'adresse mes sincères remerciements à Jean-Bernard Saulnier, Professeur au Laboratoire d'Études Thermiques de l'Université de Poitiers pour avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse ainsi que pour ses remarques judicieuses et l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Je remercie vivement Michel Vincent, Directeur de recherche du CNRS à l'École de Mines de Paris, pour la pertinence de son propos et son analyse fructueuse de ce travail. Je lui sais gré d'avoir accepté d'être rapporteur de ce mémoire.

Je remercie enfin René Génillon, directeur du CERAP, pour avoir bien voulu juger ce travail et participer à cette commission.

Une thèse c'est aussi des personnes que l'on côtoie au quotidien ; une grande famille où les aînés, avant de partir vers d'autres cieux, guident les nouveaux et où l'entraide est omniprésente.

J'ai une pensée pour ces « anciens ». Naïma, une fille adorable avec qui j'ai passé de très bon moments, Patrick « le palois » un rien chauvin quand il s'agit de la Section. Alain et sa passion communicative pour le grand froid. Après tant d'années, et à force de persévérance, il a enfin réalisé son rêve d'Antarctique. C'est une leçon dont je saurai me souvenir. Je n'oublie pas non plus Olivier, Losamo, JB, Jeff, Rémi et Stéphane qui ont contribué à la création d'une bonne ambiance quotidienne.

J'ai une pensée pour mon collègue de bureau Stéphane. Il a toujours su avoir une oreille attentive et me faire profiter de ses grandes compétences. Stefania et lui ont fait entrer un peu de l'Italie (et quelques merveilleuses *pizze*) dans le quotidien du bureau.

Je remercie également Natalie, Aziz, David, Rémi et Marie-Paule pour leur aide. Sandrine et Bernard ont fait beaucoup pour le bon fonctionnement de l'informatique au laboratoire, je les en remercie vivement.

Mes pensées vont aussi à des thésards que j'ai beaucoup apprécié durant mes années ici : Fred, un garçon simple et sincère, et un vrai supporter de foot. Dommage que le bleu de son maillot soit si pâle. Hadjira, notre Jacky Brown qui égaye les journées par son dynamisme. Gégé, une carrure de deuxième ligne mais un cœur en or. Bonne chance au

Japon. Et Fred, pour qui les voyages sont des prétextes au surf (à moins que ce ne soit le contraire).

Il y a aussi ceux qui sont arrivés plus récemment : Guyguyt, qui pratique le sport avec passion et philosophie (ainsi que les jeux de mots de façon parfois envahissante). Cendrille, attachante et passionnée (réussira-t'elle à dompter sa « bestiole » ?). Damien, observateur attentif de la bonne marche du monde. Claude, qui a quitté Nouméa pour la métropole ce qui reste un grand mystère pour moi. Cédric, qui porte fièrement les couleurs de sa Bretagne. Boris, notre triathlète surfeur qui sait rester zen en toutes circonstances. Et Bassel, à qui je souhaite bonne chance pour l'avenir.

Je pense aussi aux « américains » avec qui j'ai partagé des moments inoubliables : Pascal, médocain dans l'âme et toujours présent pour ses amis. Sébastien que je revoie toujours avec beaucoup de plaisir et à qui je souhaite une longue et heureuse vie avec Valérie. Sans oublier Manu, l'olibrius tellement sympathique et attachant.

Il y a aussi Gunter et nos parties de pêche au petit matin, Jean et ses jeux vidéo (je te battrai un jour), la bouillonnante Hélène, et Mickaël, toujours « dans un bon esprit ».

Je n'oublie pas ceux qui ont vu leur famille s'agrandir récemment. François, toujours plein de bonne humeur et d'idées farfelues. Et Olivier, mon « croque maïs » préféré, qui s'est expatrié dans le grand nord. Il me reste des souvenirs incroyables de nos soirées.

Je remercie également toute l'équipe de France de football.

Je remercie mes parents et mon « petit » frère pour leur soutien moral durant ces années. Merci pour leur gentillesse et pour les réserves inépuisables de patience qu'il ont montré. Je leur dédie ce mémoire. Je remercie également mes grands parents qui m'ont toujours encouragé depuis le début de mes études.

Ma dernière pensée ira à mon grand père Armand qui m'a transmis les gènes de la mécanique. Je pense qu'il est fier de moi.

Talence, le 10 janvier 2001.



# Sommaire

<b>Nomenclature</b>	<b>1</b>
<b>Introduction générale</b>	<b>5</b>
<b>1 Généralités</b>	<b>9</b>
1.1 Matières plastiques . . . . .	9
1.2 Classification des polymères . . . . .	10
1.2.1 Structures . . . . .	10
1.2.2 Thermoplastiques . . . . .	12
1.2.3 Thermodurcissables . . . . .	15
1.3 Choisir une stratégie de mise en forme . . . . .	18
1.4 Moulage par injection . . . . .	18
1.4.1 Principe général . . . . .	19
1.5 Particularités du moulage par injection . . . . .	20
1.5.1 Retrait . . . . .	20
1.5.2 Résistances thermiques de contact (RTC) . . . . .	24
1.5.3 Contraintes résiduelles . . . . .	27
1.6 Conclusion . . . . .	28
<b>2 Physique du procédé</b>	<b>31</b>
2.1 Rappels de cinématique . . . . .	32
2.1.1 Description du mouvement . . . . .	32
2.1.2 Dérivée particulière . . . . .	33
2.1.3 Équations de bilan . . . . .	34
2.2 Écriture du problème thermoélastique couplé . . . . .	36
2.2.1 Application des principes de la thermodynamique . . . . .	36

2.2.2	Relation contrainte-déformation . . . . .	37
2.2.3	Équation de l'énergie pour un solide élastique . . . . .	38
2.2.4	Théorème d'unicité . . . . .	42
2.3	Hypothèses simplificatrices . . . . .	43
2.3.1	Dissipation thermoélastique . . . . .	43
2.3.2	Terme d'inertie . . . . .	44
2.4	Caractéristiques thermophysiques . . . . .	45
2.4.1	Capacité calorifique . . . . .	45
2.4.2	Conductivité thermique . . . . .	47
2.4.3	Volume spécifique . . . . .	49
2.4.4	Coefficient de dilatation thermique . . . . .	50
2.5	Échanges thermiques et solidification . . . . .	53
2.6	Écoulement du polymère fondu . . . . .	56
2.6.1	Rhéologie des fluides . . . . .	56
2.6.2	Milieu diphasique . . . . .	60
2.6.3	Tension superficielle . . . . .	61
2.6.4	Mouillabilité . . . . .	62
2.6.5	Mise en équation . . . . .	62
2.7	Déformations et contraintes dans le solide . . . . .	64
2.7.1	Couplage thermomécanique . . . . .	65
2.7.2	Contraintes résiduelles . . . . .	65
2.7.3	Éléments de mécanique du solide . . . . .	67
2.7.4	Mise en équation . . . . .	70
2.7.5	Correction des paramètres physiques . . . . .	71
2.8	Conclusion . . . . .	74
<b>3</b>	<b>Modélisation numérique</b>	<b>77</b>
3.1	Méthode des volumes finis . . . . .	77
3.1.1	Maillage unique . . . . .	78
3.1.2	Équation unique . . . . .	79
3.2	Formulation des équations . . . . .	80
3.2.1	Phase d'injection . . . . .	80
3.2.2	Phases de compactage et de refroidissement . . . . .	81
3.2.3	Discretisation temporelle des équations . . . . .	82

3.2.4	Discrétisation spatiale des équations . . . . .	83
3.2.5	Conditions aux limites . . . . .	86
3.3	Résolution des équations de Navier – Stokes . . . . .	87
3.3.1	Traitement du couplage vitesse-pression . . . . .	87
3.3.2	Méthode de description de l'interface . . . . .	88
3.3.3	Tension superficielle . . . . .	91
3.4	Résolution de l'équation de l'énergie . . . . .	92
3.4.1	Prise en compte du changement de phase . . . . .	92
3.4.2	Prise en compte des résistances thermiques . . . . .	93
3.5	Résolution de l'équation des solides . . . . .	95
3.5.1	Influence des hypothèses d'élasticité plane . . . . .	98
3.5.2	Évolution temporelle . . . . .	99
3.5.3	Gestion du contact . . . . .	101
3.6	Résolution des systèmes linéaires . . . . .	105
3.7	Conclusion . . . . .	106
<b>4</b>	<b>Validations</b> . . . . .	<b>109</b>
4.1	Thermique . . . . .	109
4.2	Mécanique . . . . .	111
4.3	Couplage thermomécanique . . . . .	113
4.3.1	Décollement de deux matériaux . . . . .	113
4.3.2	Accolement de deux matériaux . . . . .	114
4.4	Contraintes résiduelles . . . . .	116
4.5	Aspect rhéologique . . . . .	118
4.5.1	Écoulement de Poiseuille pseudoplastique . . . . .	119
4.5.2	Remplissage du moule . . . . .	121
4.6	Conclusion . . . . .	127
<b>5</b>	<b>Application au moulage par injection</b> . . . . .	<b>129</b>
5.1	Descriptif de l'expérience . . . . .	129
5.1.1	Moules . . . . .	130
5.1.2	Systèmes d'alimentation . . . . .	130
5.1.3	Instrumentation . . . . .	133
5.2	Techniques de dépouillement . . . . .	135
5.2.1	Détermination des flux et températures . . . . .	135

5.2.2	Détermination de la RTC . . . . .	140
5.2.3	Identification du champ initial de température . . . . .	144
5.3	Essai sur le moule de 3mm . . . . .	145
5.3.1	Résultats expérimentaux . . . . .	145
5.3.2	Résultats numériques . . . . .	148
5.4	Essai sur le moule de 2mm . . . . .	164
5.4.1	Résultats expérimentaux . . . . .	164
5.4.2	Résultats numériques . . . . .	164
5.5	Conservation de la masse . . . . .	172
5.6	Conclusion . . . . .	174
<b>Conclusion générale</b>		<b>175</b>
<b>Annexe</b>		<b>179</b>
<b>A Thermodynamique</b>		<b>179</b>
A.1	Rappels et définitions . . . . .	179
A.2	Premier principe de la thermodynamique . . . . .	180
A.3	Deuxième principe de la thermodynamique . . . . .	181
A.4	Enthalpie . . . . .	182
A.5	Coefficients calorimétriques . . . . .	182
<b>B Écoulement de Poiseuille pseudoplastique (loi puissance)</b>		<b>185</b>
<b>C Équation aux déplacements</b>		<b>189</b>
C.1	Écriture bidimensionnelle . . . . .	189
C.1.1	Terme $\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)]$ . . . . .	189
C.1.2	Terme $\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U})$ . . . . .	190
C.1.3	Équation finale . . . . .	190
C.2	Écriture tridimensionnelle . . . . .	190
C.2.1	Terme $\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)]$ . . . . .	190
C.2.2	Terme $\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U})$ . . . . .	191
C.2.3	Équation finale . . . . .	191
<b>D Algorithme de résolution : gradient conjugué</b>		<b>193</b>

<b>E Thermique et contact imparfait</b>	<b>195</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>199</b>



# Nomenclature

## Lettres romaines

$a$	: diffusivité thermique .....	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$C$	: fonction couleur .....	<i>adim.</i>
$C_E$	: capacité calorifique à déformation constante .....	$\text{J}.\text{kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$C_p$	: capacité calorifique à pression constante .....	$\text{J}.\text{kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$C_v$	: capacité calorifique à volume constant .....	$\text{J}.\text{kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$d$	: composante du tenseur des vitesses de déformations .....	<i>adim.</i>
$E$	: module d'Young .....	Pa
$e$	: énergie interne spécifique .....	$\text{J}.\text{kg}^{-1}$
$f_S$	: fraction liquide .....	<i>adim.</i>
$f_s$	: fraction solide .....	<i>adim.</i>
$H$	: enthalpie .....	J
$K$	: module élastique de compression .....	Pa
$k$	: conductivité thermique .....	$\text{W}.\text{K}^{-1}.\text{m}^{-1}$
$m$	: masse .....	kg
$n$	: indice de rhéofluidifiante .....	<i>adim.</i>
$Pe$	: nombre de Peclet .....	<i>adim.</i>
$p$	: pression .....	Pa

$R_a$	: rugosité moyenne arithmétique .....	m
$R_q$	: rugosité moyenne quadratique .....	m
$RTC$	: Résistance Thermique de Contact .....	$m^2.K.W^{-1}$
$RT$	: Résistance Thermique .....	$m^2.K.W^{-1}$
$s$	: entropie .....	$J.K^{-1}.m^{-3}$
$t$	: temps .....	s
$T$	: température .....	K
$T_\infty$	: température à l'infini .....	K
$u$	: déplacement .....	m
$v$	: volume spécifique .....	$m^3.kg^{-1}$

## Vecteurs et tenseurs

$\bar{\bar{I}}$	: tenseur identité	
$\bar{\bar{\varepsilon}}$	: tenseur des déformations .....	<i>adim.</i>
$\bar{\bar{D}}$	: tenseur vitesses de déformations .....	<i>adim.</i>
$\bar{\bar{\sigma}}'$	: tenseur des extra contraintes .....	Pa
$\bar{\bar{\sigma}}$	: tenseur des contraintes .....	Pa
$\mathbf{n}$	: normale sortante	
$\mathbf{q}$	: densité de flux de chaleur .....	$W.m^{-2}$
$\mathbf{T}$	: vecteur contrainte .....	Pa
$\mathbf{U}$	: champ des déplacements .....	m
$\mathbf{V}$	: champ des vitesses .....	$m.s^{-1}$

## Lettres grecques

$\alpha$	: coefficient de dilatation thermique linéaire .....	$K^{-1}$
$\beta$	: coefficient de dilatation thermique volumique .....	$Pa.K^{-1}$
$\delta$	: épaisseur de lame d'air .....	m
$\varepsilon$	: déformation .....	<i>adim.</i>
$\eta$	: viscosité dynamique .....	$Pa.s$
$\iota$	: coefficient de tension superficielle .....	$N.m^{-1}$
$\kappa$	: courbure de l'interface .....	$m^{-1}$
$\lambda$	: premier coefficient de Lamé .....	Pa
$\mu$	: second coefficient de Lamé .....	Pa
$\nu$	: coefficient de Poisson .....	<i>adim.</i>
$\rho$	: masse volumique .....	$kg.m^{-3}$
$\tau$	: écart de température .....	K
$\varphi$	: flux thermique surfacique .....	$W.m^{-2}$
$\sigma$	: contrainte .....	Pa
$\chi$	: coefficient de compressibilité .....	$Pa^{-1}$
$\psi$	: entropie spécifique .....	$J.kg^{-1}.K^{-1}$

## Opérateurs mathématiques

$\delta_{ij}$	: symbole de Kronecker
$\nabla$	: opérateur gradient
$\nabla \cdot$	: opérateur divergence
$\partial$	: dérivée partielle
$tr$	: opérateur trace
:	: double produit tensoriel



# Introduction générale

Notre perception des matières plastiques a bien changé depuis les années 80 où le «plastoque» bon marché et peu performant était utilisé pour les articles de bas de gamme, laissant la vedette aux matières nobles telles cuir, métaux ou bois. Ces matériaux aux formes incertaines, aux couleurs délavées par le temps ou le soleil et au contact peu agréable ont laissé la place à des matières nouvelles qui prennent une importance de plus en plus grande dans notre vie quotidienne. Les progrès de la chimie et l'amélioration des procédés de fabrication ont en effet permis de fabriquer des matériaux nouveaux légers, résistants, à la large palette de couleurs et capables de résister aux agressions du temps.

Dans les secteurs de pointe, l'utilisation de matières plastiques permet d'aller plus loin dans la qualité et les performances. Valves cardiaques ou prothèses en médecine, parties de carrosseries qui retrouvent leur forme initiale après un choc dans l'automobile : les domaines d'application de ces matériaux semblent pratiquement infinis.

Parmi les procédés de mise en forme des polymères, le moulage par injection est l'un des plus anciens. Depuis l'apparition des premières presses à injecter datant du début du siècle, ce procédé a rapidement évolué pour devenir aujourd'hui le deuxième en terme de tonnage et le premier en ce qui concerne le chiffre d'affaire.

Cependant, malgré son utilisation intense, le procédé de moulage par injection est encore mal maîtrisé. La conception et la fabrication du moule sont toujours aujourd'hui un moment délicat et il n'est pas certain que la pièce en sortie du moule ait bien la forme, les cotes ou l'aspect de surface attendus. Les paramètres qu'il est possible de modifier lors de l'injection sont nombreux (pression, température, vitesse de refroidissement, matériau utilisé, temps de compactage, de refroidissement, etc.) et l'expérience de l'opérateur joue un rôle important dans la mise en route de la production.

En effet, les problèmes rencontrés par les transformateurs de matières plastiques sont multiples. Le principal est sans doute le retrait volumique provoqué par la baisse de la température dans la cavité moulante. Les effets de ces retraits sont nombreux : non respect des cotes du matériau si celui-ci vient à décoller des parois du moule bien sûr mais aussi déformations, contraintes internes – qui peuvent provoquer la rupture de la pièce dans le moule ou au moment de l'éjection – ou contraintes résiduelles qui peuvent opacifier une pièce censée rester transparente. L'intérêt de la prédiction de ces retraits et de leurs conséquences est donc évidente.

De plus, les résistances thermiques de contact entre la pièce et la paroi de la cavité moulante jouent un rôle extrêmement important dans la cinétique de refroidissement et donc dans la durée de cycle. Ces résistances évoluent au cours du temps et en fonction de nombreux paramètres dont il est délicat d'évaluer l'incidence *a priori*.

La simulation numérique d'un procédé industriel comme le moulage par injection est donc très intéressante dans l'optique de mieux prédire les évolutions et proposer des conditions opératoires susceptibles de donner les meilleurs résultats. Cependant cette simulation se révèle être délicate au vu du nombre et de la complexité des phénomènes physiques qui entrent en compte. Lors de l'injection, par exemple, un polymère de rhéologie complexe s'écoule en présence d'air et de la paroi du moule tout en se refroidissant et se solidifiant. Et l'on peut rajouter les orientations moléculaires, la cinétique de cristallisation, les contraintes générées, les éventuels décollements et les inévitables retraits sans compter la prise en compte des résistances thermiques de contact ou l'évaluation de l'état de surface de la pièce.

La complexité des aspects techniques de ce procédé de mise en forme le place en effet au confluent de plusieurs disciplines : chimie, en ce qui concerne les propriétés des polymères et leur transformation, mécanique des fluides, pour ce qui est du remplissage du moule, mécanique des solides, afin d'étudier les contraintes et les déformations et bien sûr la thermique au vu de l'importance des transferts de chaleur au cours du cycle.

Notre objectif est de mettre en place un outil capable de simuler les différentes phases du procédé. Il ne s'agit pas bien sûr de créer un code numérique destiné à optimiser une production industrielle, mais plutôt de contruire une plateforme de travail permettant de mieux comprendre le fonctionnement intime des phénomènes physiques mis en jeu, leurs origines et leurs conséquences.

Pour cela, nous disposons, outre une expérience informatique conséquente, de la possibilité d'effectuer des essais sur une presse à injecter grâce à une collaboration inter-laboratoires développée avec le laboratoire de thermocinétique de l'École Universitaire Polytechnique de Nantes dans le cadre du réseau « amélioration des échanges thermiques » (AmETh). Une étude générale des phénomènes thermiques rencontrés associé à une importante bibliographie a d'ailleurs récemment été publiée par D. Delaunay [Delaunay 00].

Le premier chapitre rassemble les notions de base sur les polymères et décrit le fonctionnement d'une presse à injecter afin de situer le contexte de l'étude. Dans le deuxième chapitre, nous nous sommes attachés à faire ressortir les phénomènes physiques prépondérants et à établir les modèles destinés à les décrire. Le troisième chapitre présente quant à lui les techniques numériques mises en place afin de simuler les différentes étapes du procédé. Le quatrième chapitre est dévolu aux validations numériques garantant d'un code permettant la simulation correcte des phénomènes. Enfin, la cinquième partie du mémoire compare les résultats numériques aux essais expérimentaux et tente de tirer des conclusions pertinentes des résultats obtenus.



# Chapitre 1

## Généralités

### 1.1 Matières plastiques

Le terme « plastique » se réfère à la loi de comportement d'un matériau, c'est à dire à la façon dont il va se déformer sous l'action d'efforts extérieurs. La plasticité reflète la tendance qu'a un corps à conserver son état déformé après l'arrêt de la sollicitation.

Les matières plastiques existent dans la nature depuis toujours et leur capacité à changer de forme a été utilisée par l'Homme depuis très longtemps. Les Égyptiens moulaient déjà des mélanges de bitume et d'argile il y a presque 5000 ans.

Les « plastiques », dans l'acception que nous connaissons aujourd'hui désignent les matériaux formés par des macromolécules, répétition d'unités simples (les monomères) reliées entre elles par des liaisons covalentes.

La première matière plastique synthétique (le nitrate de cellulose) est l'œuvre de Henri Braconnot en 1833. Il s'agit de coton traité par un mélange d'acide sulfurique et d'acide nitrique. Ce matériau sera mis en forme pour la première fois en 1868 par les frères Hyatt sous le nom de Celluloïd. Le premier plastique totalement synthétique est une résine phénolique qui a été découverte en 1907 par Leo Hendrik Baekeland, qui lui donnera son nom : la Bakélite.

Depuis cette date, les matières plastiques sont de plus en plus nombreuses et ont envahi de nombreux domaines de production (transports, médecine, loisirs, emballage,

électroménager, ...) au point de devenir aujourd'hui indispensables à notre société de consommation.

## 1.2 Classification des polymères

Le mot polymère vient du grec poly=plusieurs et mère=parties. Ils sont constitués de la répétition d'un grand nombre de motifs élémentaires : les unités monomères. Dans le cas où la macromolécule ne contient qu'un type de monomère, il s'agit d'un *homopolymère*. Si les unités constitutives sont plus nombreuses, on parle alors de *copolymère*. Il existe plusieurs types de copolymères :

- les copolymères alternés (chaîne A-B-A-B-A-...)
- les copolymères séquencés (chaîne A-A-A-B-B-B-...)
- les copolymères statistiques (chaîne A-B-B-A-B-A-B-A-A-...)

Le degré de polymérisation (DP) indique le nombre d'unités monomères assemblées dans le polymère (figure 1.1).

Les matières plastiques que nous rencontrons tous les jours présentent des caractéristiques variables. Leur grande variété de comportement permet de les utiliser dans une application grâce à leur rigidité, dans une autre grâce à leur résistance au choc et dans une troisième c'est leur résistance mécanique qui sera utilisée. La figure 1.2 montre les caractéristiques générales de plusieurs polymères couramment rencontrés.

### 1.2.1 Structures

La *structure* du polymère représente la façon dont les longues chaînes moléculaires de base sont reliées entre elles pour former le matériau. La disposition des chaînes entre elles ainsi que la densité des points de liaison vont modifier profondément les caractéristiques macroscopiques du polymère.

Un polymère peut adopter trois structures moléculaires de base, présentées dans la

## Polymer Basics

- **poly = many**
- mer = parts**
- **degree of polymerization = DP**

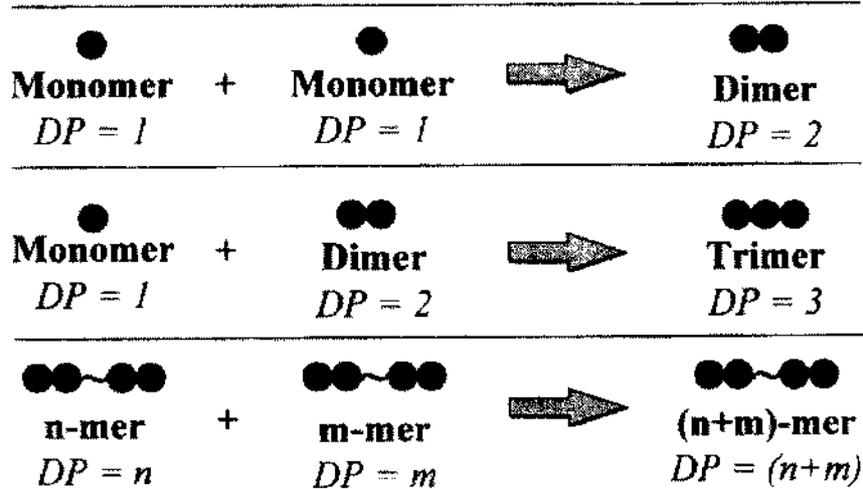


Figure 1.1 : Définition d'un polymère

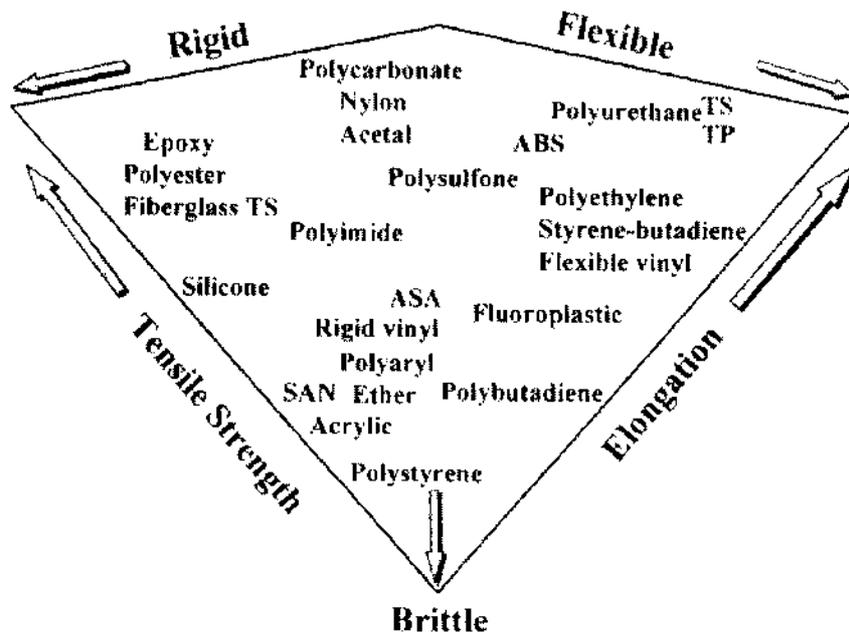


Figure 1.2 : Caractéristiques des polymères

figure 1.3 :

1. *linéaire*. La macromolécule se présente sous la forme d'une longue chaîne ;
2. *branchée*. Une longue chaîne sur laquelle viennent s'embrancher des chaînes de longueur variable, en général plus petites ;
3. *en réseau*. Les chaînes sont reliées entre elles en plusieurs points formant un réseau tridimensionnel.

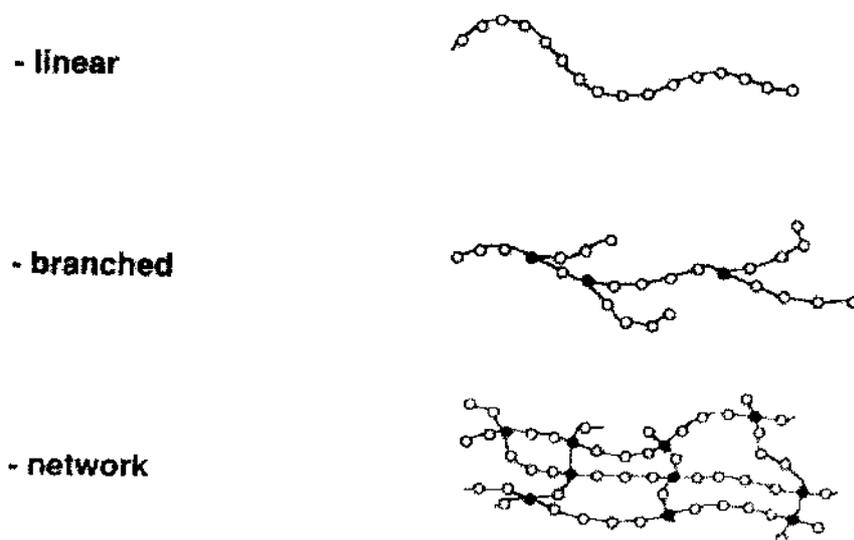


Figure 1.3 : Structures des chaînes moléculaires

Ces différentes structures vont permettre de classer les polymères en deux grandes catégories : les *thermoplastiques* et les *thermodurcissables*.

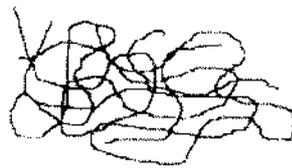
### 1.2.2 Thermoplastiques

Les thermoplastiques ont une structure linéaire ou branchée. Ils présentent la particularité de s'écouler à la chaleur, ce qui facilite leur mise en forme. Ils sont répartis en deux grandes familles : les *amorphes* et les *semi-cristallins*. Cette *morphologie* (figure 1.4) a une influence importante sur les propriétés des polymères thermoplastiques.

### Polymères amorphes

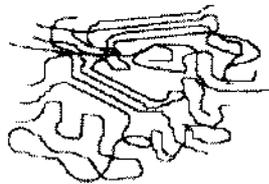
Dans un polymère amorphe, les chaînes se présentent sous la forme de pelotes statistiques (figure 1.4). Les chaînes sont enchevêtrées et on note l'absence de structure ordonnée.

Quand on chauffe un polymère amorphe, il subit une transition douce de l'état solide à l'état fluide, il n'y a donc pas de température de fusion. En effet, la structure des chaînes de macromolécule en pelote compacte et désordonnée empêche une transition brutale entre les états solide et liquide. Cependant, une brusque variation de mobilité moléculaire est observée à une température appelée *température de transition vitreuse* notée  $T_g$ .



#### **Amorphous**

**natural rubber**  
**polycarbonate (PC)**  
**acrylonitrile-butadiene-styrene (ABS)**  
**polystyrene**



#### **Semi-crystalline**

**polyamide**  
**polyethylene terephthalate (PET)**  
**nylon**



#### **Crystalline**

**linear polyethylene**  
**polypropylene**

Figure 1.4 : *Morphologie des thermoplastiques*

### Polymères semi-cristallins

Un polymère purement cristallin, quand à lui, présente des chaînes qui s'arrangent de façon ordonnée. Contrairement aux amorphes, les cristallins possèdent une température de fusion notée  $T_m$ . Cependant, un polymère totalement cristallin n'existe pas en réalité. Il reste toujours des défauts ou bien l'extrémité des chaînes qui ne peuvent adopter une

structure cristalline.

Les semi-cristallins présentent à la fois une partie amorphe où les chaînes moléculaires sont désordonnées et une partie cristalline ordonnée (figure 1.4). Ils présentent donc à la fois une température de transition vitreuse (correspondant à la mobilité de la phase amorphe) et une température de fusion (pour laquelle la phase cristalline se liquéfie). On a donc toujours  $T_g < T_m$ .

Les polymères semi-cristallins peuvent être caractérisés par leur taux de cristallinité  $x_c$  qui représente la fraction massique ou molaire d'unités structurales cristallisées par rapport à la totalité des unités présentes.

Tableau 1.1 : *Avantages et désavantages des thermoplastiques*

<b>avantages</b>		<b>désavantages</b>
Stabilité dans le temps (pas de polymérisation au cours du temps)		forte viscosité du fondu  fluage
Recyclable (on peut les liquéfier à nouveau)		
Facile à réparer (par soudure ou collage)		
Postformable		
<b>amorphe</b>	<b>cristallin</b>	
bonne résistance aux impacts	module plus élevé	
moins de retrait au refroidissement	plus grande dureté	

Comme on le voit dans la table 1.1, chacune des morphologies possède des propriétés intéressantes. Les polymères semi-cristallins peuvent hériter plusieurs qualités complémentaires venant à la fois de leurs parties amorphe et cristalline.

### Caractéristiques générales

La figure 1.5 issue de [Krevelen 90] montre les différentes propriétés thermophysiques et mécaniques des polymères amorphes, cristallins et semi-cristallins.

À la température de transition vitreuse, le coefficient de dilatation thermique et la

capacité calorifique des polymères amorphes subissent une discontinuité. La conductivité thermique atteint un maximum tandis que le volume spécifique montre une rupture de pente caractéristique. Le module chute brutalement, le polymère devient alors facilement malléable. Dans le cas d'une cristallinité totale, il existe une température de fusion pour laquelle toutes les propriétés subissent une discontinuité. Le comportement semi-cristallin se déduit quant à lui des comportements amorphe et cristallin.

En général, la morphologie est modifiée par le processus de mise en forme : un refroidissement lent conduit à un taux de cristallinité élevé tandis que les taux de refroidissement rapides piègent la nature amorphe du fondu et abaissent de ce fait le taux de cristallinité.

Il est de plus nécessaire de veiller à ce que les paramètres du processus d'élaboration soient en adéquation avec les propriétés du matériau utilisé. La figure 1.6 montre la fenêtre d'utilisation d'un thermoplastique en coordonnées pression d'injection – température.

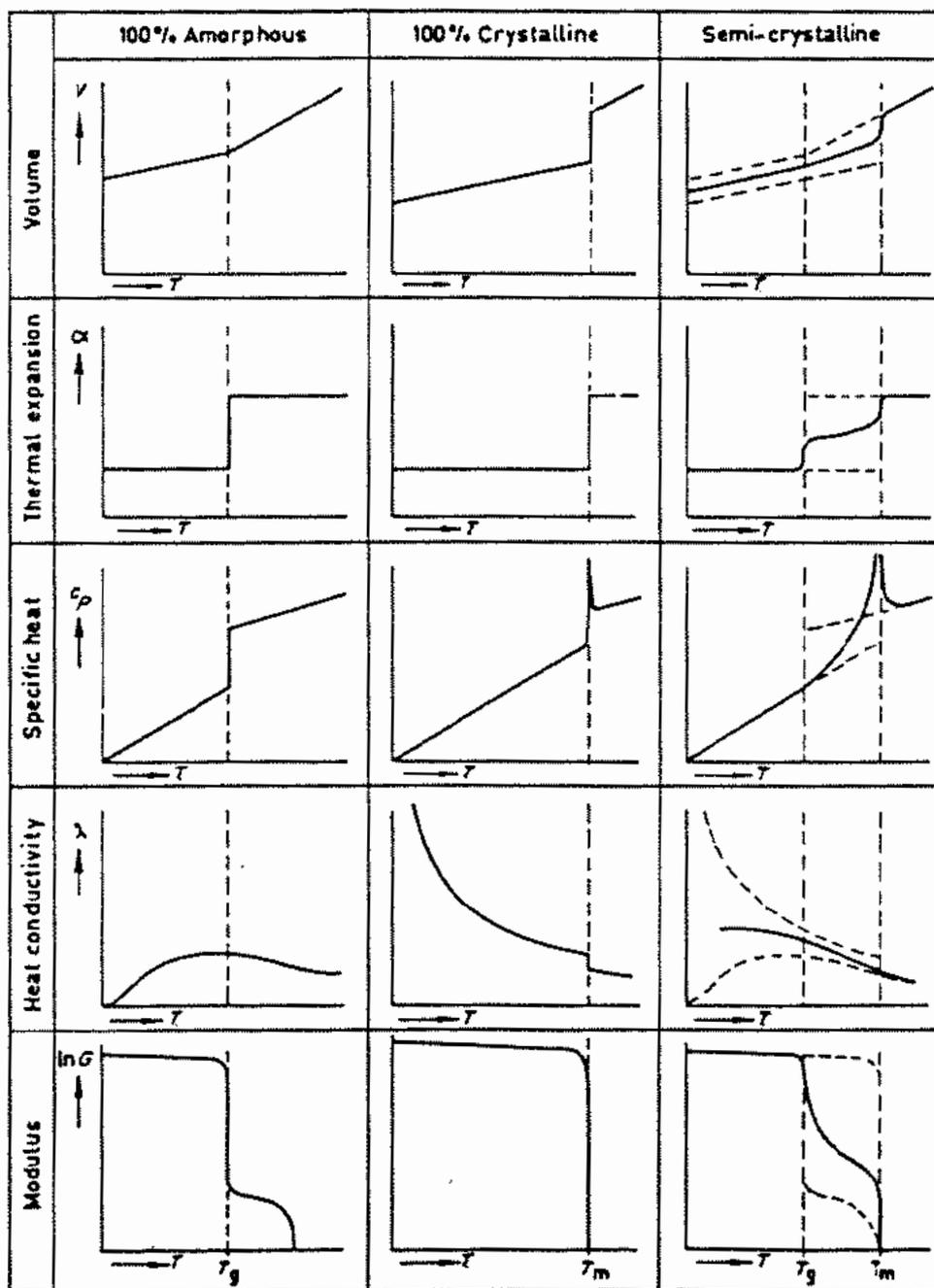
La limite en pression basse (le « short shot ») se manifeste par un remplissage incomplet de la cavité moulante.

La limite haute (le « flashing ») est atteinte lorsque la force de fermeture du moule ne suffit pas à le maintenir fermé. On assiste alors à une fuite de matière le long du joint de fermeture.

Les limites en températures sont fixées par les caractéristiques physiques du matériau utilisé, c'est à dire la température de fusion (ou la température à partir de laquelle il est possible d'injecter dans le cas d'un amorphe) en limite basse et la température de destruction du matériau en limite haute.

### 1.2.3 Thermodurcissables

Les thermodurcissables ont une structure en réseau tridimensionnel, ce qui rend leur fusion impossible. La rigidité ainsi que la stabilité thermique du polymère est liée au taux de réticulation, c'est à dire à la densité de points de liaison entre les chaînes macromoléculaires (figure 1.4). Le tableau 1.2 montre schématiquement les avantages et les inconvénients des thermodurcissables.

Figure 1.5 : *Transitions – d'après [Krevelen 90]*

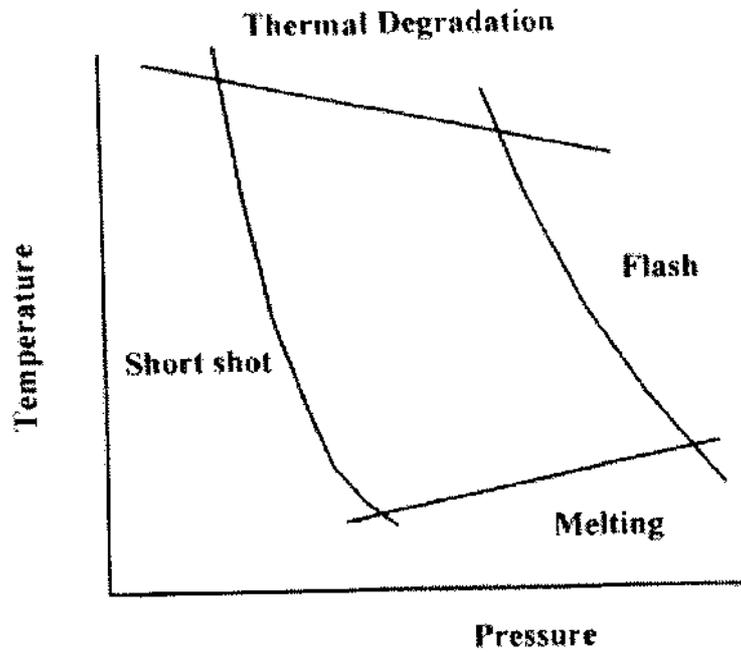


Figure 1.6 : Fenêtre d'utilisation des thermoplastiques

Tableau 1.2 : Avantages et désavantages des thermodurcissables

avantages	désavantages
Faible viscosité de la résine	Cassant Non recyclable par techniques standard Non postformable
Bon mouillage des fibres	
Bonne stabilité thermique après polymérisation	
Résiste aux agressions chimiques	
Peu sensible au fluage	

### 1.3 Choisir une stratégie de mise en forme

Parmi les différents procédés de mise en forme existants sur le marché, ce sont les spécificités de production d'une pièce donnée qui conduisent au meilleur choix. En effet, de nombreux paramètres influencent le choix du procédé. Citons parmi eux :

- la taille de la pièce ;
- la complexité de la géométrie ;
- la tolérance sur les spécifications initiales ;
- la qualité de l'état de surface recherché ;
- les impératifs liés au matériau utilisé (température maximale, ...) ;
- le volume de production ;
- le temps alloué à la fabrication ;
- ...

De plus, tous ces paramètres sont corrélés et ont une influence directe sur les caractéristiques et les coûts de la pièce.

Nous nous limitons ici au procédé de moulage par injection, qui sera décrit en détail au paragraphe 1.4. Il se place au premier rang mondial en terme de chiffre d'affaire et au second pour ce qui concerne le tonnage, après l'extrusion.

### 1.4 Moulage par injection

De nombreux objets de la vie quotidienne sont fabriqués par le procédé d'injection : stylos, fixations de ski, jouets, manches d'outils, ... Cette technique trouve également de nombreuses autres applications dans les domaines de l'aérospatiale, des articles de sport ou de l'automobile.

Ce procédé permet de produire des pièces de géométrie complexe avec un faible coût de production et une cadence élevée. Il est en outre possible d'utiliser une vaste gamme

de matériaux. De plus, l'aspect de surface des pièces injectées est très bon, dès lors que le procédé est bien maîtrisé. C'est là un de ses points faibles ; bien que le fonctionnement au quotidien d'une presse à injecter ne requière pas un niveau de compétence très élevé, le dessin et la conception des presses et des moules est extrêmement complexe. L'investissement initial est également très élevé et, enfin, ce procédé est limité aux pièces de petite taille (généralement de l'ordre du centimètre).

Bien qu'un tonnage important de matière soit destiné à des applications « bas de gamme », de nombreuses pièces de haute technologie sont actuellement moulées en utilisant ce procédé.

### 1.4.1 Principe général

Le schéma de la figure 1.8 illustre le principe du moulage par injection. L'injection d'une pièce est effectuée de la façon suivante :

1. Dans un premier temps, une vis sans fin placée dans un fourreau chauffant (figure 1.7) fait fondre des granulés de polymère et dose la quantité de liquide nécessaire pour remplir le moule.
2. Le nez de la buse d'injection se met ensuite au contact du moule et le polymère fondu est injecté à grande vitesse dans un moule refroidi par la circulation d'un fluide caloporteur, habituellement de l'eau ou de l'huile. Le système d'alimentation de l'empreinte permet au polymère de passer du nez de la buse d'injection à la cavité moulante. Il est généralement constitué d'une carotte (veine principale d'alimentation) et éventuellement de canaux secondaires d'alimentation.
3. Après le remplissage du moule, la pression est maintenue par la vis, qui continue à injecter de la matière de façon à compenser le retrait de la pièce qui se refroidit.
4. Lorsque le seuil d'injection est solidifié, il devient impossible d'ajouter de la matière. La pièce se refroidit alors à masse constante.
5. Après la solidification et le refroidissement de la pièce, celle-ci est éjectée par l'ouverture du moule.

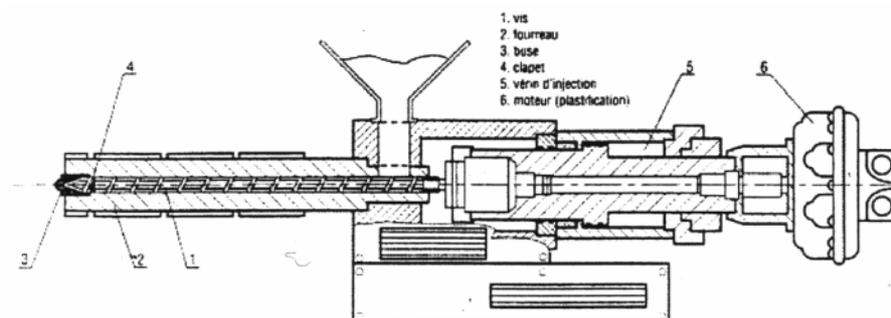


Figure 1.7 : Schéma de principe d'une presse à injecter

La figure 1.9 montre les durées typiques des différentes phases d'un cycle d'injection. On remarque que le remplissage prend une part extrêmement faible du temps total du cycle, de même que les phases où le moule est en mouvement. En revanche, la pièce refroidit pendant plus des trois quarts de la durée du cycle.

Une bonne connaissance des paramètres influençant la cinétique des échanges thermiques peut permettre d'accélérer le refroidissement de la pièce et donc augmenter la productivité en diminuant la durée de chaque cycle.

Les différentes étapes du cycle d'injection sont également présentées sur la figure 1.10. Dans cet exemple, la pression s'annule avant la solidification et l'ouverture du moule. En fonction des paramètres opératoires, la chronologie de ces étapes peut être modifiée (l'ouverture du moule peut avoir lieu avant que la pression ne s'annule par exemple).

## 1.5 Particularités du moulage par injection

### 1.5.1 Retrait

Les matières plastiques utilisées pour le moulage par injection subissent une variation importante de volume durant leur refroidissement, comme le montre leur diagramme PVT (figure 1.11). La phase de compactage permet de compenser en partie ce retrait en continuant à injecter de la matière après le remplissage du moule. On peut ainsi rajouter de l'ordre de 10 % de matériau pour un amorphe et 20 % pour un semi-cristallin [Agassant 97].

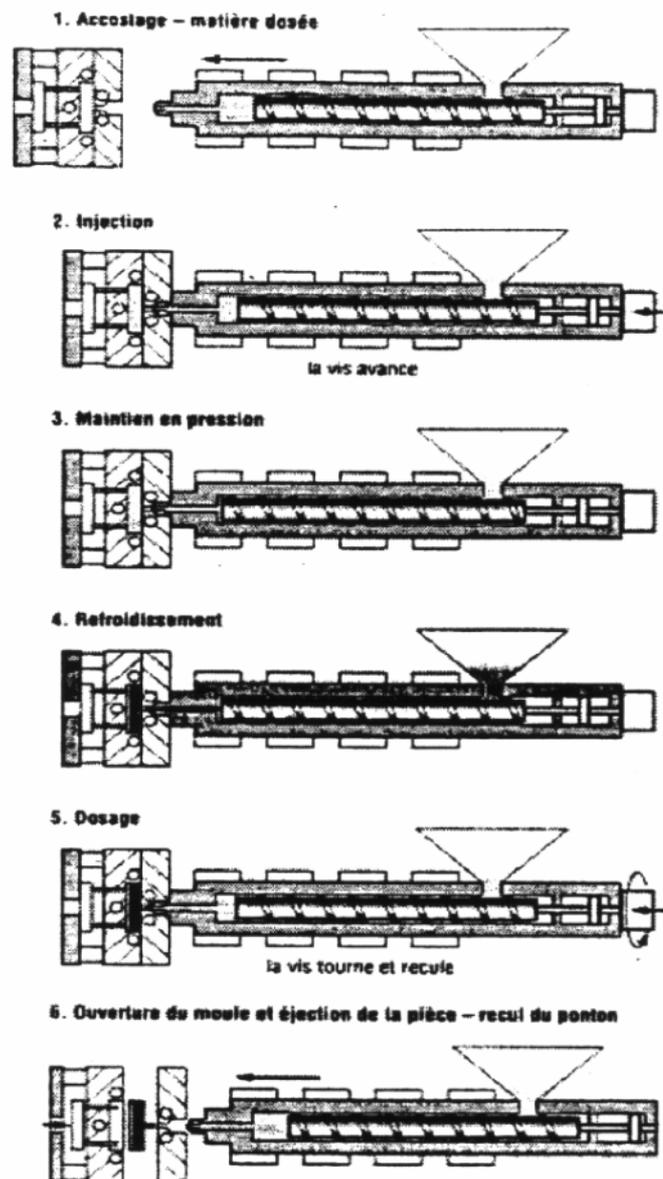


Figure 1.8 : Les différentes phases de l'injection

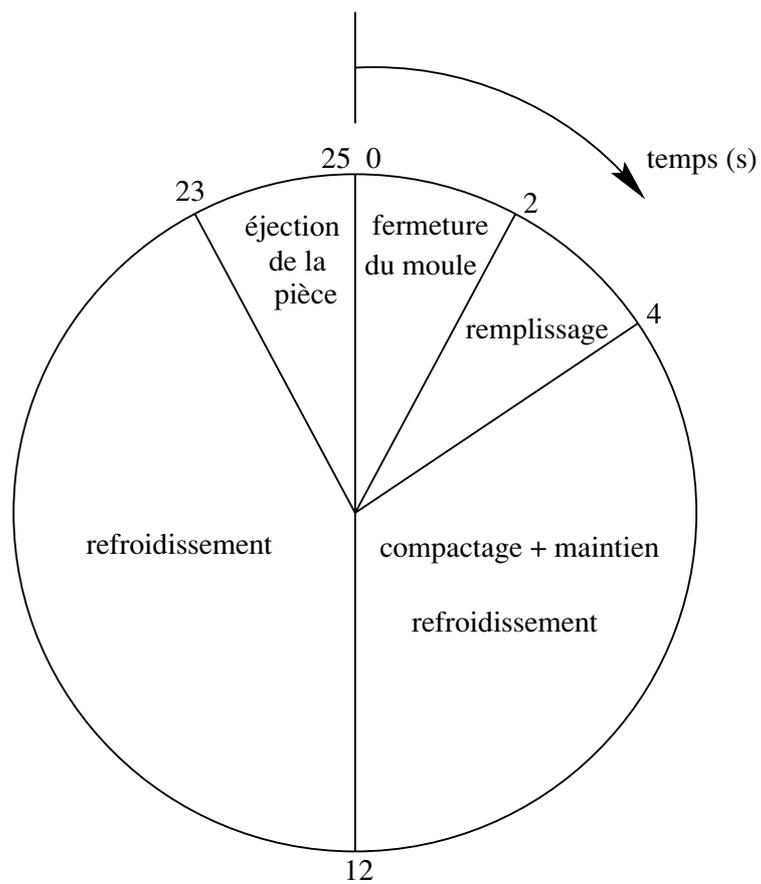


Figure 1.9 : *Cycle du moulage par injection*

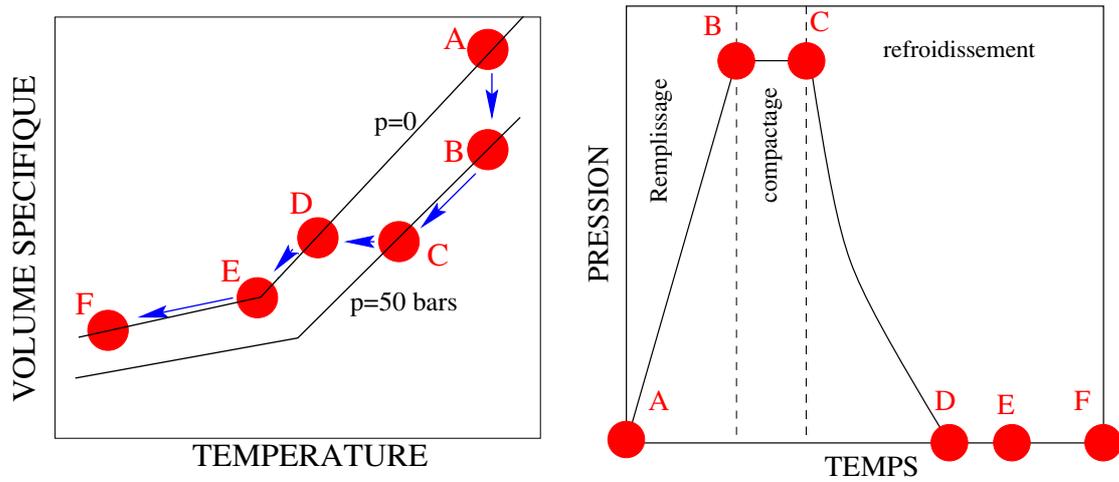


Figure 1.10 : *Évolution du cycle en pression et volume spécifique*

A	point de départ	B	moule rempli
C	fin du compactage	D	baisse de la pression
E	solidification	F	éjection

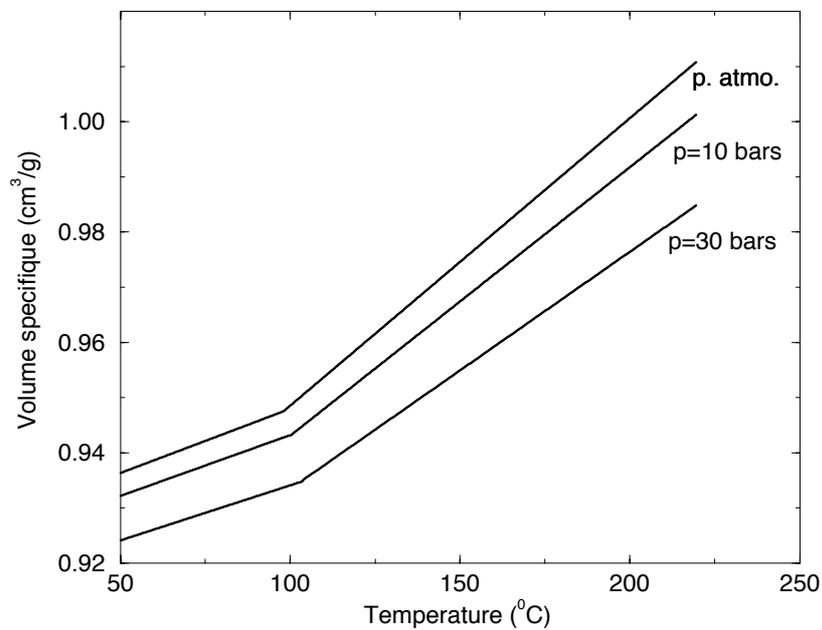


Figure 1.11 : *Diagramme PVT d'un polymère amorphe (ABS)*

Cependant, après le figeage du seuil, le refroidissement provoque une baisse de pression dans la cavité, pouvant provoquer un décollement de la pièce des parois du moule si la pression devient nulle avant le refroidissement total. Outre un non respect de cotes de la pièce ou des défauts d'aspect, ce décollement ralentit le refroidissement en intercalant une lame d'air isolante entre le moule et le polymère. Il est possible de quantifier l'influence de ce phénomène en introduisant la notion de résistance thermique de contact.

### 1.5.2 Résistances thermiques de contact (RTC)

Le concept de résistance thermique de contact peut être illustré dans un cas de conduction thermique monodimensionnel. Le flux de chaleur  $\varphi$  en régime stationnaire dans un matériau homogène de longueur  $l$  est calculé par l'équation (1.1).

$$\varphi = -k \frac{T_2 - T_1}{2l} = -\frac{T_2 - T_1}{R} \quad (1.1)$$

où  $k$  est la conductivité thermique, et  $R = \frac{2l}{k}$  la résistance thermique.

Dans le cas où l'on ajoute un autre matériau de conductivité thermique  $k'$  et de largeur  $\delta$  (figure 1.12), la conservation du flux passant au travers du matériau s'écrit :

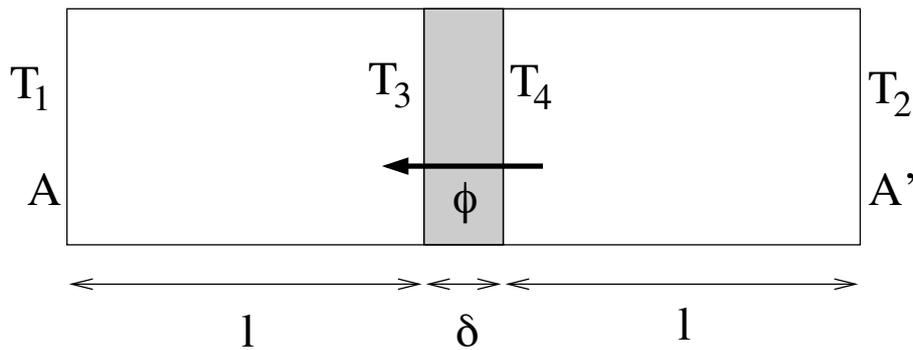


Figure 1.12 : Schéma de l'exemple

$$\varphi = -k \frac{T_3 - T_1}{l} = -k' \frac{T_4 - T_3}{\delta} = -k \frac{T_2 - T_4}{l} \quad (1.2)$$

Dans le cas où le matériau intercalé est de faible épaisseur, il peut représenter du point de vue thermique une interface imparfaite. La figure 1.13 montre le profil de température

suivant la coupe AA'. On remarque le saut de température provoqué par la présence du matériau intercalé en comparaison au cas homogène.

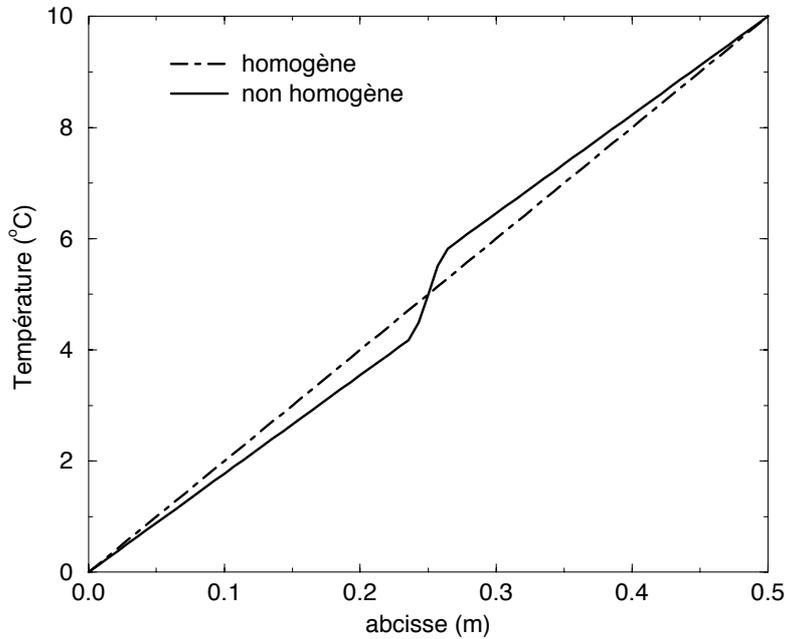


Figure 1.13 : *Profil de température*

De la même manière que dans l'équation (1.1), on définit la résistance thermique de contact par

$$RTC = \frac{T^+ - T^-}{\varphi} = \frac{\delta T}{\varphi} \quad (1.3)$$

où  $T^+$  et  $T^-$ , les températures à l'interface, sont calculées par une extrapolation linéaire (figure 1.14).

Dans le cas d'un contact bidimensionnel, les lignes de flux de chaleur ne sont plus perpendiculaires à l'interface mais se resserrent autour des zones où le contact est effectif - les zones de constriction -, ce qui montre que le transfert thermique y est favorisé (figure 1.15). À d'autres endroits de l'interface, les poches d'air isolent les deux solides en créant une résistance thermique importante. Malgré la variation rapide des températures au niveau du contact, le saut de ces températures à l'interface défini dans l'équation (1.3) reste constant. En effet, lorsque l'on se place suffisamment loin de l'interface, les hétéro-

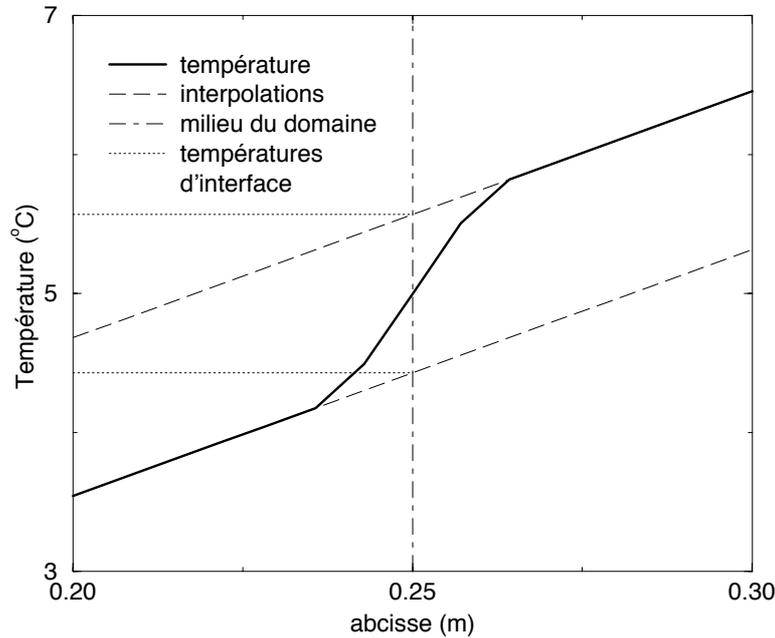


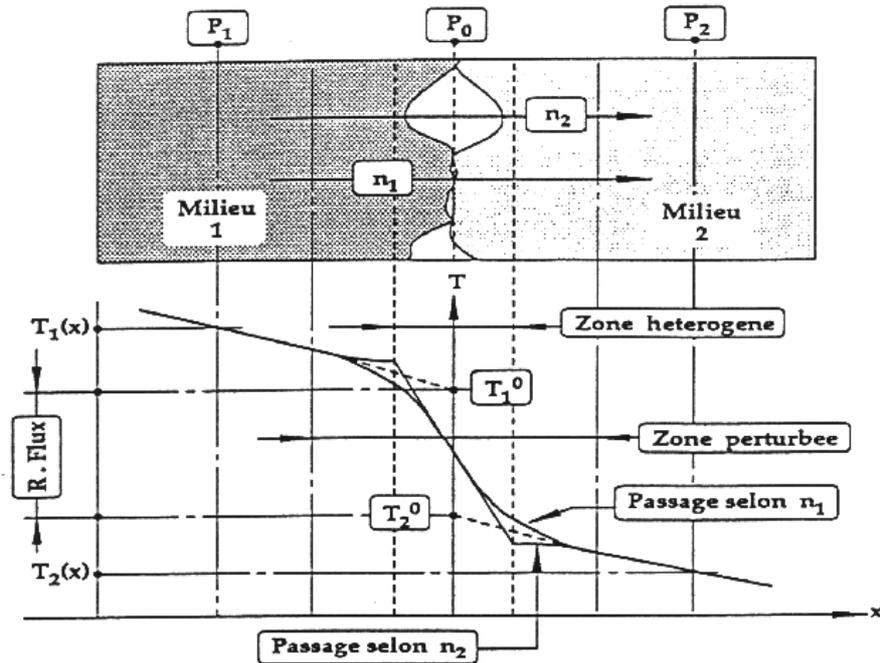
Figure 1.14 : Détermination de  $\delta T$

générités de contact locales n'ont plus d'influence sur le profil de température. Ceci permet d'étendre la notion de RTC à l'ensemble de la surface de contact bidimensionnelle.

En présence d'aspérités, la surface de contact réelle entre les deux matériaux – notée  $S_r$  – est beaucoup plus petite que l'aire de contact apparente  $S_a$ . On définit la surface réelle de contact  $\varepsilon^2$  par le rapport de ces deux aires (1.4) :

$$\varepsilon^2 = \frac{S_r}{S_a} \quad (1.4)$$

On remarque donc qu'un « bon » contact va amener un grand  $\varepsilon^2$  et inversement. En outre, cet indicateur de la qualité du contact donne aussi une idée de la valeur de la RTC. En effet, plus la zone de contact est importante, et plus le flux qui la traverse est grand, ce qui entraîne une RTC plus faible (dans le cas où le milieu interstitiel est un isolant thermique).

Figure 1.15 : *Contact bidimensionnel imparfait*

### 1.5.3 Contraintes résiduelles

Lors du moulage de pièces par injection, il est fréquent d'observer une déformation de la pièce à la sortie du moule. En effet, durant l'écoulement ou le refroidissement des polymères naissent des tensions internes dues à la rhéologie complexe des matériaux utilisés. La connaissance de ces contraintes résiduelles est essentielle pour prévoir la géométrie finale de la pièce [Baaijens 91, Boitout 95, Struik 78].

1. *Contraintes liées au remplissage du moule.* Le polymère fondu est un matériau viscoélastique. Sa déformation durant la phase de remplissage crée donc des contraintes qui ne peuvent pas se relaxer totalement dans la suite de l'histoire de la pièce.

Ces contraintes sont dues aux orientations moléculaires préférentielles générées par l'écoulement et qui restent piégées par la solidification. Elles sont inférieures d'un ordre de grandeur aux autres types de contraintes mais les effets d'orientation moléculaire modifient les propriétés optiques des matériaux, ce qui peut se révéler gênant pour certaines applications (les optiques automobiles par exemple sont en PMMA).

De plus, les contraintes générées ainsi ne sont pas isotropes et entraînent un com-

portement ultérieur différent dans les directions parallèle et normale à l'écoulement.

2. *Contraintes liées au compactage.* Dans le processus d'injection, on compense le retrait par le maintien d'une pression dans le fluide. Cette pression reste piégée dans le matériau lorsque la température devient inférieure à la température de transition vitreuse.
3. *Contraintes d'origine thermique.* Ces contraintes apparaissent lorsque la pièce est refroidie de façon inhomogène (par exemple dans un moule). Si les propriétés mécaniques dépendent de la température, ce qui est le cas des polymères, ces contraintes persistent après refroidissement.

Dans l'exemple d'une plaque mince libre de se déformer refroidie par les côtés, les couches extérieures de polymère sont refroidies les premières et peuvent se contracter librement. À l'inverse, la zone de cœur voit son retrait gêné par les couches extérieures précédemment solidifiées. Il en résulte un profil de contrainte parabolique bien connu [Struik 78].

## 1.6 Conclusion

Ce premier chapitre énonce quelques généralités sur la mise en forme des matières plastiques. Après un bref rappel sur les propriétés des polymères, nous présentons de façon schématique les avantages et les inconvénients de ces matériaux du point de vue de leur mise en forme. Le procédé de moulage par injection est ensuite détaillé et ses particularités sont mises en évidence.

Ainsi, l'influence des résistances thermiques de contact sur le refroidissement de la pièce est abordé. La prise en compte de ce phénomène est capitale pour la compréhension et la simulation des évolutions thermiques de la pièce et donc pour l'optimisation de la durée du cycle.

Le retrait au refroidissement des polymères joue également un grand rôle dans le procédé puisqu'il peut être à l'origine de nombreux défauts dans les pièces. L'approche du comportement des polymères par leur diagramme PVT nous permet de prévoir les retraits volumiques et de mieux prédire la valeur des résistances thermiques.

Enfin, le refroidissement piège des contraintes résiduelles qui sont à l'origine de pièces tordues ou même cassées durant la fabrication.

Comme on le voit, les phénomènes qui interviennent dans le moulage par injection sont complexes et la simulation d'un tel procédé nécessite une bonne connaissance de la physique qui y est associée. Ce sujet sera le thème du chapitre suivant.



## Chapitre 2

# Physique du procédé

La résolution d'un problème thermomécanique nécessite bien sûr la résolution des équations régissant les phénomènes thermiques d'une part et mécanique d'autre part, mais aussi la prise en compte du couplage les reliant. En effet, le transfert thermique à l'interface moule-pièce est étroitement liée à la qualité du contact entre l'acier et le polymère.

De nombreuses études ont été menées sur ce sujet, citons par exemple S. Quilliet [Quilliet 98] qui a montré l'influence de la pression sur la cinétique thermique : plus la pression est forte, meilleur est le contact et donc le transfert thermique, ce qui entraîne un refroidissement plus rapide. A.S. Marchand [Marchand 98] a également étudié les phénomènes de RTC à l'interface de solides déformables en frottement en étudiant la modification de la topologie de l'interface à petite échelle.

On peut également observer un décollement de la pièce des parois du moule au cours du processus. Une lame d'air s'intercale alors entre les deux matériaux, ce qui a bien sûr une influence sur le transfert thermique [Lebot 98].

Citons enfin A. Millischer [Millischer 00] qui a étudié les transferts thermiques dans un autre procédé de mise en forme aux problématiques voisines des nôtres : l'injection BMC.

On voit donc que la détermination précise de l'évolution thermique du problème nécessite une bonne connaissance des pressions et des déplacements, qui permettent de calculer l'évolution de l'épaisseur des lames d'air. De la même façon, un calcul mécanique précis impose une bonne connaissance de la rhéologie des matériaux, en particulier l'utilisation

de lois piézo- et/ou thermodépendantes.

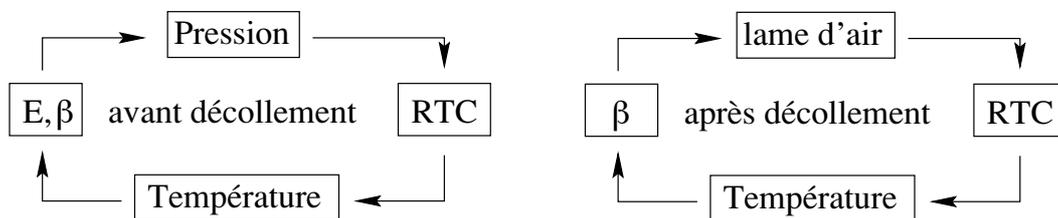


Figure 2.1 : *Couplage thermomécanique du procédé*

Par ailleurs, la phase d'injection, étudiée par exemple par [Agassant 97] fait intervenir de nombreux phénomènes physiques. Nous sommes en effet en présence d'un écoulement diphasique polymère fondu - air qui fait intervenir la tension superficielle au niveau de l'interface et des problèmes de mouillage des parois du moule. Le polymère fondu est également par nature de rhéologie complexe, ce qui nécessite l'emploi de lois spécifiques. De plus, le polymère est refroidi, voire commence sa solidification, lors de l'injection ce qui demande la prise en compte de phénomènes thermiques comme le changement de phase sans oublier les résistances thermiques de contact qui sont quant à elles toujours présentes.

Nous rappellerons dans un premier temps quelques notions de cinématique avant d'écrire les équations thermoélastiques couplées. La détermination des caractéristiques thermophysiques du matériau utilisé sera ensuite présentée avant de finir par des éléments de mécanique des fluides et des solides.

## 2.1 Rappels de cinématique

### 2.1.1 Description du mouvement

Afin de décrire un mouvement du point de vue cinématique, il est nécessaire de connaître le vecteur vitesse  $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$ , où  $\mathbf{r}(x, y, z)$  représente la *position* d'une particule. Deux méthodes permettent de déterminer ce champ vectoriel.

La première consiste à suivre la particule dans son mouvement en relevant l'endroit où elle se trouve lorsque le temps varie. Nous obtenons alors la *trajectoire* de la particule. À partir des conditions initiales qui donnent au temps  $t = t_0$  la position exacte  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0$

nous pouvons déterminer la trajectoire des particules en fonction du temps par la relation

$$\mathbf{V} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (2.1)$$

L'autre méthode est basée sur la détermination dans le champ de vitesse des lignes qui, à un instant  $t$  fixé, possèdent en chacun de leurs points une tangente parallèle au vecteur vitesse  $\mathbf{V}$ . Ces *lignes de courant* changent de position en fonction du temps. Dans le cas où l'écoulement est stationnaire, c'est à dire indépendant du temps, les particules suivent continuellement les mêmes trajectoires engendrant ainsi les mêmes lignes de courant. Trajectoires et lignes de courant sont alors confondues.

Ces deux méthodes, introduites par le mathématicien suisse Leonhard Euler (1707 – 1783) reposent sur deux descriptions mathématiques différentes :

- la *description lagrangienne* : le vecteur position  $\mathbf{r}_0$  de la particule à un temps initial  $t_0$  est utilisé comme *étiquette*. Le mouvement est alors complètement déterminé dès lors que l'on connaît le vecteur position de la particule qui est une fonction de la position initiale et du temps :  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t)$  ;
- la *description eulérienne* : toutes les grandeurs du mouvement (déplacement, vitesse, pression, ...) sont données comme fonctions du vecteur position  $\mathbf{r}$  et du temps  $t$ . Pour obtenir le champ de vitesse, il faut résoudre l'équation (2.1) avec la condition initiale  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$  au temps  $t = t_0$  pour obtenir les trajectoires des particules.

Dans la mesure où il n'est pas nécessaire d'obtenir les positions relatives des particules le long des trajectoires en fonction du temps, nous adoptons ici la méthode eulérienne. Au lieu de suivre une particule le long de sa trajectoire, l'étude est effectuée sur un point donné de l'espace. À chaque instant des particules différentes passent par ce point où sont étudiées les variations temporelles des champs de déplacement, pression, vitesse, température, etc.

### 2.1.2 Dérivée particulaire

Soit  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  une grandeur quelconque du mouvement. La variation totale de cette quantité est donnée en coordonnées cartésiennes par :

$$d\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} dt + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} dx + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} dy + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial z} dz \quad (2.2)$$

ou encore

$$d\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} dt + \nabla \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (2.3)$$

Le vecteur  $\mathbf{r}$  est interprété ici comme une fonction des coordonnées  $\mathbf{r}_0$  et  $t$ , ce qui donne  $\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{V}$  dans la mesure où  $\mathbf{r}_0$  est une constante.

La dérivée totale de  $\mathbf{F}$ , qui traduit sa variation dans le temps  $dt$  lorsque la particule se déplace sur sa ligne de courant s'écrit donc :

$$d\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{F} \quad (2.4)$$

Ce type de dérivée, appelée *dérivée particulière*, peut s'appliquer indifféremment sur une fonction scalaire ou vectorielle.

### 2.1.3 Équations de bilan

Les équations de bilans peuvent être écrites soit sous forme intégrale soit sous forme locale.

Considérons le système matériel mobile continu et déformable  $\Sigma$  de frontière  $\Gamma$  et supposons le parcouru d'une grandeur *extensive* – c'est à dire susceptible de faire l'objet d'un bilan – pendant une durée  $dt$ . Cette quantité  $A$  peut être une fonction scalaire ou vectorielle.

Soit  $K$  la « somme » de  $A$  contenue dans  $\Sigma$  à l'instant  $t$  :

$$K = \int_{\Sigma} A(\mathbf{r}, t) d\Sigma \quad (2.5)$$

La notion de dérivée particulière peut s'appliquer à cette grandeur, ce qui donne le résultat suivant, après utilisation du théorème de la divergence :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Sigma} A(\mathbf{r}, t) d\Sigma = \int_{\Sigma} \frac{\partial A}{\partial t} d\Sigma + \int_{\Gamma} A \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (2.6)$$

Dans cette expression,  $\mathbf{V}$  représente le vecteur vitesse de l'élément de surface  $d\Sigma$ .

### Bilan de masse

Si on se place dans le cas d'un écoulement conservatif, c'est à dire qu'il n'y a ni apparition ni disparition de matière, on peut réécrire l'équation (2.6) avec  $A = \rho$ .

$$\frac{dm}{dt} = \int_{\Sigma} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Sigma + \int_{\Gamma} \rho \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} d\Gamma = 0 \quad (2.7)$$

Ce qui s'écrit sous forme locale, après application du théorème de la divergence :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (2.8)$$

Cette *équation de continuité* traduit la conservation de la masse au cours du temps.

### Bilan de quantité de mouvement

D'après la loi fondamentale de la dynamique, la variation temporelle de la quantité de mouvement est égale à l'ensemble des forces extérieures appliquées au système. Ces forces extérieures sont de deux types :

- les forces de volume, comme la gravité ou les forces électromagnétiques s'appliquent *volumiquement* sur le système.
- Les forces de surface, comme les contraintes ou la tension superficielle s'exercent sur les éléments de surface  $d\Gamma$

En posant  $A = \rho \mathbf{V}$  dans l'équation (2.6), on obtient :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Sigma} \frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} d\Sigma = \int_{\Sigma} \rho \mathbf{g} d\Sigma + \int_{\Gamma} \bar{\bar{\sigma}} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (2.9)$$

Dans cette équation, la seule force volumique en présence est la force de gravité ; les forces de surface sont quant à elles définies par le tenseur des contraintes qui tient compte à la fois des contraintes visqueuses, des pressions et des forces de tension superficielles.

## 2.2 Écriture du problème thermoélastique couplé

Cette section est consacrée à l'écriture des équations permettant la résolution d'un problème thermoélastique couplé dans un solide [Boley 60].

Cette écriture rigoureuse des équations de la thermomécanique est omise dans de nombreux ouvrages qui ne présentent que les équations « usuelles » tant il est vrai que certains termes peuvent être quasi systématiquement négligés.

Cependant, l'écriture des équations complètes permet de comprendre la nature intime du couplage thermomécanique. Ensuite seulement, l'utilisation d'hypothèses simplificatrices peut être envisagée lorsque des termes négligeables apparaissent.

### 2.2.1 Application des principes de la thermodynamique

L'écriture *locale* du premier principe de la thermodynamique (annexe A) en représentation eulérienne [Salençon 88] conduit à l'équation de l'énergie :

$$\rho \frac{de}{dt} = \sigma_{ij} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

où  $\rho$  est la masse volumique supposée ici constante afin de clarifier les calculs,  $e$  est l'énergie interne spécifique,  $\sigma_{ij}$  sont les composantes du tenseur des contraintes,  $\varepsilon_{ij}$  sont les composantes du tenseur des déformations et  $q_i$  est le vecteur courant de chaleur sortant.

L'étude du second principe de la thermodynamique (annexe A) par Carathéodory [Carathéodory 09] permet d'écrire l'équation de l'énergie (2.10) sous une forme qui, dans

le cas particulier d'un solide élastique s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{ij} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} + \rho T \frac{\partial \psi}{\partial t} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} \\ -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho T \frac{\partial \psi}{\partial t} \end{array} \right. \quad (2.11)$$

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_{ij} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} + \rho T \frac{\partial \psi}{\partial t} = \rho \frac{\partial e}{\partial t} \\ -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho T \frac{\partial \psi}{\partial t} \end{array} \right\} \quad (2.12)$$

où  $T$  est la température absolue et  $\psi$  est l'entropie spécifique.

Le développement des calculs à partir de ces deux équations permet de tirer la relation contrainte-déformation de (2.12) et l'équation de la chaleur de (2.11), c'est à dire les équations thermomécaniques couplées.

### 2.2.2 Relation contrainte-déformation

On introduit la fonction *énergie libre*  $\phi$  définie par :

$$\phi(\varepsilon_{ij}, T) = e(\varepsilon_{ij}, T) - T\psi(\varepsilon_{ij}, T) \quad (2.13)$$

L'écriture de (2.13) dans (2.12), en tenant compte de l'indépendance des variables  $(\varepsilon_{ij}, T)$ , conduit à [Boley 60] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}} \\ \psi = -\frac{\partial \phi}{\partial T} \end{array} \right. \quad (2.14)$$

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_{ij} = \rho \frac{\partial \phi}{\partial \varepsilon_{ij}} \\ \psi = -\frac{\partial \phi}{\partial T} \end{array} \right\} \quad (2.15)$$

De plus, en faisant l'hypothèse d'isotropie, l'explicitation de  $\phi$  en fonction des invariants du tenseur des déformations permet d'écrire l'équation classique contrainte-déformation dans le cas d'un solide élastique isotrope [Boley 60] :

$$\boxed{\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \varepsilon_{kk} + 2\mu \varepsilon_{ij} - (3\lambda + 2\mu) \delta_{ij} \alpha (T - T_0)} \quad (2.16)$$

### 2.2.3 Équation de l'énergie pour un solide élastique

Nous pouvons développer l'équation (2.11) et y introduire (2.15) :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} &= \rho T \frac{\partial \psi}{\partial t} = \rho T \left( \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{ij}} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} \right) \\ &= -\rho T \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2} \frac{\partial T}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (2.17)$$

On définit la chaleur spécifique à déformation constante  $C_E$  telle que, lorsque  $\varepsilon_{i,j} = 0$  :

$$-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \underbrace{-\frac{\partial^2 \phi}{\partial T^2} T}_{C_E} \rho \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.18)$$

Or, en dérivant (2.14) par rapport à  $T$ , on a :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \varepsilon_{ij} \partial T} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \quad (2.19)$$

Ce qui permet de réécrire (2.17) :

$$-\frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho C_E \frac{\partial T}{\partial t} - T \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial T} \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} \quad (2.20)$$

Nous pouvons alors utiliser la loi de Fourier de conduction de la chaleur  $q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i}$  et introduire (2.16) dans (2.20) pour obtenir l'équation de conduction de la chaleur dans un solide élastique isotrope (2.21):

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_E \frac{\partial T}{\partial t} - (3\lambda + 2\mu) \alpha T_0 \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t}} \quad (2.21)$$

Cette équation de la chaleur comprenant un terme provenant des déformations mécaniques a été obtenue pour la première fois par Duhamel en 1837 [Duhamel 37].

### Écriture en température-volume spécifique

L'équation (2.21) est écrite pour un *milieu continu*, c'est à dire aussi bien un solide qu'un fluide.

On introduit le module élastique de compression  $K$  :

$$K = -v \left( \frac{\partial p}{\partial v} \right)_T = \frac{3\lambda + 2\mu}{3} \quad (2.22)$$

On sait que

$$\alpha = \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \quad (2.23)$$

$$\chi = \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial p} \right)_T = -\frac{1}{K} \quad (2.24)$$

En utilisant la relation

$$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \left( \frac{\partial T}{\partial v} \right)_p \left( \frac{\partial v}{\partial p} \right)_T = -1 \quad (2.25)$$

L'équation (2.21) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_E \frac{\partial T}{\partial t} - 3K \alpha T \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} \quad (2.26)$$

Or,  $\varepsilon_{kk} = tr(\bar{\varepsilon})$  représente la déformation volumique, on a donc :

$$\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} = \frac{\rho}{3} \frac{\partial v}{\partial t} \quad (2.27)$$

De plus,  $C_E$  volume spécifique à déformation constante et  $C_v$  volume spécifique à volume constant sont identiques dans le cadre de la théorie linéaire de l'élasticité [Boley 60].

Grâce à (2.24) l'équation (2.26) peut alors s'écrire :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} + \rho T \frac{\alpha}{\chi} \frac{\partial v}{\partial t}} \quad (2.28)$$

Ceci est l'équation classique de transfert de la chaleur dans un milieu continu immobile exprimée en variables température ( $T$ ) et volume spécifique ( $v$ ).

De plus, on tire de (2.23), (2.24) et (2.25) :

$$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v = \frac{\alpha}{\chi} \quad (2.29)$$

### Écriture en pression-température

On tire des relations de Maxwell [Prigogine 99]:

$$\left( \frac{\partial s}{\partial v} \right)_T = \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \quad (2.30)$$

ainsi que :

$$\left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T = - \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_v \quad (2.31)$$

La capacité calorifique à volume constant peut s'écrire :

$$C_v = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_v \quad (2.32)$$

alors que la capacité calorifique à pression constante s'écrit :

$$C_p = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_p \quad (2.33)$$

Il est de plus possible d'écrire la variation d'entropie :

$$ds = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_v dT + \left( \frac{\partial s}{\partial v} \right)_T dv \quad (2.34)$$

ainsi que :

$$ds = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T dp \quad (2.35)$$

À partir de (2.29), (2.30) et (2.32) on peut écrire :

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{C_v}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\alpha}{\chi} \frac{\partial v}{\partial t} \quad (2.36)$$

Ce qui permet de réécrire (2.28) sous une forme plus générale grâce à (2.34) :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho T \frac{\partial s}{\partial t} \quad (2.37)$$

En utilisant (2.23) et (2.31) on obtient :

$$\left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T = -\alpha v \quad (2.38)$$

Puis, à l'aide de (2.33) et (2.35), on tire de (2.37) :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \alpha T \frac{\partial p}{\partial t}} \quad (2.39)$$

### Évolution isobare

L'équation (2.28) peut également s'écrire dans le cas d'une évolution isobare :

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}} \quad (2.40)$$

En écrivant  $dv = \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial v}{\partial p} \right)_p dp = \alpha v dT - \chi v dp$ , on obtient  $\frac{\partial v}{\partial t} = \alpha v \frac{\partial T}{\partial t}$  car l'hypothèse d'évolution isobare entraîne  $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$ .

On tire alors de (2.28) et (2.40) :  $C_p - C_v = \frac{\alpha^2 T v}{\chi}$

Dans le cas particulier d'un fluide incompressible  $\chi \rightarrow \infty$  et donc  $C_p = C_v$ .

## 2.2.4 Théorème d'unicité

Le problème thermoélastique couplé peut être synthétisé par le théorème qui montre son unicité [Weiner 57]:

**Théorème.** *Soit  $\mathcal{D}$  une région régulière de l'espace et  $\partial\mathcal{D}$  sa frontière. Il existe alors au plus un ensemble de fonctions  $\sigma_{ij}(P,t)$  et  $\epsilon_{ij}(P,t)$  de classe  $\mathcal{C}^1$ ,  $u_i(P,t)$  et  $T(P,t)$  de classe  $\mathcal{C}^2$  pour  $P(x_1, x_2, x_3)$  sur  $\mathcal{D} + \partial\mathcal{D}$ ,  $t \geq 0$  qui satisfasse les équations suivantes pour  $P$  dans  $\mathcal{D}$ ,  $t > 0$ :*

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_E \frac{\partial T}{\partial t} + m T_0 \frac{\partial \epsilon_{kk}}{\partial t} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (2.42)$$

les équations suivantes pour  $P$  dans  $\mathcal{D} + \partial\mathcal{D}$ ,  $t \geq 0$ :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.43)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \epsilon_{kk} + 2\mu \epsilon_{ij} - m \delta_{ij} (T - T_0) \quad (2.44)$$

les équations suivantes pour  $P$  sur  $\partial\mathcal{D}$ ,  $t > 0$ :

$$T = F^{(1)}(P, t) \quad (2.45)$$

$$u_i = G_i^{(1)}(P, t) \quad (2.46)$$

les équations suivantes pour  $P$  dans  $\mathcal{D}$ ,  $t=0$ :

$$T = F^{(2)}(P) \quad (2.47)$$

$$u_i = G_i^{(2)}(P) \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_i = G_i^{(3)}(P) \quad (2.49)$$

où les quantités  $k$ ,  $C_E$ ,  $3\lambda + 2\mu$ ,  $m = (3\lambda + 2\mu)\alpha$  et  $T_0$  sont positives.

## 2.3 Hypothèses simplificatrices

L'approche de la thermoélasticité présentée ci-dessus combine à la fois les théories de l'élasticité et de la conduction de la chaleur, ce qui conduit à un système d'équations couplées. Cependant, dans la majorité des cas, il est possible d'introduire des hypothèses simplificatrices qui permettent de découpler les parties thermique et mécanique du problème ou de négliger les effets d'inertie.

### 2.3.1 Dissipation thermoélastique

Lorsque l'on impose une déformation à un solide, l'équation (2.21) montre qu'il en résulte une variation de température dans ce solide. Ce phénomène appelé *dissipation thermoélastique* peut être observé facilement en détendant rapidement un élastique ; celui-ci voit sa température baisser sensiblement. Cependant, il apparaît intuitivement que ce phénomène devient négligeable lorsque les déformations sont petites.

L'équation (2.21) peut être réécrite en remplaçant la capacité calorifique à déformation constante  $C_E$  par la capacité calorifique à volume constant  $C_v$ , ces deux quantités étant équivalentes dans le cas de la théorie linéaire de l'élasticité utilisée ici :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} \left[ 1 + \delta \left( \frac{\lambda + 2\mu}{3\lambda + 2\mu} \right) \left( \frac{\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t}}{\alpha \frac{\partial T}{\partial t}} \right) \right] \quad (2.50)$$

où le paramètre adimensionnel  $\delta$  est défini par :

$$\delta = \frac{(3\lambda + 2\mu)^2 \alpha^2 T_0}{\rho C_v (\lambda + 2\mu)} \quad (2.51)$$

Boley [Boley 60] montre que si le taux de déformation est du même ordre de grandeur que le taux de variation de température, c'est-à-dire que l'histoire des déplacements suit celle des températures (ce qui est le cas lors du refroidissement dans un moule), et que  $\delta \ll 1$  alors le terme de couplage thermomécanique présent dans l'équation (2.21) est négligeable.

Dans le cas d'un polymère, on a les ordres de grandeur suivants :

$$\left. \begin{array}{ll} \lambda = 0,58.10^9 Pa & \mu = 0,38.10^9 Pa \\ \alpha = 1.10^{-4} K^{-1} & T_0 = 300 K \\ \rho = 1000 kg.m^{-3} & C_v = 2000 J.kg^{-1}.K^{-1} \end{array} \right\} \Rightarrow \delta \approx 7.10^{-3}$$

L'hypothèse est donc vérifiée, ce qui permet de négliger le couplage mécanique  $\rightarrow$  thermique pour ne conserver que le couplage thermique  $\rightarrow$  mécanique.

### 2.3.2 Terme d'inertie

Dans le cas d'un solide homogène sans forces volumiques appliquées, l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.9) se réduit après application du théorème de la divergence à :

$$\rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} \quad (2.52)$$

L'influence des variations de la température sur le terme d'inertie de l'équation du mouvement dans les solides (2.52) a été étudiée par Danilovskaya [Danilovskaya 52] et Boley [Boley 60] dans de nombreux cas de figures. Il apparaît dans tous ces cas de figure que les effets d'inertie sont négligeables. Les effets d'oscillations rapides pilotées par l'inertie (comme les vibrations) ne peuvent donc pas être provoqués avec une intensité suffisante et sont de ce fait négligés.

## 2.4 Caractéristiques thermophysiques

La présence d'une température de transition vitreuse est une propriété remarquable des polymères amorphes. À cette température, les caractéristiques physiques du matériau subissent des variations notables dont l'influence sur la physique du problème est importante, comme le montrent les figures 2.2 et 2.5 à 2.8.

La pièce moulée est en Acrylonitrile Butadiène Styrène (ABS), un copolymère couramment utilisé dans l'industrie pour la production d'objets de la vie courante. Des mesures de volume spécifique, conductivité thermique et capacité calorifique ont été effectuées au LT de l'EPUN et nous permettent d'obtenir les lois d'évolution des caractéristiques thermiques thermodépendantes (figures 2.2, 2.5 et 2.6).

### 2.4.1 Capacité calorifique

La figure 2.2 montre la variation de la capacité calorifique  $C_p$  de l'ABS utilisé lors des expériences.

Cette mesure a été effectuée en utilisant un calorimètre différentiel à balayage (Differential Scanning Calorimeter), qui permet d'étudier le comportement thermique du matériau en s'affranchissant en principe des phénomènes de conduction. Le principe de la DSC consiste à comparer les différences d'enthalpie qui apparaissent entre l'échantillon testé et une référence inerte (figure 2.3).

Le four de mesure (qui contient l'échantillon) et le four de référence sont soumis à la même consigne de température (ou de variation de température). La régulation est effectuée selon le mode de compensation de puissance : une première boucle sert à contrôler la température des fours et une seconde à corriger les écarts entre les deux températures. La différence entre les flux de chaleur fournis par les fours permet de calculer la capacité calorifique de l'échantillon grâce à l'équation (2.53) (l'ensemble four-coupelle-échantillon est supposé isotherme et les mesures sont effectuées à pression constante atmosphérique) :

$$\phi_m - \phi_r = m \frac{dh}{dT} = m C_p \frac{dT}{dt} \quad (2.53)$$

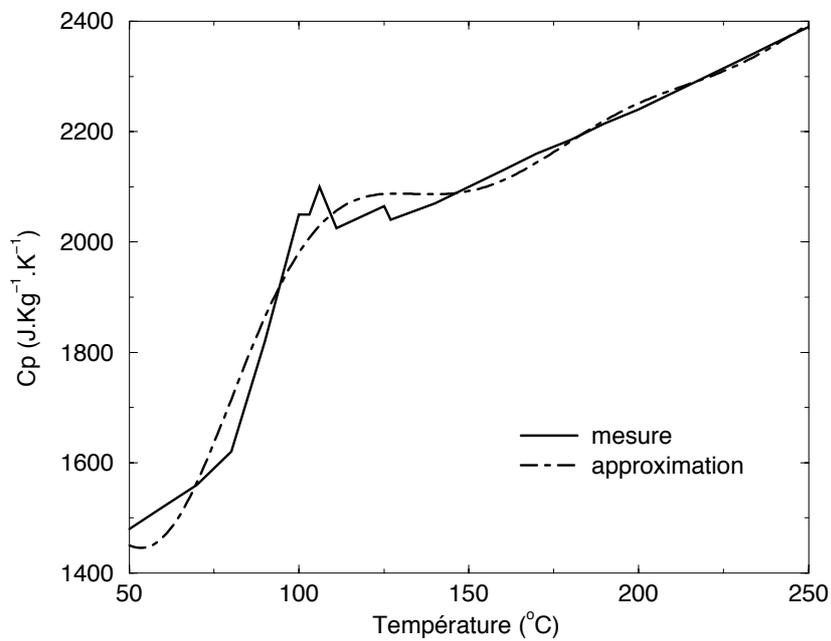


Figure 2.2 : Variation du  $C_p$  en fonction de la température

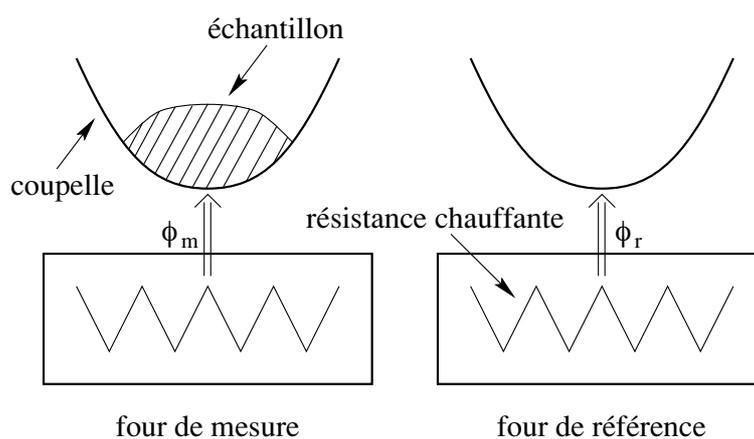


Figure 2.3 : Schéma de principe d'une DSC

Avant d'effectuer la mesure, il est nécessaire d'étalonner l'appareil. Pour ce faire, il est courant d'utiliser l'indium et l'étain, dont les températures de fusion (respectivement  $156,6^{\circ}\text{C}$  et  $231,9^{\circ}\text{C}$ ) sont situées dans la même gamme de température que celle des polymères. Il faut ensuite compenser les différences de capacités thermiques qui existent entre les fours, ceux-ci n'étant pas rigoureusement identiques. Pour cela, une mesure de la différence de puissance nécessaire à maintenir les consignes des deux fours à vide est effectuée. Cette « ligne de base » servira de référence pour le calcul de la chaleur spécifique de l'échantillon.

Les erreurs sur la mesure de la chaleur spécifique peuvent provenir principalement d'échantillons trop grands, d'étalonnages imprécis ou être issus de la présence de résistance de contact entre la coupelle et l'échantillon [Lalaouna 92].

Les mesures ont été effectuées à vitesse de refroidissement constante et égale à 5 degrés par minute.

La loi thermodynamique suivante (2.54) permet de quantifier la variation de capacité calorifique avec la pression connaissant le diagramme PvT.

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T = -T \left(\frac{\partial^2 v}{\partial T^2}\right)_p \quad (2.54)$$

Cependant, nous avons choisi de négliger cette variation [Lebot 98].

### 2.4.2 Conductivité thermique

La conductivité thermique reste une grandeur dont la mesure est délicate. La technique la plus couramment employée pour la mesure est celle dite de la plaque chaude gardée (figure 2.4). L'échantillon est placé entre deux plaques de températures différentes. Une résistance chauffante intercalée entre l'échantillon et un isolant est asservie de façon à égaliser les températures  $T_1$  et  $T_2$ . En faisant l'hypothèse d'un transfert thermique monodimensionnel, la loi de Fourier (2.55) permet d'accéder à la conductivité thermique de l'échantillon (figure 2.5) :

$$k = \frac{P \delta}{S(T_3 - T_4)} \quad (2.55)$$

où  $P$  est la puissance électrique dissipée dans la résistance,  $\delta$  et  $S$  sont respectivement l'épaisseur et la surface de l'échantillon.

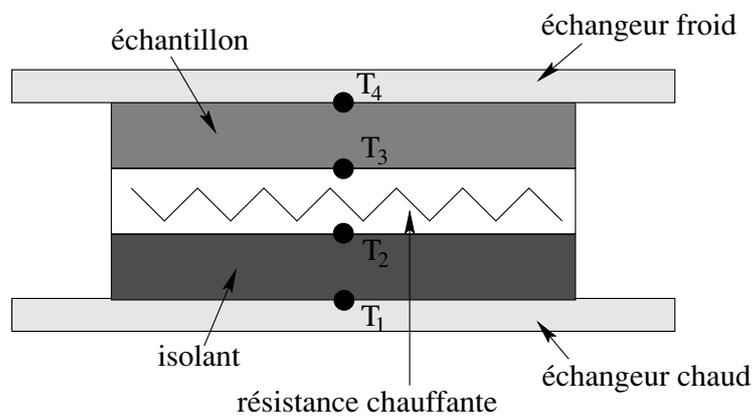


Figure 2.4 : Schéma de principe d'une plaque chaude gardée

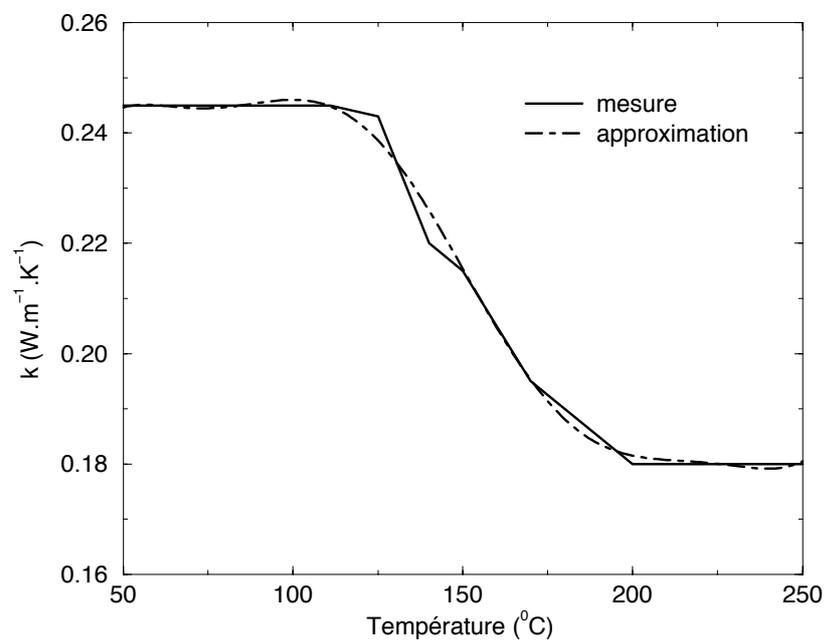


Figure 2.5 : Variation de la conductivité thermique en fonction de la température

### 2.4.3 Volume spécifique

Inverse de la masse volumique, le volume spécifique relie les variations conjuguées de température et de pression au volume du matériau au travers du diagramme PvT (figure 2.6). Ce sont les variations comparées de masse et de volume qui traduisent la conservation de la masse de l'échantillon.

Cette loi d'évolution appelée *équation d'état* s'écrit (2.56) :

$$\boxed{f(P, v, T) = 0} \quad (2.56)$$

Il est possible de calculer cette équation d'état à partir de la théorie de la mécanique quantique en quantifiant les forces qui agissent entre les molécules du polymère. Cependant, cette approche purement théorique montre ses limites dans le cas de l'étude d'un procédé où l'on peut ajouter au polymère d'autres éléments comme des adjuvants ou des renforts (par exemple sous forme de fibres).

L'alternative consiste alors à utiliser un modèle *semi-empirique*, basé sur des mesures de données PvT. La modélisation permet d'obtenir une loi balayant une plage de paramètres aussi large que possible à partir d'un nombre limité de mesures.

Un travail de recensement bibliographique de nombreuses méthodes aussi bien théoriques que semi-empiriques a été effectué par [Lebot 98].

Nous avons choisi la loi de Tait [Tait 88], couramment utilisée dans la littérature, qui donne une bonne approximation du diagramme PvT et dont les coefficients ont été tabulés pour de nombreux polymères. Cette loi s'écrit (2.57) :

$$\boxed{\frac{v(0, \underline{T}) - v(p, \underline{T})}{v(0, \underline{T})} = C \ln \left( 1 + \frac{p}{B(\underline{T})} \right)} \quad (2.57)$$

où  $\underline{T} = T - [T_G(p) - T_G(0)]$

La loi de variation  $T_G = f(p)$  est linéaire. Son évolution est tirée des données expérimentales.

En exploitant les mesures effectuées au laboratoire de therocinétique de l'EPUN sur

le polymère utilisé pour les expériences (l'ABS), on obtient :

$$T_G(p) = T_G(0) + \frac{0,55}{3}p \quad (2.58)$$

On note que l'utilisation de cette loi nécessite la connaissance de trois paramètres :

1. Le volume spécifique à pression nulle  $v(0, T)$ , qui est généralement approximé par  $v(p = 1bar, T)$  [Krevelen 90] ;
2. La constante adimensionnée  $C$  ;
3. La fonction thermodépendante  $B(T)$ , qui a la dimension d'une pression.

Simha et al. [Simha 73] ont montré que  $C$  est quasiment constant (meilleure approximation :  $C=0,0894$ ) et que  $B(T)$  peut être écrit (2.59) :

$$B(T) = b_1 e^{-b_2 T} \quad (2.59)$$

La constante  $b_2$  a une valeur moyenne de  $4,5 \cdot 10^{-3}$  tandis que  $b_1$  dépend de la nature du polymère, mais est proportionnel au module élastique de compression  $K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$ .

Nous utilisons  $b_1 = 3,3 \cdot 10^{-2} K$ , ce qui permet d'approcher de façon satisfaisante les mesures effectuées (figure 2.6). On note par ailleurs que la température de transition vitreuse est fonction de la pression.

#### 2.4.4 Coefficient de dilatation thermique

La variation du volume est à la fois fonction de la température, qui dilate ou contracte le matériau, et de la pression qui le comprime. Or il est nécessaire de connaître le volume spécifique  $v$  pour calculer la masse volumique  $\rho$  et le coefficient de dilatation thermique linéaire  $\alpha$ . Ceci est possible grâce aux relations (2.60) et (2.61).

$$\rho = \frac{1}{v} \quad (2.60)$$

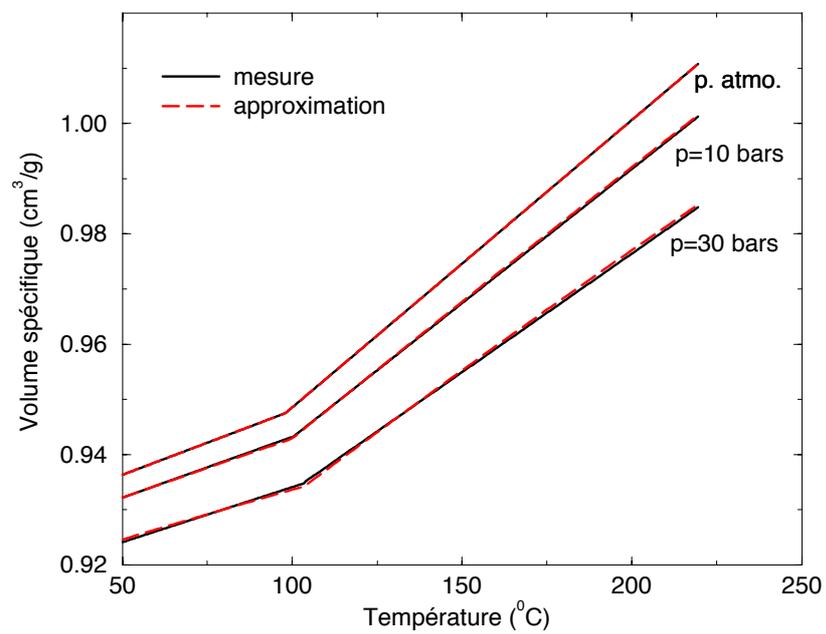


Figure 2.6 : Variation du volume spécifique en fonction de la température et de la pression (Loi de Tait)

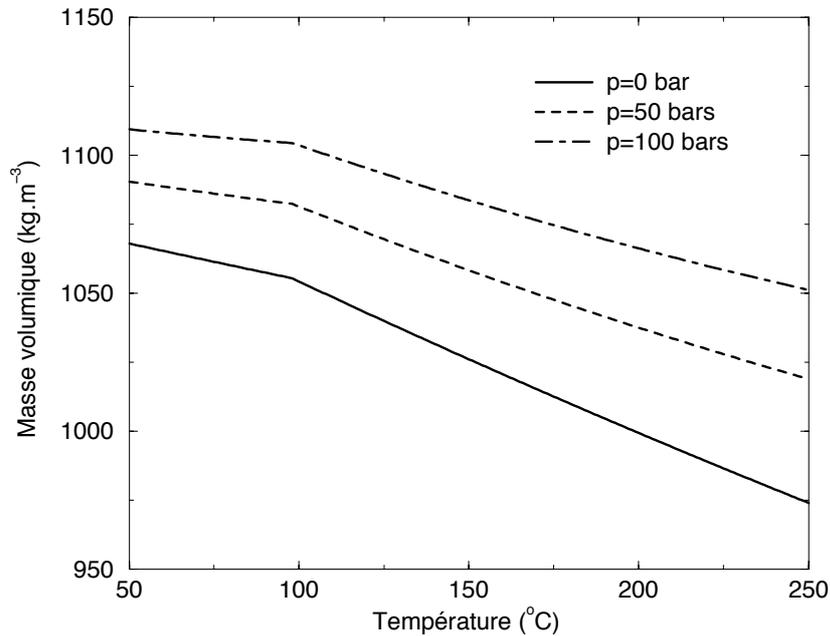


Figure 2.7 : Variation de  $\rho$  en fonction de la température

$$\alpha = \frac{1}{v} \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \quad (2.61)$$

La connaissance de la valeur de ce coefficient de dilatation thermique *linéaire*  $\alpha$  nous permet de calculer le coefficient de dilatation thermique *volumique*  $\beta$  par la relation (2.62). C'est ce coefficient  $\beta$  qui apparaît dans l'équation aux déplacements (2.102), que nous aurons à résoudre.

$$\beta = \frac{\alpha E}{1 - 2\nu} \quad (2.62)$$

où  $\nu$  est le coefficient de Poisson :  $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$

et  $E$  est le module d'Young :  $E = \mu \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu}$

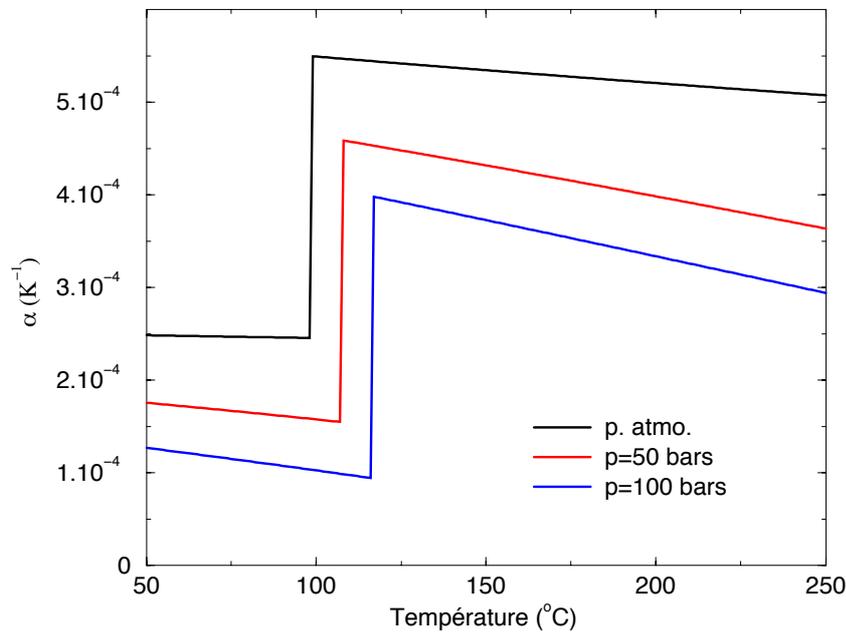


Figure 2.8 : Variation de  $\alpha$  en fonction de la température

## 2.5 Échanges thermiques et solidification

Lors du refroidissement du polymère dans le moule, il convient de traiter le changement de phase liquide/solide qui se produit lors de la solidification de la pièce. Cette solidification ne se produit que pour les polymères semi-cristallins. Les hypothèses physiques que nous prenons en compte sont les suivantes :

1. la masse volumique reste constante lors du changement de phase ;
2. l'influence des variations de la pression sur les caractéristiques du changement d'état sont négligeables ;
3. la vitesse de déplacement du front de solidification est suffisamment faible pour ne pas perturber l'écoulement dans la phase liquide ;
4. le front de fusion/solidification n'a pas d'épaisseur (fusion franche à température unique).

Dans le cas où il y a solidification, il existe une interface entre les deux phases du matériau en transformation. L'équation de l'énergie à l'interface fait intervenir le « saut » des variables au travers de la discontinuité [Bertrand 99] :

$$[[\rho e (\mathbf{V} - \mathbf{V}_f)]] \cdot \mathbf{n} - [[\bar{\sigma} \cdot \mathbf{V}]] \cdot \mathbf{n} + [[\mathbf{q}]] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.63)$$

où  $\mathbf{V}_f$  est la vitesse du front de changement de phase et  $[[\cdot]]$  désigne la discontinuité de la grandeur concernée lorsque l'on traverse l'interface dans le sens de la normale  $\mathbf{n}$ .

L'enthalpie spécifique est définie par la relation :

$$h = e + pv \text{ avec } e = Q + W \quad (2.64)$$

On peut alors réécrire (2.10) :

$$\rho \frac{dh}{dt} = \frac{dp}{dt} + \bar{\sigma} : \bar{D} - \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (2.65)$$

Il y a continuité des vitesses et des contraintes à l'interface, la condition de saut se réduit alors à :

$$[[\rho h (\mathbf{V} - \mathbf{V}_f) + \mathbf{q}]] \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.66)$$

Or le saut d'enthalpie à l'interface est égal à la chaleur latente de fusion/solidification  $L_f$ . Si on note de plus  $\mathbf{V}_f^* = \mathbf{V}_f - \mathbf{V}$  la vitesse relative du front, l'équation de saut à l'interface correspond bien à l'équation de continuité du flux thermique ou première condition de Stefan :

$$-\mathbf{q}_S \cdot \mathbf{n} + \mathbf{q}_L \cdot \mathbf{n} = \rho L_f \mathbf{V}_f^* \cdot \mathbf{n} \quad (2.67)$$

L'expression en température valable sur l'ensemble du domaine (interface comprise) est obtenue en exprimant la variation de l'enthalpie comme la somme de deux transformations réversibles (une isobare et l'autre isotherme) dans chaque phase et d'une transition de phase réversible à pression constante [Bertrand 99].

La transition de phase est prise en compte par l'intermédiaire de la chaleur latente qui induit un saut d'enthalpie au front ; il est possible de rendre compte de cette discontinuité mathématiquement en introduisant la fonction de Heaviside  $H$  telle que  $H(T - T_f) = 1$  si  $T \geq T_f$  et  $H(T - T_f) = 0$  si  $T < T_f$ .

On peut par ailleurs écrire :

$$dh = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial h}{\partial p} \right)_T dp \quad (2.68)$$

Or

$$C_p = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (2.69)$$

De plus, on a  $\delta Q = T ds$  et  $\delta W = -p dv$ , donc :

$$dh = T ds + v dp \quad (2.70)$$

ce qui permet d'écrire :

$$\left( \frac{\partial h}{\partial p} \right)_T = T \left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T + v = v(1 - \alpha T) \text{ d'après (2.38)} \quad (2.71)$$

On obtient donc, en ajoutant les trois contributions d'enthalpie :

$$\frac{dh}{dt} = C_p \frac{dT}{dt} + v(1 - \alpha T) \frac{dp}{dt} + L_f \frac{\partial H(T - T_f)}{\partial t} \quad (2.72)$$

Or, la fonction de Heaviside se confond localement avec la fraction massique  $f_L$ .

Nous obtenons alors l'équation de l'énergie écrite en température en introduisant l'équation (2.72) dans (2.65) et en appliquant la loi de Fourier  $\mathbf{q} = -k\nabla T$ . Nous négligeons systématiquement le terme de production d'origine mécanique (cf. section 2.3.1).

$$\boxed{\rho C_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k\nabla T) - \rho L_f \frac{\partial f_L}{\partial t} + \bar{\bar{\sigma}} : \bar{\bar{D}}} \quad (2.73)$$

Le terme de dissipation visqueuse sera négligé dans la phase solide, car les mouvements y sont très lents.

## 2.6 Écoulement du polymère fondu

### 2.6.1 Rhéologie des fluides

Il est possible de faire une distinction importante entre fluide et solide. Dans un solide élastique, les déformations sont proportionnelles aux contraintes. Pour un fluide visqueux classique, ce sont les vitesses de déformation qui sont proportionnelles aux contraintes. Il est donc possible de déterminer la différence entre un solide classique et un fluide classique de la façon suivante : soumis à des sollicitations constantes, un solide élastique subit une *déformation* constante tandis qu'un fluide classique subit une *vitesse de déformation* constante.

#### Contraintes et déformations dans les fluides

La loi de comportement pour un fluide quelconque peut s'écrire :

$$\overline{\overline{\sigma}} = -p\overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\sigma}'} \quad (2.74)$$

Il est en effet commode de séparer la partie sphérique du tenseur des contraintes représentative du rôle compressif joué par la pression hydrostatique. Le tenseur des extra-contraintes  $\overline{\overline{\sigma}'}$  est quand à lui lié aux déformations des particules fluides.

De la même manière que l'on a introduit le tenseur des déformations  $\overline{\overline{\epsilon}}$ , on définit le tenseur des vitesses de déformation  $\overline{\overline{D}}$  par :

$$\overline{\overline{D}} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{V} + \nabla \mathbf{V}^T) \quad (2.75)$$

### Fluides Newtoniens

La loi de Newton exprime une relation de dépendance linéaire instantanée entre contraintes et vitesses de déformation. Le comportement Newtonien se traduit par :

$$\overline{\overline{\sigma}}' = 2\eta\overline{\overline{D}} + \gamma\nabla \cdot \mathbf{V}\overline{\overline{I}} \quad (2.76)$$

Les constantes  $\eta$  et  $\gamma$  dépendent intrinsèquement de la nature du matériau, de même que les coefficients de Lamé  $\lambda$  et  $\mu$  pour un solide élastique.  $\eta$  est le coefficient de viscosité dynamique. On note  $\zeta$  la viscosité volumique définie par :

$$3\zeta = 3\gamma + 2\eta \quad (2.77)$$

La valeur de ce coefficient  $\zeta$  est très faible, et en pratique il est souvent négligé (c'est l'hypothèse de Stokes). On tire alors la valeur de  $\eta$  de  $\gamma$ , ce qui permet de caractériser un écoulement de fluide Newtonien en ne connaissant qu'une seule caractéristique physique : la viscosité  $\eta$ .

**Remarque :** bien que les fluides courants soient par nature compressibles, ils sont souvent étudiés dans des écoulements incompressibles, c'est à dire des écoulements où la compressibilité des fluides ne se manifeste pas. Dans ce cas particulier, on a  $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$  et on retrouve l'écriture classique :

$$\overline{\overline{\sigma}}' = 2\eta\overline{\overline{D}} \quad (2.78)$$

### Fluides non Newtoniens

Il existe deux grandes catégories de comportements non-newtoniens : ceux qui ne dépendent pas du temps (appelés newtoniens généralisés) et ceux qui en dépendent.

Les écoulements que nous considèrerons seront supposés incompressibles ( $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$ ). Le tenseur des extra-contraintes  $\overline{\overline{\sigma}}'$  se simplifie donc par la disparition du terme de variation de volume.

Plusieurs types de fluides non newtoniens possèdent un comportement indépendant du temps (figure 2.9). La caractéristique commune de ces fluides est d'être modélisables

par une loi de la forme :

$$\overline{\sigma'} = 2\eta(\dot{\gamma}, \sigma) \overline{D} \quad (2.79)$$

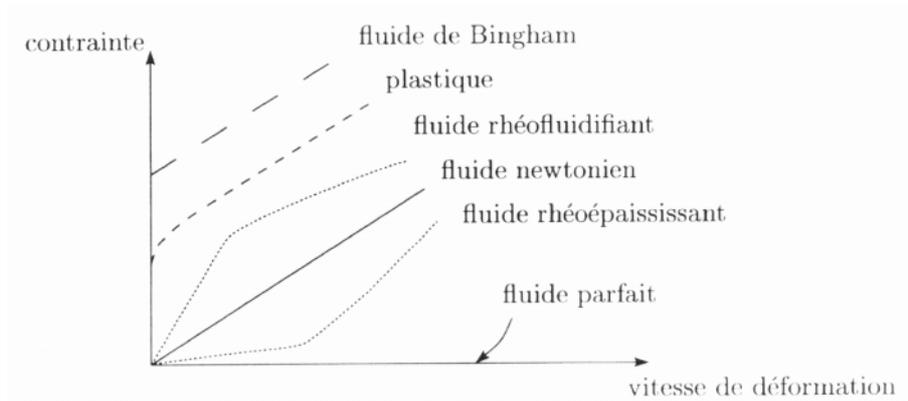


Figure 2.9 : *Comportements rhéologiques indépendants du temps*

Le phénomène de rhéofluidifiante est expliqué par les théories de Grassley et Bueche [Agassant 97] fondées sur le concept d'enchevêtrement des macromolécules : plus le cisaillement est important, plus la densité d'enchevêtrement (et donc la viscosité) est faible. Cela traduit le fait que les longues molécules (comme celles des polymères) s'orientent dans le sens de l'écoulement lorsqu'elles sont soumises à des sollicitations de cisaillement.

Les exemples courants de fluides rhéofluidifiants sont les polymères liquides, la pâte à papier, le lait, la gélatine...

Il existe dans la littérature de nombreuses lois pour modéliser le comportement de ces fluides. La plus connue est certainement la loi puissance (ou loi d'Ostwald) :

$$\overline{\sigma'} = 2\eta(\dot{\gamma}) \overline{D} \text{ tel que } \eta(\dot{\gamma}) = m\dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.80)$$

où  $m$  est la consistance du liquide et  $n$  ( $n \in [0, 1]$ ) est l'indice de pseudoplasticité. Ce sont des constantes caractéristiques intrinsèques au fluide. Le paramètre  $\dot{\gamma}$  représente le taux de cisaillement généralisé du tenseur des taux de déformations  $\overline{D}$  :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2 \sum_i \sum_j d_{ij}^2} \text{ où les } d_{ij} \text{ sont les composantes du tenseur } \overline{D} \quad (2.81)$$

La simplicité d'écriture de cette loi rhéologique rend possible des calculs analytiques dans des configurations simples, voir par exemple le calcul de l'écoulement de Poiseuille dans l'annexe B.

La loi de Carreau est un autre modèle souvent employé. La viscosité s'écrit alors :

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0 [1 + (\xi\dot{\gamma})^2]^{\frac{n-1}{2}} \quad (2.82)$$

où  $\eta_0$  et  $\xi$  correspondent respectivement à la viscosité en l'absence de cisaillement et à un temps caractéristique.

Les fluides rhéoépaississants, quant à eux, présentent une viscosité qui augmente avec le taux de cisaillement. Citons par exemple le sable mouillé, l'amidon ou encore les solutions aqueuses concentrées en sucre.

Il est possible d'utiliser le modèle rhéologique d'Ostwald avec un indice de pseudoplasticité  $n$  supérieur à l'unité pour modéliser le comportement de ces fluides.

Les *fluides à seuil* ont la particularité de ne pas se déformer si on leur applique une contrainte inférieure à un certain seuil. En deçà de cette contrainte, le fluide ne s'écoule pas, ou s'écoule « en bloc » entraîné par le reste du fluide. Pour une valeur de contrainte supérieure au seuil, le fluide peut manifester un comportement newtonien, voire pseudo-plastique.

Ce comportement, qui se manifeste par exemple pour le dentifrice ou le ciment frais, s'explique par la destruction partielle de la structure interne du fluide lorsque les contraintes deviennent suffisamment élevées.

Le modèle de Bingham est couramment utilisé pour modéliser le comportement de fluides à seuil :

$$\overline{\sigma'} = 2\eta(\underline{\sigma}) \overline{D} \quad \text{tel que} \quad \begin{cases} \eta = +\infty & \text{si } \underline{\sigma} \leq \underline{\sigma}_0 \\ \eta = \eta_0 & \text{si } \underline{\sigma} \geq \underline{\sigma}_0 \end{cases} \quad (2.83)$$

où  $\underline{\sigma}$  est l'équivalent de  $\dot{\gamma}$  pour le tenseur  $\overline{\sigma}$  et  $\underline{\sigma}_0$  est la contrainte seuil. Lorsque la contrainte seuil est atteinte, le fluide est assimilable à un fluide newtonien.

Pour une modélisation plus fine, il existe le modèle de Herschel-Bulkley qui combine

une loi de type puissance avec un seuil d'écoulement.

Il existe également des lois rhéologiques qui dépendent du temps. Les corps qui ont une viscosité apparente qui diminue ou augmente au cours du temps, sous l'influence d'une vitesse de cisaillement constante sont appelés respectivement *rhéopectiques* et *thixotropes*. Ces fluides présentent un effet de mémoire de leur champ de déformation ou de contrainte antérieur. La thixotropie s'accompagne généralement d'un changement important de la structure microscopique des matériaux. On remarque que la disparition progressive des liaisons moléculaires est quelquefois à l'origine de la diminution de la viscosité apparente. Les peintures ou la mayonnaise sont des exemples typiques de fluides thixotropes.

Les fluides *viscoélastiques*, quand à eux, se singularisent par leur capacité à présenter un comportement variable selon la vitesse de variation des contraintes. Lorsque cette vitesse est faible, la structure interne du matériau a le temps de se réorganiser pour laisser la place à un comportement de type liquide. Dans le cas de fréquences de sollicitations élevées, le comportement du corps s'apparente à celui d'un solide. Il existe de nombreux fluides viscoélastiques, citons par exemple la pâte à pain, les gelées ou la maïzéna.

## 2.6.2 Milieu diphasique

La description géométrique du milieu diphasique peut être associée à deux fonctions de phase  $\phi_1$  et  $\phi_2$  qui adoptent des valeurs différentes selon leur position au sein du fluide 1 ou du fluide 2. On peut supposer par exemple que  $\phi_1$  vaut 1 dans le fluide 1 et 0 dans le fluide 2, et inversement pour  $\phi_2$ . Par définition, ces fonctions indicatrices sont discontinues et leur somme est constante au cours du temps et dans l'espace et égale à 1. Cela permet d'écrire :

$$\phi_2(x, y, z, t) = 1 - \phi_1(x, y, z, t) \quad (2.84)$$

Les fonctions  $\phi_k$ ,  $k = 1, 2$  sont discontinues sur l'interface, ce qui entraîne le fait que leur dérivée soit nulle dans chacun des fluides. On peut alors décrire leur évolution grâce à une relation cinématique qui relie les variations des  $\phi_k$  à la vitesse de l'interface  $V$  :

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + V \cdot \nabla \phi_k = 0 \quad (2.85)$$

Cette expression est analogue à une relation cinématique d'évolution d'une discontinuité à la vitesse locale  $V$ .

Notons par ailleurs qu'il est d'usage de faire référence à la fraction volumique par la notation  $C$  pour fonction « couleur ».

### 2.6.3 Tension superficielle

Les phénomènes de tension superficielle agissent sur les interfaces de façon à minimiser leurs aires. L'influence de ce phénomène sur les écoulements courants est souvent masqué par les effets de la gravité. Citons tout de même la forme sphérique des bulles de savon (forme qui minimise l'énergie en assurant une surface minimale) ou bien les ménisques dans les verres ou les thermomètres par exemple.

L'intensité de ces phénomènes est quantifiée par le coefficient de tension superficielle  $\iota$  exprimé en  $N.m^{-1}$  [Guyon 91].

La tension superficielle est l'équivalent d'une pression qui agit dans la direction normale à l'interface entre deux fluides, son intensité étant proportionnelle à la concavité de l'interface. Il est donc possible de formuler la force de tension de surface  $\mathbf{F}_\iota$  sous la forme :

$$\mathbf{F}_\iota = \iota \kappa \mathbf{n} \quad (2.86)$$

La complexité de résolution de cette équation provient de la lourdeur inhérente à l'évaluation de la courbure  $\kappa$ , qui est un paramètre géométrique. Brackbill, Kothe et Zemach [Brackbill 92] ont réussi à contourner cette difficulté en sommant les forces de tension tangentielles à l'interface sur le contour  $ds$  d'un élément de volume élémentaire. En effet, si localement  $\mathbf{t}(M)$  est une force de surface tangentielle à l'interface, alors la force de tension superficielle est égale à l'intégrale curviligne sur le contour  $ds$  des  $\iota \mathbf{t}(M)$ ,  $\forall M \in ds$ . Après quelques transformations d'opérateurs différentiels, on montre que la courbure  $\kappa$  est en fait l'opposée de la divergence normale à l'interface, soit  $\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n}$ . Cette formulation permet de s'affranchir de toute caractéristique géométrique concernant l'interface [Vincent 99].

De plus, si on remarque que la normale à l'interface est en fait le gradient du taux de

présence local,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \quad (2.87)$$

on peut alors écrire la force de tension superficielle :

$$\mathbf{F}_\iota = \iota \kappa \mathbf{n} = -\frac{\iota (\nabla C)}{\|\nabla C\|} \nabla \cdot \left( \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \quad (2.88)$$

### 2.6.4 Mouillabilité

La prise en compte de l'angle de contact entre une interface fluide et un solide est un problème majeur dans les écoulements à surface libre. Les modèles classiques sont de deux sortes [Vincent 99] :

- les méthodes nécessitant une parfaite connaissance de la géométrie de l'interface. Cette approche est bien adaptée à une description eulérienne dans laquelle des maillages déformables sont utilisés. Il est alors possible de formuler un modèle géométrique qui caractérise le mouillage d'un fluide à partir de la connaissance des coordonnées des points de l'interface et de l'angle de contact, qui peut être mesuré expérimentalement [Fukai 95].
- la méthode « phase field » ou du second gradient, utilise la thermodynamique au voisinage de l'interface pour modéliser les forces de tension de surface en fonction du carré du gradient de la masse volumique [Lebaigue 99, Jacqmin 97].

Ces méthodes nécessitent une parfaite connaissance de la géométrie de l'interface, ce qui est difficilement compatible avec la méthode de discrétisation sur maillage fixe que nous choisissons.

### 2.6.5 Mise en équation

Pour obtenir l'équation régissant les mouvements du fluide, nous utilisons l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.9). Après application du théorème de la divergence, on obtient l'écriture locale suivante :

Dans le cas où les efforts extérieurs se limitent à la gravité, on écrit :

$$\frac{d\rho\mathbf{V}}{dt} = \rho\mathbf{g} + \nabla \cdot \overline{\overline{\sigma}} \quad (2.89)$$

Or, la loi de comportement pour un fluide quelconque peut s'écrire (cf. section 2.6.1) :

$$\overline{\overline{\sigma}} = -p\overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\sigma'}} \quad (2.90)$$

Ce qui donne pour équation du mouvement :

$$\frac{d\rho\mathbf{V}}{dt} = \rho\mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \overline{\overline{\sigma'}} \quad (2.91)$$

La formulation de l'hypothèse d'écoulement incompressible entraîne la contrainte supplémentaire  $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$  tirée de l'équation de conservation de la masse (2.8). Il est alors possible d'utiliser les lois de comportement obtenues dans la section 2.6.1.

Les équations du mouvement dans la phase fluide monophasique (équations de Navier–Stokes) s'écrivent donc :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \\ \rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \rho\mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \overline{\overline{\sigma'}} \end{array} \right. \quad (2.92)$$

Dans le cas d'un écoulement diphasique, il y a un « saut » des caractéristiques physiques à l'interface. Il convient donc de rajouter des relations de conservation qui traduisent la présence d'une surface de contact entre les deux phases en présence. Dans le cas général d'un écoulement diphasique avec changement de phase, des transferts de masse d'un fluide vers l'autre peuvent intervenir au travers de l'interface.

Considérons un volume élémentaire représentatif coupé par l'interface dans lequel  $\mathbf{V}_1$  et  $\mathbf{V}_2$  sont les vitesses locales de part et d'autre de l'interface. La conservation de la masse au travers de l'interface impose :

$$\rho_1(\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{n} - V) = \rho_2(\mathbf{V}_2 \cdot \mathbf{n} - V) \quad (2.93)$$

où  $V$  est la vitesse de l'interface et  $\mathbf{n}$  est la normale à l'interface.

Dans le cas où il n'y a pas de changement de phase, les flux de masse au travers de l'interface sont nuls, on a donc :

$$V = \mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V}_2 \cdot \mathbf{n} \Leftrightarrow \llbracket \mathbf{V} \rrbracket \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (2.94)$$

Dans la cas où il y a changement de phase, la masse volumique est supposée constante de part et d'autre de l'interface (cf. section 2.5), ce qui conduit au même résultat.

On suppose bien évidemment que le front de solidification au sein du polymère est distinct du front diphasique polymère fondu - air.

Par ailleurs, on observe expérimentalement la continuité des vitesses tangentielles à l'interface [Zaleski 99], ce qui entraîne la conservation de la quantité de mouvement au travers de l'interface :

$$\left( -p_1 \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\sigma}}_1^T \right) \cdot \mathbf{n} = \left( -p_2 \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\sigma}}_2^T + \iota \kappa \right) \cdot \mathbf{n} \quad (2.95)$$

où  $\kappa$  est la courbure moyenne de l'interface et  $\iota$  est le coefficient de tension superficielle.

La formulation complète des équations diphasiques avec tension superficielle comprend cinq équations et cinq inconnues (dans le cas bidimensionnel), c'est le modèle *1-fluide* :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla C = 0 \\ \rho \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}}^T - \frac{\iota (\nabla C)}{\|\nabla C\|} \nabla \cdot \left( \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \end{array} \right. \quad (2.96)$$

## 2.7 Déformations et contraintes dans le solide

L'utilisation du diagramme PvT du polymère permet de calculer l'évolution de la pression et du volume de la pièce au cours du refroidissement de façon globale. Cela permet de prévoir un décollement éventuel et d'apprécier l'épaisseur moyenne des lames d'air [Lebot 98].

Cependant, cette approche globale montre ses limites dans le cas où l'on veut connaître

la forme de la pièce dans le moule. En effet, cette méthode permet d'évaluer des déplacements monodimensionnels, donc constants sur toute la longueur de la pièce alors que dans la pratique le polymère peut prendre des formes complexes avec des zones de décollement locales d'amplitudes variées.

La résolution des équations de la mécanique des solides, couplée à celle de l'énergie, nous permet de calculer la forme de la pièce ainsi que l'épaisseur des lames d'air qui apparaissent au cours du refroidissement.

Cette approche globale moule-air-polymère nous permet d'aborder le phénomène du refroidissement de la pièce dans le moule en tenant compte des effets intervenant localement lors de cette phase du processus.

### 2.7.1 Couplage thermomécanique

Dans l'optique d'une approche globale du problème, la prise en compte du couplage entre la thermique et la mécanique du problème est indispensable. Supposons par exemple un polymère chaud au contact du moule froid.

En se refroidissant, la pièce polymère va se contracter et éventuellement décoller des parois du moule, laissant apparaître une lame d'air. Cette lame d'air va isoler thermiquement les sources froide et chaude et donc ralentir le cinétique de refroidissement.

Il y a donc un *couplage thermomécanique* puisque le transfert de chaleur est lié à l'épaisseur de la lame d'air, qui dépend quant à elle de l'état thermique du système moule-polymère.

### 2.7.2 Contraintes résiduelles

Isolons une lame de polymère liquide au contact de la paroi (figure 2.10-a). Sous l'effet de l'abaissement de température, cette couche se solidifie et sa longueur diminue. Le reste du polymère encore chaud oppose une résistance dont l'importance est liée à son module d'Young (figure 2.10-b). On suppose par ailleurs que la paroi n'oppose aucune contrainte sur le polymère.

Le refroidissement se poursuit et la couche suivante, qui va avoir également tendance

à se contracter, est gênée par la première lame de polymère solide. Elle ne va donc pas pouvoir se contracter totalement et va alors conserver une contrainte résiduelle de traction (si  $\alpha_{chaud} < \alpha_{froid}$ , ce qui est le cas le plus fréquemment rencontré). Dans le même temps, la première couche est comprimée par sa voisine et acquiert une contrainte résiduelle de compression (figure 2.10-c).

Le même phénomène se produit avec la couche suivante qui se retrouve en traction tout en comprimant les deux couches déjà solidifiées. La première couche se retrouve encore plus comprimée que ce qu'elle était, tandis que la couche intermédiaire, qui était en traction, est comprimée de telle sorte que l'on ne puisse pas déterminer son état *a priori* (figure 2.10-d).

Le phénomène se poursuit jusqu'à solidification totale. On remarque que l'extérieur de la pièce est la zone qui conservera la contrainte résiduelle de contraction la plus forte ; la zone centrale héritant quand à elle la plus forte traction résiduelle.

**Remarque :** seules les contraintes résiduelles sont prises en compte dans cette explication. Durant la phase de refroidissement, des contraintes liées au gradient thermique dans la pièce sont également présentes, mais disparaissent lorsque la pièce devient uniformément froide. Elles ont été omises ici pour plus de clarté.

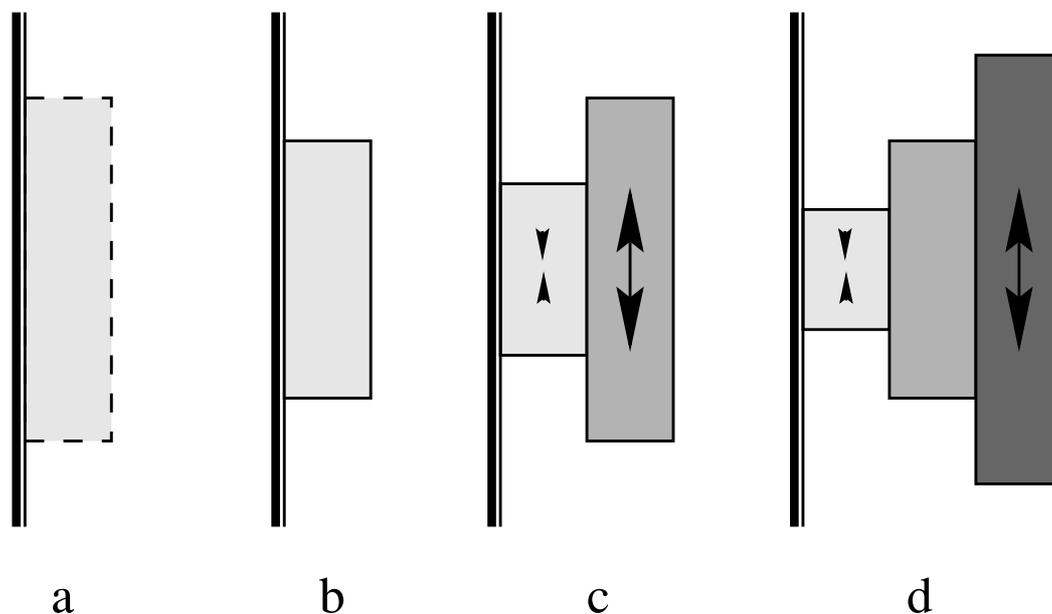


Figure 2.10 : Principe de formation des contraintes résiduelles

### 2.7.3 Éléments de mécanique du solide

La résolution du problème que nous nous sommes posés nécessite la connaissance et l'utilisation de quelques notions de mécanique du solide [Salençon 88].

#### Hypothèse des Petites Perturbations (H.P.P.)

Moyennant certaines hypothèses, on peut linéariser les équations du mouvement et aboutir ainsi aux équations de la mécanique des solides que nous allons utiliser.

Hypothèses nécessaires à la linéarisation :

- Petites déformations ;
- Petites variations de température ;
- Petits déplacements.

Ces trois hypothèses vont de pair et sont regroupées sous le nom d'*hypothèse des petites perturbations* (H.P.P.) autour de l'état d'équilibre initial.

#### Principe de superposition

Soit un ouvert  $\Omega$  de frontière  $\partial\Omega$  constitué d'une partie  $\Gamma_0$  (éventuellement vide) sur laquelle on impose des déplacements et d'une partie  $\Gamma_1$  sur laquelle on impose des forces surfaciques. Désignons par  $u_1, \sigma_1$  (respectivement  $u_2, \sigma_2$ ) une solution du problème avec :

- forces volumiques  $f_1$  (respectivement  $f_2$ ) dans  $\Omega$  ;
- densités surfaciques de forces  $F_1$  (respectivement  $F_2$ ) sur  $\Gamma_1$  ;
- déplacements imposés  $U_1$  (respectivement  $U_2$ ) sur  $\Gamma_0$ .

Soit  $\alpha$  et  $\beta$  deux nombres réels. Le problème défini par les données suivantes :

- forces volumiques  $f = \alpha f_1 + \beta f_2$  dans  $\Omega$  ;

- densités surfaciques de forces  $F = \alpha F_1 + \beta F_2$  sur  $\Gamma_1$ ;
- déplacements imposés  $U = \alpha U_1 + \beta U_2$  sur  $\Gamma_0$

$$\text{a pour solution } \begin{cases} u = \alpha u_1 + \beta u_2 \\ \sigma = \alpha \sigma_1 + \beta \sigma_2 \end{cases}$$

La solution du problème linéarisé ainsi obtenue par combinaison linéaire n'a évidemment une signification physique que dans le cas où les hypothèses de linéarisation rappelées plus haut demeurent satisfaites.

Dans l'exemple de la figure 2.11, on veut passer du profil de température (1) au profil (2), puis au profil (3). L'état de la température à l'étape  $i$  est à chaque instant égale à la somme des  $i$  premières étapes de superposition. La valeur du champ des déformations sera égale à la somme des déformations en chaque point et à chaque étape.

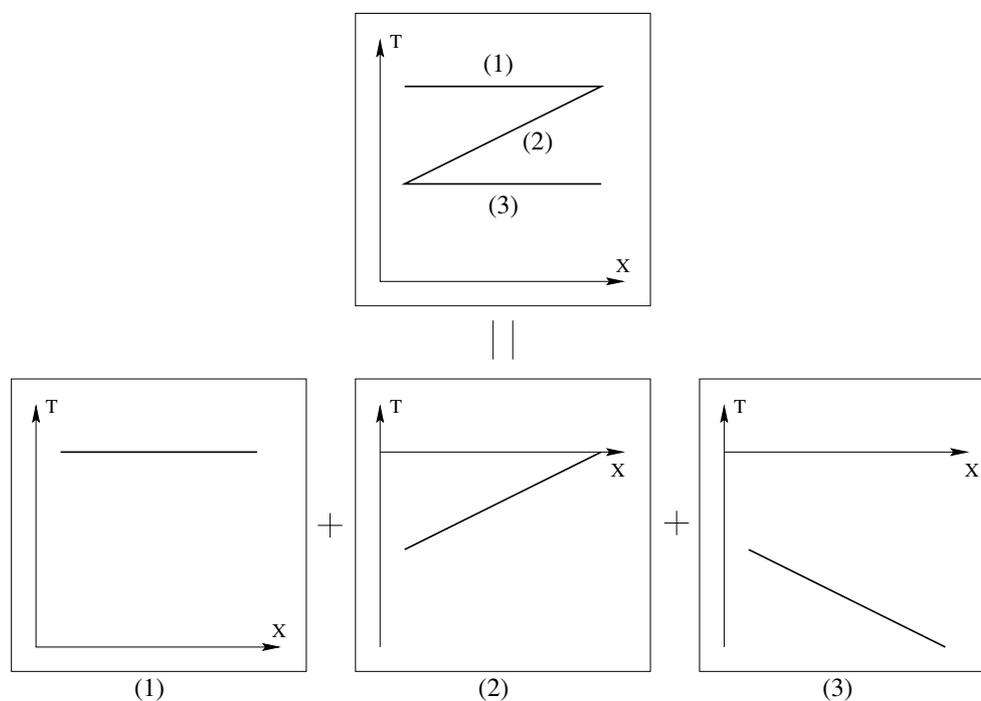


Figure 2.11 : *Illustration du principe de superposition*

## Élasticité plane

Du fait des effets de couplage dans les directions transverses aux sollicitations (effet Poisson), l'écriture de l'équation régissant les déformations du solide en deux dimensions pose le problème des conditions aux limites dans le plan perpendiculaire au calcul. Deux cas de figures peuvent alors se présenter :

1. On parle de *contraintes planes* lorsque les contraintes sont nulles dans la direction perpendiculaire au plan de calcul (figure 2.12). On est alors dans un cas purement bidimensionnel. Cette hypothèse est principalement utilisée dans le cas de plaques de faible épaisseur.
2. On parle de *déformations planes* lorsque les déplacements sont nuls dans la direction perpendiculaire au plan de calcul (figure 2.12). Des effets tridimensionnels interviennent alors, cette hypothèse est utilisée dans le cas où il peut y avoir des déplacements dans la troisième dimension.

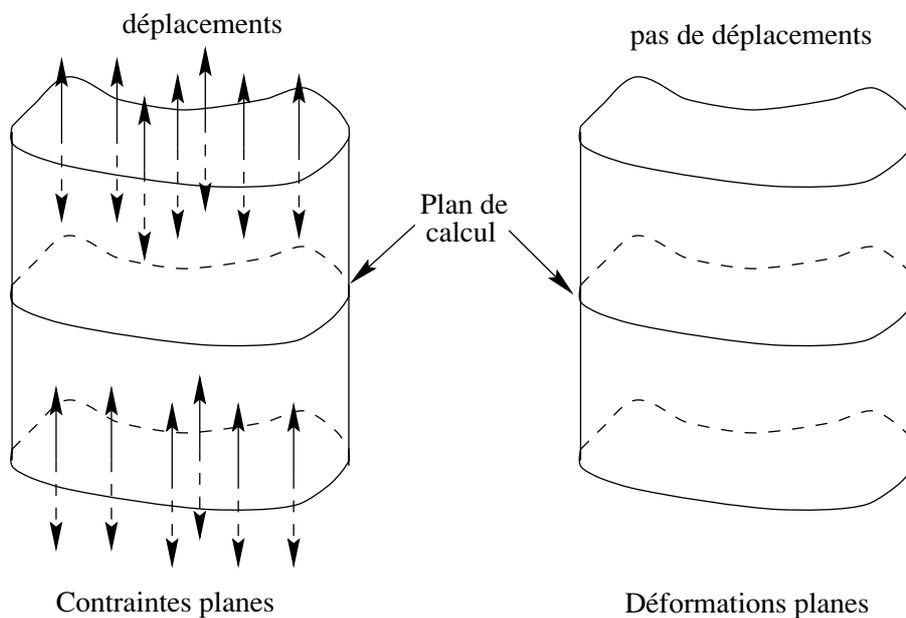


Figure 2.12 : *Contraintes et déformations planes*

On imagine aisément les différences de résultat, par exemple dans le cas d'une dilatation uniforme d'un solide bloqué sur ses faces. En effet, si on utilise les contraintes planes, les conditions aux limites qui viennent se rajouter permettent un déplacement, ce qui amènera une contrainte plus faible que dans le cas des déformations planes.

### 2.7.4 Mise en équation

Ces équations sont issues de l'écriture des deux principes fondamentaux de la thermodynamique, rappelés en début de chapitre. Moyennant les hypothèses formulées plus haut (petites déformations, petits déplacements, petites variations de température) on peut linéariser ces équations et aboutir ainsi aux équations de la mécanique des solides que nous allons utiliser.

La condition d'équilibre des contraintes sur un volume solide s'écrit :

$$\boxed{\nabla \cdot \bar{\sigma} = \mathbf{0}} \quad (2.97)$$

où  $\bar{\sigma}$  est le tenseur des contraintes. Les termes d'inertie ont été négligés conformément aux hypothèses décrites au paragraphe 2.3.

La loi de comportement thermoélastique s'écrit :

$$\boxed{\bar{\sigma} = \lambda(\text{tr } \bar{\varepsilon})\bar{I} + 2\mu\bar{\varepsilon} - \beta\tau\bar{I}} \quad (2.98)$$

où  $\lambda$  et  $\mu$  sont les coefficients de Lamé,  $\bar{\varepsilon}$  est le tenseur des déformations,  $\text{tr}$  est l'opérateur *trace*,  $\bar{I}$  est le tenseur unité,  $\beta$  est le coefficient de dilatation thermique volumique et  $\tau$  est une température. L'obtention de cette équation est décrite en détail au paragraphe 2.2.2.

De plus, l'hypothèse des petites perturbations permet d'écrire :

$$\boxed{\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{U} + \nabla\mathbf{U}^T)} \quad (2.99)$$

où  $\mathbf{U}$  est le champ de déplacement.

Les conditions aux limites peuvent s'écrire en contraintes (2.100) ou en déformations (2.101) :

$$\bar{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{T}_0 \quad \text{sur } S_T \quad (2.100)$$

où  $\mathbf{T}_0$  est le vecteur contrainte appliqué à la surface du solide et  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal à la surface dirigé vers l'extérieur du domaine (figure 2.13).

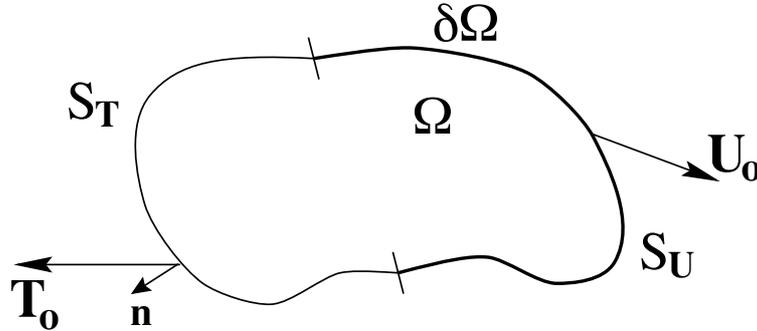


Figure 2.13 : Conditions aux limites

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_0 \quad \text{sur} \quad S_U \quad (2.101)$$

avec  $S_T \cup S_U = \delta\Omega$  et  $S_T \cap S_U = \emptyset$ .

On peut résoudre ces équations en choisissant le champ de déplacements  $\mathbf{U}$  ou le champ de contraintes  $\bar{\sigma}$  comme inconnue principale. D'après la P. ROUX [Roux 94], l'approche de discrétisation par volumes finis s'adapte naturellement à la formulation en déplacements, que nous avons donc choisie.

En combinant (2.97), (2.98) et (2.99), on obtient l'équation de Navier (2.102) qui nous permettra de résoudre le problème mécanique en déplacements (annexe C) :

$$\boxed{\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U}) + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] - \nabla (\beta \tau) = \mathbf{0}} \quad (2.102)$$

### 2.7.5 Correction des paramètres physiques

L'utilisation de l'hypothèse des petites perturbations (cf. section 2.7.3) nécessite une attention particulière en ce qui concerne l'évolution des caractéristiques mécaniques. En adoptant cette hypothèse, on suppose en effet que les sollicitations thermomécaniques s'appliquent sur un solide non déformé. Cela introduit des approximations dont il faut tenir compte.

Prenons par exemple le cas de la masse volumique  $\rho$ . Un matériau comprimé (figure 2.14) voit sa masse volumique augmenter du simple fait de la conservation de la masse :

$$m = \rho_0 V_0 = \rho V \text{ d'où } \rho = \rho_0 \frac{V_0}{V}$$

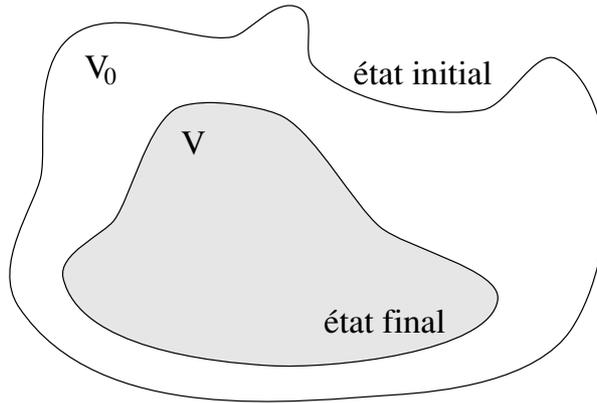


Figure 2.14 : Conservation de la masse

Or, l'hypothèse des petites perturbations suppose que le volume du solide reste constant ce qui implique une *non conservation* de la masse. Cette erreur est cependant limitée du fait que les déplacements soient petits.

Le cas du coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  peut être également étudié.

Supposons un solide carré de coefficient de dilatation thermique  $\alpha$  et de côté  $L_0$  qui subit deux refroidissements successifs, d'un écart de température  $\tau$  à chaque fois.

Le côté du carré va passer de sa longueur initiale  $L_0$  à  $\alpha L_0 \tau$  après le premier refroidissement pour finir à  $\alpha(\alpha L_0 \tau) \tau = \alpha^2 L_0 \tau^2$  (figure 2.15).

La surface du solide sera alors successivement  $L_0^2$ ,  $(\alpha L_0 \tau)^2$  et  $(\alpha^2 L_0 \tau^2)^2$ .

En faisant l'hypothèse des petites perturbations, le solide est supposé rester non déformé. Le côté du carré passera donc de  $L_0$  à  $\alpha L_0 \tau$  dans la première phase, puis à nouveau de  $L_0$  à  $\alpha L_0 \tau$  dans la deuxième phase. Ce qui donne une longueur et une surface finales respectivement de  $\alpha L_0 \tau$  et  $(\alpha L_0 \tau)^2$  (figure 2.16). On voit que l'erreur commise est petite si  $\alpha$  et  $\tau$  sont petits.

Il est cependant possible de corriger cette erreur en pondérant le coefficient  $\alpha$  par la

variation de longueur du solide :  $\alpha^* = \alpha \frac{L}{L_0}$ .

On a alors une longueur initiale  $L_0$  qui donne une longueur intermédiaire  $\alpha \frac{L_0}{L_0} L_0 \tau = \alpha L_0 \tau$  et une longueur finale  $\alpha \frac{L}{L_0} L_0 \tau = \alpha (\alpha L_0 \tau) L_0 \tau = \alpha^2 L_0 \tau^2$ .

Les surfaces correspondantes sont alors  $L_0^2$ ,  $(\alpha L_0 \tau)^2$  et  $(\alpha^2 L_0 \tau^2)^2$  qui sont désormais exactes.

Le calcul fait ici pour un carré est évidemment valable dans le cas général d'un quadrilatère quelconque. Le coefficient  $\alpha$  (resp.  $\beta$ ) devient  $\alpha \sqrt{\frac{S}{S_0}}$  (resp.  $\beta \sqrt{\frac{S}{S_0}}$ ).

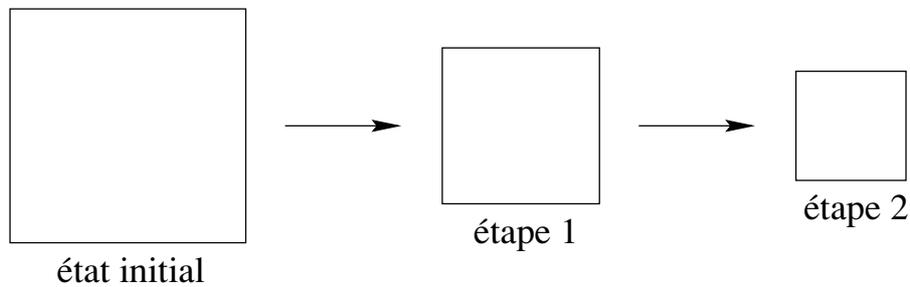


Figure 2.15 : *Solution exacte*

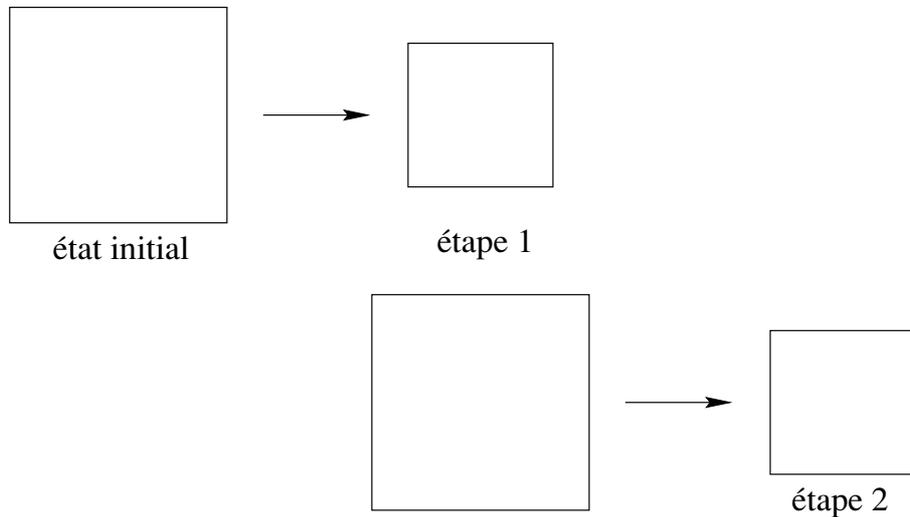


Figure 2.16 : *Approximation par l'H.P.P.*

**Remarque :** dans les cas où le calcul numérique emploie des mailles quadrangles, il est possible à partir des coordonnées des quatre angles de chaque maille de calculer la surface  $S$  de la maille grâce à l'équation (2.103) :

$$|S| = \frac{1}{2} \left( \|\overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{BC}\| + \|\overrightarrow{CD} \wedge \overrightarrow{DA}\| \right) \quad (2.103)$$

où  $A$ ,  $B$ ,  $C$  et  $D$  sont les points correspondants aux angles de la maille.

Nous utiliserons cette technique afin de corriger les caractéristiques  $\rho$  et  $\alpha$  indépendamment pour chaque maille au cours du calcul. Ceci nous permet de conserver la masse et de déterminer plus précisément les épaisseurs des lames d'air qui apparaissent lors du décollement de la pièce polymère des parois du moule.

## 2.8 Conclusion

Ce deuxième chapitre présente l'écriture mathématique des phénomènes physiques qui entrent en compte dans le procédé de moulage par injection. L'écriture du problème thermoélastique couplé dans le cas d'un solide élastique nous permet d'obtenir les équations de la thermique et de la mécanique des solides de façon générale ; Des hypothèses simplificatrices sont ensuite posées.

L'hypothèse d'un matériau élastique pour modéliser le comportement d'un polymère peut paraître surprenante. Ces matériaux ont en effet un comportement viscoélastique, voire visco-élasto-plastique. Cependant, l'étude bibliographique menée par M. Mercier [Mercier 00] montre que cette approximation est souvent effectuée (voir également la thèse de A. Millischer [Millischer 00]) bien que surestimant les contraintes résiduelles du fait de la non relaxation des contraintes.

Les caractéristiques thermophysiques véritables sont prises en compte de façon à obtenir un modèle réaliste. Le diagramme PVT est modélisé par une loi semi-empirique issue des mesures.

Les équations régissant l'écoulement du polymère fondu sont également prises en compte du point de vue de l'injection des polymères. Nous modélisons notamment la rhéologie complexe des polymères ainsi que les phénomènes liés à l'avancée d'un front de matière, comme la tension superficielle.

La solidification du polymère est prise en compte par le code. Cependant notre étude se limitera à un matériau amorphe, sans changement de phase et donc sans rejet de chaleur

latente à la solidification. Les bases sont cependant posées pour l'étude ultérieure des matériaux semi-cristallins.

Enfin, des considérations thermomécaniques spécifiques à notre problème sont mises en avant et nous présentons les moyens mis en œuvre pour les prendre compte.



# Chapitre 3

## Modélisation numérique

Notre but est d'obtenir un outil permettant de simuler à la fois l'injection du polymère fondu, les échanges thermiques et la mécanique dans la pièce solide. Nous discrétisons pour cela les équations régissant la mécanique des fluides diphasiques, la mécanique des solides et la thermique avec solidification. Afin de permettre une interconnexion entre les différents phénomènes modélisés, ces équations sont discrétisées en utilisant la même technique : les volumes finis.

### 3.1 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est basée sur la recherche des valeurs des inconnues du problème sur un nombre fini de points du domaine de calcul. Les équations, écrites sous forme conservative, sont discrétisées de façon à ce que le flux soit conservé lors du passage d'un volume de contrôle à l'autre. Cette manière de procéder fait des volumes finis une méthode naturelle pour résoudre les équations de la mécanique des fluides et de la thermique [Patankar 90].

Traditionnellement, les équations de la mécanique des solides sont quant à elles résolues par des méthodes d'éléments finis. Quelques auteurs commencent cependant à utiliser les volumes finis pour résoudre ces équations en particulier P. ROUX [Roux 94] et I. Demirdžić [Demirdžić 93, Demirdžić 94, Demirdžić 97]. Hattel [Hattel 95] utilise quant à lui une technique de différences finies.

De plus, en vertu de l'hypothèse des petites perturbations rappelée précédemment, les déplacements dans le matériau solide sont suffisamment petits pour que la géométrie de l'état initial soit confondue avec celle de l'état déformé. La position des nœuds du maillage reste donc inchangée au cours du calcul.

Les volumes finis sont utilisés au laboratoire depuis plusieurs années et l'expérience acquise dans ce domaine se traduit par l'utilisation des concepts de *maillage unique* et d'*équation unique* ainsi que sur une technique de conditions aux limites originale.

### 3.1.1 Maillage unique

La plupart des codes de calcul définissent le maillage de façon à le faire correspondre exactement à la géométrie étudiée (figure 3.1). La création de ce maillage nécessite l'utilisation de logiciels spécialisés et peut s'avérer longue et délicate dans le cas de géométries complexes. De plus, si certains paramètres géométriques concernant la forme des mailles ou la numérotation des nœuds sont mal maîtrisés, les systèmes linéaires obtenus seront mal conditionnés et donc difficiles à résoudre.

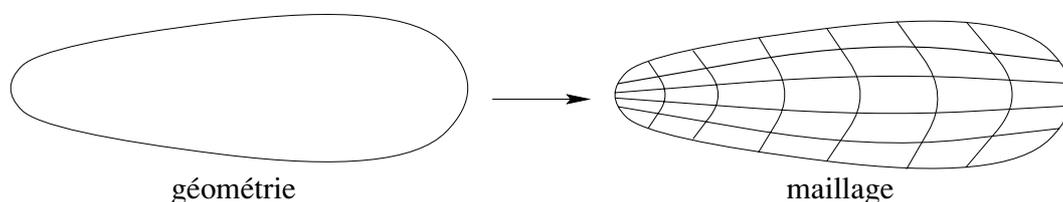


Figure 3.1 : *Maillage lié à la géométrie*

Le concept utilisé dans notre étude consiste à projeter la géométrie étudiée sur un maillage cartésien rectangulaire (figure 3.2). La géométrie et le maillage sont alors totalement déconnectés, ce qui évite d'avoir recours à un logiciel de maillage.

Cette méthode permet en outre de modifier facilement la géométrie au cours du calcul et apporte également une amélioration dans le conditionnement des systèmes linéaires [Angot 89].

Cependant, l'augmentation de la complexité de la géométrie nécessite un raffinement du maillage et donc une augmentation du nombre de nœuds. Nous utilisons alors un maillage irrégulier qui permet d'affiner localement le maillage.

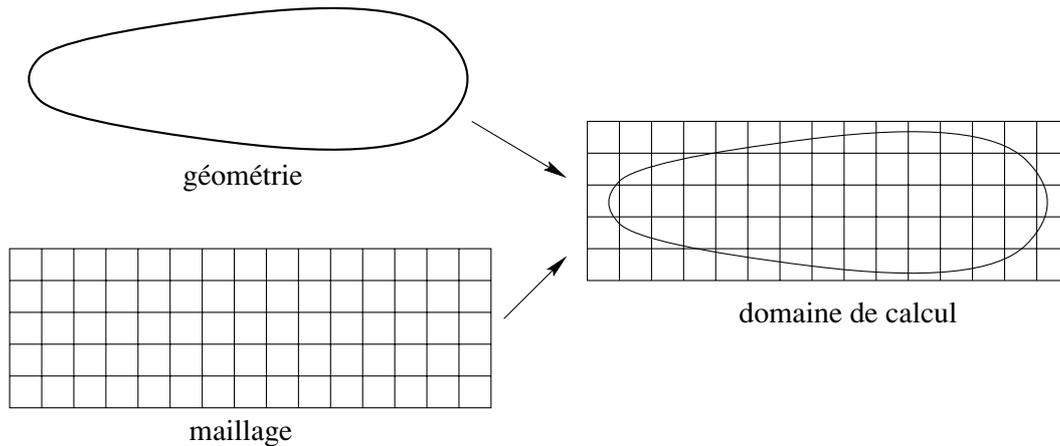


Figure 3.2 : *Maillage indépendant de la géométrie*

### 3.1.2 Équation unique

Le concept de maillage unique décrit plus haut provoque l'apparition de nœuds inutiles, car situés en dehors du domaine physique. La résolution usuelle d'un problème de ce type consiste à subdiviser le domaine de calcul en sous-domaines homogènes dans lesquels on résout les équations souhaitées, ce qui nécessite des lois de raccordement aux interfaces.

Nous utilisons le concept d'équation unique, c'est à dire que les équations sont résolues sur l'ensemble du domaine de calcul. Des termes de pénalisation sont ajoutés aux équations de façon à différencier les différentes zones du domaine.

Dans le cas de l'équation de la mécanique des solides (2.102) ou de l'énergie (2.73) le terme de pénalisation est purement numérique (cf. section 3.2.5) alors que pour l'équation de Navier-Stokes la technique utilisée s'inspire de la théorie de Brinkman. Le domaine de calcul est alors considéré comme un milieu poreux unique. La perméabilité définit la capacité d'un milieu poreux à laisser passer plus ou moins librement les fluides qui le traversent. Si cette perméabilité est très grande ( $K \rightarrow +\infty$ ), le milieu est équivalent à un fluide. En revanche, si elle est nulle, on a un milieu solide imperméable. Un milieu réellement poreux peut être obtenu en utilisant une valeur intermédiaire de  $K$ .

Il devient alors possible de modéliser des géométries complexes, voire des parois mobiles [Bidart 96] grâce à la souplesse d'utilisation du code.

## 3.2 Formulation des équations

### 3.2.1 Phase d'injection

L'écoulement étudié s'effectue dans un milieu hétérogène fluide-solide. En fait, nous allons considérer l'ensemble du domaine comme étant un milieu poreux de perméabilité  $K$  variable.

On utilise alors l'équation de Navier–Stokes–Brinkman généralisée (3.2). Si la perméabilité  $K$  est petite, le terme  $\frac{\mu}{K}\mathbf{V}$  devient prépondérant et on impose  $\mathbf{V} = 0$ , tandis que si  $K$  est grand ce terme est négligeable et on retrouve les équations de l'écoulement dans un fluide pur. Nous pouvons alors utiliser une équation unique valable quelle que soit la nature du point : solide, poreux, ou fluide.

Le problème considéré est celui de l'écoulement incompressible de deux fluides de caractéristiques différentes, en l'occurrence le polymère fondu et l'air. Les champs de vitesse  $\mathbf{V}$ , de pression  $p$  et de couleur  $C$  (qui sert à différencier les différentes phases de l'écoulement, cf. section 2.6.2) sont régis par les équations de conservation suivantes :

– Équation de continuité :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3.1)$$

– Équations de transport de la quantité de mouvement :

$$\left[ \frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}'}} - \frac{\iota(\nabla C)}{\|\nabla C\|} \nabla \cdot \left( \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) - \frac{\mu \mathbf{V}}{K} \quad (3.2)$$

– Équation de transport de couleur dans le cas où la méthode d'advection est utilisée (cf. section 3.3.2) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) C = 0 \quad (3.3)$$

– Équation de l'énergie :

$$\rho C_p \left[ \frac{dT}{dt} + \mathbf{V} \cdot \nabla T \right] = \nabla \cdot (k \nabla T) - \rho L_f \frac{\partial f_L}{\partial t} + \overline{\overline{\boldsymbol{\sigma}}} : \overline{\overline{\mathbf{D}}} \quad (3.4)$$

L'intégration des équations de l'énergie et de la conservation de la quantité de mouvement dans le cas où le volume de contrôle considéré est traversé par l'interface nécessite

une attention particulière. En effet, dans ce cas de figure, les propriétés du fluide ne sont plus constantes dans la maille. L'utilisation d'un maillage fixe nécessite donc de moyenner les caractéristiques dans les mailles d'interface, qui doivent être homogènes dans la méthode des volumes finis. Cela impose l'utilisation d'un maillage « suffisamment fin » pour limiter la portée de cette hypothèse.

Les valeurs de  $\rho$  et  $\mu$  varient alors suivant la phase où s'effectue le calcul selon une moyenne arithmétique :

$$\begin{cases} \rho = \rho_{air} (1 - C) + \rho_{poly} C \\ \mu = \mu_{air} (1 - C) + \mu_{poly} C \end{cases} \quad (3.5)$$

La masse volumique  $\rho$  étant une grandeur extensive, l'emploi de cette moyenne est justifié. En revanche la viscosité dynamique  $\mu$  est intensive, la moyenne n'a donc pas de signification physique. Cependant, cette approximation est couramment employée et n'a généralement qu'une influence minimale sur le résultat [Abadie 98].

### 3.2.2 Phases de compactage et de refroidissement

À la fin de l'injection, le polymère se solidifie dans le moule. Les phénomènes physiques rencontrés sont alors pilotés par le diagramme PVT, l'équation aux déplacements et l'équation de l'énergie. Les équations à résoudre sont présentées ci-dessous :

– Équation d'État :

$$f(p, v, T) = 0 \quad (3.6)$$

– Équations aux déplacements :

$$\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U}) + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] - \nabla (\beta \tau) = \mathbf{0} \quad (3.7)$$

– Équation de l'énergie :

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) - \rho L_f \frac{\partial f_L}{\partial t} \quad (3.8)$$

Le terme de dissipation visqueuse de l'équation de l'énergie a été négligé dans la phase solide, car les mouvements y sont très lents.

### 3.2.3 Discrétisation temporelle des équations

Les équations précédemment définies sont tout d'abord discrétisées en temps (pour celles qui comprennent un terme dépendant du temps bien sûr). L'intervalle de temps sur lequel nous observons les phénomènes est donc discrétisé en un nombre fini d'intervalles  $[t_n, t_{n+1}]$  de durées éventuellement différentes. L'approximation de la variable  $\phi$  à l'instant  $n$  sera notée  $\phi^n$ .

L'approximation du terme  $\frac{\partial \phi}{\partial t}$  à l'instant  $t_{n+1}$  est obtenue à partir d'un développement en série de Taylor tronqué à un ordre  $N$ . Cet ordre est d'autant plus grand que le ou les pas de temps sont petits, ce qui est souvent le cas pour les problèmes instationnaires.

Il est nécessaire d'effectuer plusieurs itérations pour atteindre la solution stationnaire du problème. À chacune de ces itérations, la solution réelle est avancée temporellement d'une quantité appelée *pas de temps* (supposé ici constant) et notée  $\Delta t$ . Le calcul des champs à l'itération  $t_{n+1}$  à partir de leurs valeurs aux temps précédents peut se faire de plusieurs façons.

- En utilisant les résultats de l'itération  $n$ . C'est le schéma d'Euler, basé sur un développement décentré de Taylor à l'ordre 1 :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t}$$

- On peut aussi utiliser les résultats des itérations  $n$  et  $n-1$ . On parle alors du schéma de Gear, basé sur un développement décentré de Taylor à l'ordre 2 :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t}$$

**Remarque :** ce schéma, que nous utiliserons dans nos calculs, ne peut être utilisé pour la première itération, la quantité  $\phi^{n-1}$  étant inconnue. Ce problème est pallié par l'écriture d'un schéma d'Euler d'ordre 1 pour cette première itération.

Nous effectuons un traitement implicite des termes des équations, ce qui permet de s'affranchir de critères de stabilité de type CFL reliant le pas de temps au pas d'espace. Nous pouvons ainsi choisir un pas de temps adapté à la physique des phénomènes sans avoir à prendre en compte des considérations d'ordre numérique.

### 3.2.4 Discrétisation spatiale des équations

La discrétisation spatiale des équations sur le maillage se fait par la méthode des volumes finis [Patankar 90]. Le domaine de calcul est découpé en volumes de contrôle, associés à chaque nœud du maillage.

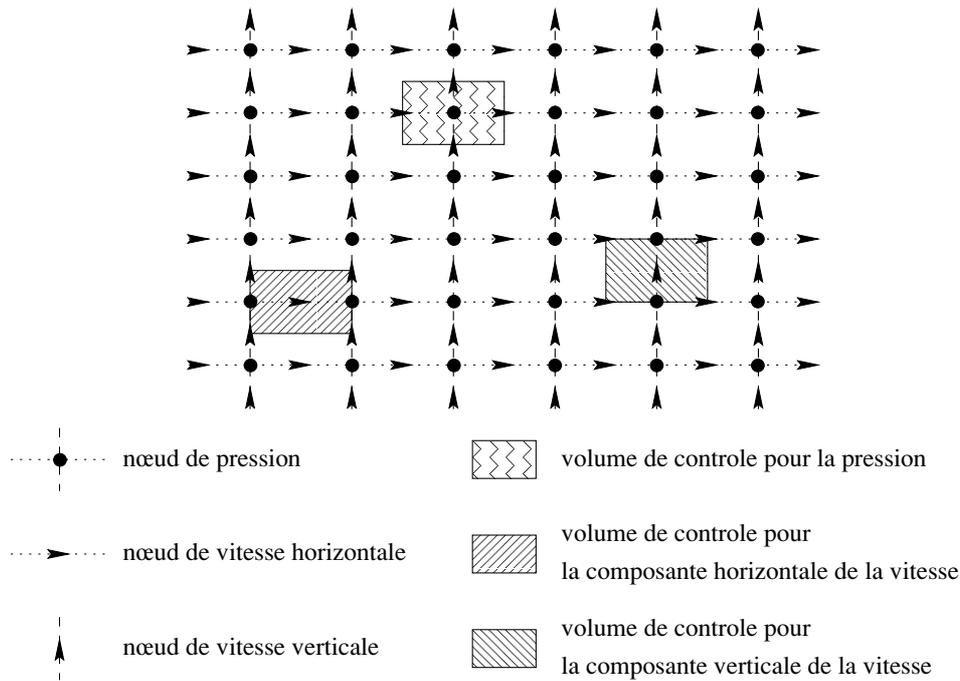


Figure 3.3 : *Maillage 2D du domaine de calcul — Grille principale et grilles décalées*

Les équations sont ensuite intégrées sur chaque volume de contrôle ; il est pour cela nécessaire d'interpoler des valeurs sur les frontières de ces volumes de contrôle.

Pour limiter le nombre de ces interpolations un maillage décalé en vitesse (maillage type MAC) est utilisé. Ce maillage est composé d'une superposition de trois grilles (en 2D) comme montré sur la figure 3.3. Les champs scalaires (couleur et pression) sont calculés sur le maillage principal tandis que les deux composantes de la vitesse sont calculées quant à elles sur les grilles décalées.

Nous avons représenté dans les figures 3.4 à 3.6 les différentes façons dont les valeurs sont interpolées suivant les schémas. Nous y avons représenté un domaine physique monodimensionnel en abscisse tandis que les valeurs d'une fonction  $f$  sur le maillage sont données en ordonnée. L'écoulement s'effectue de la gauche vers la droite.

Nous avons figuré trois nœuds appelés  $i - 1$ ,  $i$  et  $i + 1$ . La valeur de  $f$  étant connue sur ces nœuds, on veut l'interpoler au milieu de la maille avale d'abscisse  $i + \frac{1}{2}$ .

On a alors le choix entre différents *schémas* d'interpolation. Il en existe de nombreux, les plus courants étant [Hirsch 90b] :

– Le schéma Centré :

C'est celui qui vient naturellement à l'esprit. Il consiste à prendre simplement la moyenne des deux valeurs adjacentes au point considéré (figure 3.4).

– Le schéma Upwind :

Dans le cas de ce schéma, appelé aussi simple amont, l'interpolation est faite sur le nœud en amont de l'écoulement (figure 3.5).

– Les schéma Quick ou de Lax-Wendroff :

Ces schémas sont obtenus par une interpolation sur trois nœuds. Sans le cas du schéma Quick, ce sont les deux premiers nœuds amont et le nœud aval de l'écoulement qui sont pris en compte (figure 3.6).

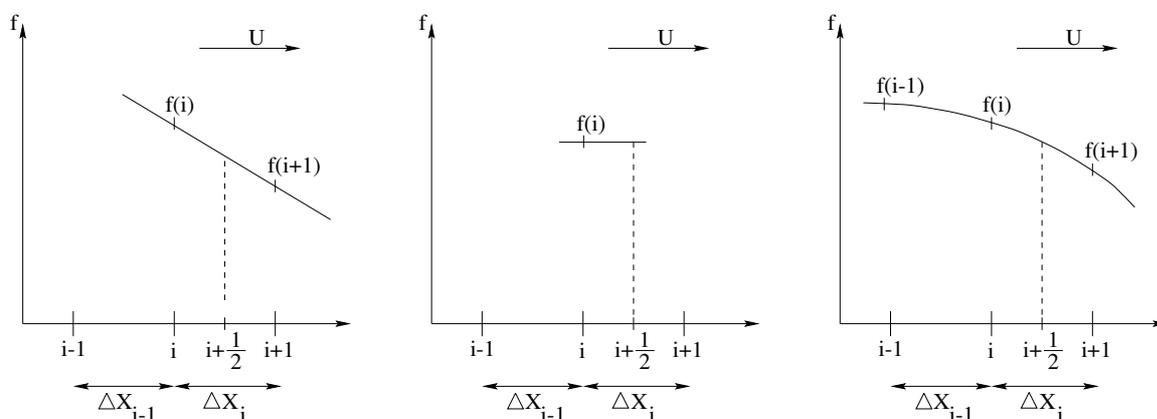


Figure 3.4 : *Schéma Centré*    Figure 3.5 : *Schéma Upwind*    Figure 3.6 : *Schéma Quick*

Chacun de ces schémas est une approximation et le fait d'interpoler des valeurs dénature l'équation originelle. Il est possible de montrer par des développements de Taylor [Thebault 95] que cela équivaut à résoudre une équation à laquelle est ajoutée un terme de diffusion plus ou moins important selon l'ordre de développement du schéma. Le schéma upwind par exemple diffuse fortement à l'approche des forts gradients alors que les schémas quick ou de Lax-Wendroff sont moins sensibles à ce problème mais provoquent

des oscillations. Le schéma centré est quant à lui rapidement instable et inadapté à nos problèmes.

Pour éviter ce dilemme entre diffusion et oscillation, il est possible de limiter les flux de schémas d'ordre élevé (propriété de Variation Totale Décroissante ou TVD) [Leveque 90, Yee 87, Hirsch 90b]. Cela permet d'éviter les oscillations dues au caractère hyperbolique de certaines équations (celle de transport en particulier) ou aux discontinuités des fonctions.

Nous utiliserons des schémas de type Lax-Wendroff TVD pour la résolution des équations comprenant des fronts, c'est à dire les équations de transport de couleur (3.3) et de l'énergie (3.4).

Pour la résolution des équations de Navier–Stokes, il est également possible d'adapter localement le schéma à l'écoulement. C'est le principe du schéma Hybride. De façon générale, le flux de convection-diffusion de la variable  $b$  s'écrit dans le cas monodimensionnel  $\phi = \rho U b - \Gamma (db/dx)$ . La conservation des flux sur chaque volume de contrôle impose  $db/dx = 0$ . La résolution numérique de cette équation sur l'intervalle entre deux nœuds du maillage  $X_i$  et  $X_{i+1}$  permet d'obtenir les courbes présentées sur la figure 3.7. On introduit le nombre de Peclet « de maille » défini par  $Pe = \rho U (X_{i+1} - X_i) / \Gamma$ . Ce nombre adimensionnel représente le rapport qui existe entre les forces convectives et les forces diffusives.

Lorsque le nombre de Peclet tend vers 0, les forces diffusives sont prépondérantes. En revanche, lorsque le nombre de Peclet est supérieur à 1 (en valeur absolue), la solution est exponentielle et « tend » vers les conditions aux limites.

Ce nombre de Peclet permet donc de quantifier la qualité de l'interpolation effectuée. On voit qu'un nombre de Peclet de 0 donne la meilleure interpolation tandis que les grandes valeurs (en valeur absolue) conduisent à une mauvaise interpolation.

La résolution analytique de l'équation du flux de convection-diffusion permet de calculer la variable  $b$  et donc de déterminer les coefficients  $a_i$  affectés aux nœuds du maillage. Ainsi, le coefficient  $a_i$  affecté à la variable  $b$  au point  $X_{i+1}$  est :

$$a_{i+1} = \frac{D_{i+1/2} Pe_{i+1/2}}{e^{Pe_{i+1/2}} - 1} \text{ avec } D_{i+1/2} = \frac{\Gamma}{X_{i+1} - X_i}$$

La figure 3.7 montre l'influence de ce coefficient en fonction du nombre de Peclet. Les

approximations des  $a_i$  définies par les lignes pointillées définissent le schéma hybride :

$$a_{i+1} = D_{i+1} \max \left[ -Pe_{i+1/2}, 1 - \frac{Pe_{i+1/2}}{2}, 0 \right]$$

Le schéma hybride est alors identique au schéma centré pour un Peclet inférieur à 2 (en valeur absolue) et au schéma Upwind pour les autres valeurs (figure 3.8). Ce schéma est un bon compromis entre la précision du calcul et le temps nécessaire au calcul des coefficients.

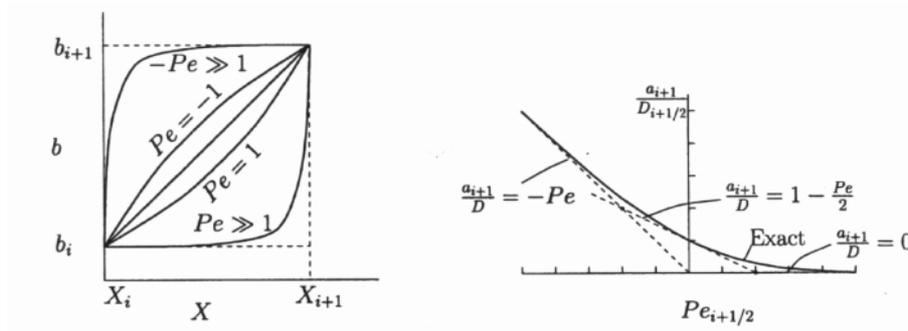


Figure 3.7 : Le schéma hybride – Solution de l'équation de diffusion convection monodimensionnelle (à g.) – Variation du coefficient  $a_{i+1}$  en fonction du Peclet (à d.)

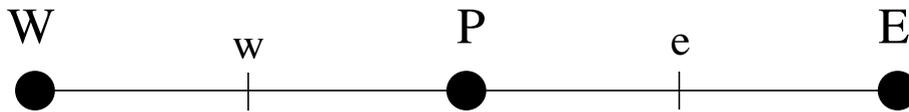


Figure 3.8 :

$-2 \leq Pe \leq 2$ : schéma centré,  $Pe < 2$  schéma décentré ( $X_e = XP$ ),  $Pe < 2$  schéma décentré ( $X_e = XE$ ).

### 3.2.5 Conditions aux limites

Le concept de maillage unique requiert la possibilité de pouvoir imposer à chaque itération et en tout point du domaine de calcul des conditions de contrôle de la maille. Appelées « conditions aux limites » sur les bords du domaine de calcul, l'extension de ces conditions à l'ensemble du du domaine permet d'appréhender des géométries complexes (autoriser le mouvement dans une direction en interdisant tout déplacement dans l'autre comme dans le cas du glissement du polymère contre le moule par exemple).

Les conditions aux limites sont intégrées aux équations grâce à des termes supplémentaires de contrôle.

Il est possible d'imposer à un champ  $\Phi$  une condition de Dirichlet ( $\Phi = \Phi_0$ ) ou de Neumann ( $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$ ) à n'importe quel endroit du domaine de calcul. Pour cela un terme  $Bio(T - T_\infty)$  est ajouté à l'équation (2.73).

Si la valeur 0 est attribuée à  $Bio$ , le terme supplémentaire disparaît et on retrouve la condition de Neumann programmée par défaut dans le code.

En revanche, si  $Bio \rightarrow \infty$ , cela revient à imposer au moment du passage dans le solveur la solution  $T = T_\infty$ , on obtient ainsi une condition de Dirichlet.

Il est possible d'imposer de la même façon un déplacement ou une vitesse en tout point de la géométrie par l'adjonction d'un terme de même nature à l'équations (2.102). La condition de Neumann correspond alors à l'application d'une contrainte nulle.

## 3.3 Résolution des équations de Navier – Stokes

### 3.3.1 Traitement du couplage vitesse-pression

Un des problèmes rencontrés lors de la résolution des équations de Navier–Stokes concerne le traitement du couplage entre vitesse et pression. Toute la difficulté consiste en effet dans la détermination de la pression sous la contrainte de la relation de conservation de la masse.

La solution consiste à découpler les deux variables vitesse et pression à l'aide, par exemple d'un schéma de type « prédicteur-correcteur » qui consiste à résoudre un système approché puis à le corriger via l'équation de continuité. C'est sur ce principe que fonctionnent la méthode SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations) – développée dans les années 1970 – et ses dérivées.

Le « lagrangien augmenté » est une méthode de minimisation sous la contrainte de l'équation de continuité où la pression, découplée par rapport à la vitesse, apparaît comme un multiplicateur de Lagrange [Fortin 82]. Ce problème d'optimisation exprimé sous une formulation faible est transformé en un problème de recherche de point-selle écrit sous

une formulation forte, sans contrainte. Notons que la contrainte est en fait directement introduite dans l'équation du mouvement sous la forme d'un terme de pénalisation qui couple les différentes composantes de la vitesse. Le calcul du couple vitesse-pression est effectué par l'algorithme d'Uzawa [Fortin 82].

La méthode de projection est quant à elle basée sur une procédure itérative entre les champs de vitesse et de pression. Cette méthode consiste à résoudre un champ de vitesse intermédiaire ne vérifiant pas la contrainte d'incompressibilité puis à le projeter sur un champ de vitesse à divergence nulle. Il existe de nombreuses variantes de cette technique, citons par exemple [Peyret 83] et [Hirsch 90a].

Par ailleurs, le terme convectif des équations de Navier-Stokes  $(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V}$  n'étant pas linéaire, il ne peut pas être intégré lors de la discrétisation. On utilise alors un schéma semi-implicite pour le linéariser, il sera discrétisé par  $(\mathbf{V}^n \cdot \nabla) \mathbf{V}^{n+1}$ .

Le choix entre les méthodes du lagrangien augmenté et de projection est délicat. La méthode de projection est généralement plus rapide et sa convergence est quasi-systématique. Il est toutefois nécessaire d'utiliser un petit pas de temps comparé à la méthode du lagrangien augmenté. Les matrices obtenues sont cependant mieux conditionnées, et donc plus rapides à inverser. L'inconvénient majeur de cette méthode est la nécessité de donner des conditions aux limites en pression, qui peuvent être difficiles à évaluer. La méthode du lagrangien augmenté est plus stable ce qui lui évite de diverger dans des cas numériquement difficiles à résoudre. Elle nécessite cependant l'évaluation non triviale d'un couple de paramètres de pénalisation.

Cependant, ces deux méthodes peuvent être combinées. Le lagrangien augmenté peut être utilisé pour donner un champ de vitesse intermédiaire à la méthode de projection qui soit proche du champ de vitesse réel. On utilise ainsi les avantages spécifiques à chaque méthode [Caltagirone 99].

### 3.3.2 Méthode de description de l'interface

De nombreuses méthodes numériques ont été développées pour résoudre les problèmes complexes que sont les écoulements diphasiques. Les méthodes lagrangiennes dans lesquelles le maillage se déforme pour suivre l'évolution du front montrent rapidement leurs limites dans le cas d'écoulements complexes [Ramaswamy 87]. Les méthodes eulériennes

– à maillage fixe – peuvent quant à elles être classées en deux catégories :

### Méthodes à suivi de front

Le principe de cette famille de méthodes consiste à suivre l'interface en la marquant soit par des particules sans masse [Daly 69], soit par une fonction mathématique dite «de hauteur» [Nichols 73] ou par une ligne de niveau (level set) [Osher 88]. Ces méthodes permettent de positionner précisément l'interface mais se limitent au cas où la déformation de l'interface reste modérée.

### Méthodes de suivi en volume

C'est ici la position du fluide qui permet de situer l'interface. La méthode des marqueurs de volume [Harlow 65] utilise des particules sans masse pour marquer un des fluides et suivre ainsi l'évolution de sa position au cours du temps. Le nombre de marqueurs est cependant limité par la taille mémoire du calculateur et la migration des particules nécessite périodiquement une redistribution homogène de leur position.

Deux méthodes ont fait leurs preuves en terme de précision et de flexibilité : les méthodes d'advection et de volume de fluide. Ces techniques ont en commun l'utilisation d'une fonction appelée fonction de couleur  $C$ . Le champ  $C$  prend une valeur dans chaque maille du domaine en fonction des volumes relatifs occupés par chaque phase. Par exemple, on donne à un fluide la couleur 1 et à l'autre la couleur 0. Une valeur intermédiaire indique la maille qui contient l'interface, ainsi que les proportions de chacun des fluides qui y sont présent. Le principal défaut de ces méthodes est que la position de l'interface n'est pas connue explicitement.

La première de ces deux techniques, la méthode d'advection consiste à réactualiser le champ  $C$  à chaque pas de temps en utilisant l'équation d'advection  $\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) C = 0$ . Cette méthode présente des inconvénients : elle ne permet pas de situer précisément l'interface puisque que la résolution du terme non-linéaire  $(\mathbf{V} \cdot \nabla) C$  de cette équation provoque de la diffusion comme le ferait une goutte d'encre dans de l'eau. Cependant, l'utilisation de schémas performants de type TVD permet de limiter l'ampleur de la diffusion numérique et de la limiter à environ trois mailles (cf. section 3.2.4).

Les méthodes de volume de fluide (VOF) incluent une reconstruction d'interface par des segments. Elles permettent de s'affranchir du problème de la diffusion numérique puisqu'on n'y résout plus l'équation d'advection. Introduite par [Noh 76] puis améliorée par [Chorin 80] puis par [Hirt 81], la méthode VOF SLIC (Simple Line Interface Calculation) a ouvert la voie des méthodes VOF, dont le processus de résolution comporte toujours trois étapes :

1. Le calcul des valeurs  $C_{ij}$  de la fonction de couleur. C'est, comme on le verra plus tard, un simple calcul d'aires. À la première itération, ces valeurs sont données par les conditions initiales.
2. Une reconstruction de l'interface. C'est à ce niveau que les méthodes diffèrent. Nous présentons ici la méthode CIAM<sup>1</sup>, qui représente l'interface par des segments de droite obliques séparant les deux fluides d'une cellule. Cette construction doit satisfaire à la fois la condition de volumes respectifs des fluides dans la cellule et l'orientation de la normale à l'interface, calculée en fonction des fractions volumiques des cellules adjacentes. Ces conditions sont suffisantes pour placer les segments ; la méthode n'assure donc pas la connexion des segments entre eux. D'abord introduite par [DeBar 74] puis améliorée par [Youngs 82] et [Lötstedt 82] cette technique est l'une des plus utilisées à l'heure actuelle [Zaleski 95, Li 95].
3. Le calcul de la nouvelle position de l'interface à partir de sa position à l'instant précédent et du champ de vitesse.

Dans l'exemple suivant (figure 3.9), l'interface est advectée par un champ de vitesse uniforme horizontal, le pas de temps étant tel qu'à chaque itération le fluide progresse d'une demi-maille vers la droite.

- (a) C'est la configuration de départ, donnée par les conditions initiales ou le résultat de l'itération précédente.
- (b) Le nouveau champ de vitesse a été calculé (ici : translation de gauche à droite d'une demi-maille). Les segments notés S1 et S2 se sont déplacés, un nouveau demi-segment apparaît à gauche tandis que celui de droite sort du domaine.

---

1. Construction d'Interface Affine par Morceaux, ou Piecewise Linear Interface Construction (PLIC) en anglais.

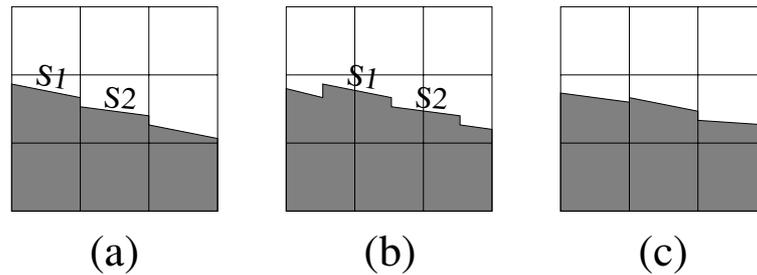


Figure 3.9 : *Exemple de résultat avec la méthode VOF/CIAM – d’après [Zaleski 95]*

- (c) La nouvelle fraction volumique est calculée dans chaque cellule par addition et soustraction des surfaces qui entrent et qui sortent de la maille. La nouvelle orientation de la normale est calculée connaissant ces nouvelles fractions volumiques dans les cellules adjacentes. L’interface est ensuite reconstruite dans chaque maille sous la forme d’un segment.

Nous utiliserons cette dernière méthode pour prendre en compte l’aspect diphasique de notre écoulement. Elle est certes plus coûteuse en terme de développement numérique mais permet d’éviter totalement la diffusion numérique et de conserver parfaitement la masse. La méthode VOF disponible au laboratoire a été développée par S. Abadie [Abadie 98] et J. Breil, dont la thèse est actuellement en cours et est utilisée dans de nombreuses configurations avec succès.

Il faut cependant noter que les méthodes à base de schémas TVD sont également très performantes, conservent bien la masse et diffusent très peu. Leur coût de développement est bien moindre que celui des méthodes VOF et ils sont d’une grande aide pour les problèmes à front, comme la solidification par exemple.

### 3.3.3 Tension superficielle

Les écoulements diphasiques présentent une interface sur laquelle agit la tension superficielle. La force de tension superficielle par unité d’aire interfaciale dépend à la fois de paramètres physiques (le coefficient de tension superficielle  $\sigma$ ) et géométriques (la courbure de l’interface  $\kappa$  et la normale à l’interface  $\mathbf{n}$ ). Il est délicat d’utiliser des considérations géométriques qui peuvent être complexes ou longues à calculer, c’est pourquoi on préfé-

raera exprimer la courbure interfaciale ainsi que la normale à l'interface en fonction de la fonction de couleur  $C$  (cf. section 2.6.3). Notons que cette technique permet de passer d'un problème physique surfacique à un traitement numérique volumique, plus adapté aux méthodes de type volumes finis.

On obtient alors :

$$F_\iota = \iota \kappa \mathbf{n} = -\frac{\iota (\nabla C)}{\|\nabla C\|} \nabla \cdot \left( \frac{\nabla C}{\|\nabla C\|} \right) \quad (3.9)$$

Par ailleurs, afin d'éviter des difficultés de convergence et des artefacts numériques, il est utile de réécrire le gradient de la fraction volumique en fonction de la masse volumique. On obtient alors [Vincent 99] :

$$F_\iota = -\frac{\iota (\nabla \rho)}{\llbracket \rho \rrbracket \rho_m} \nabla \cdot \left( \frac{\nabla \rho}{\|\nabla \rho\|} \right) \quad (3.10)$$

où  $\llbracket \rho \rrbracket$  est le saut de masse volumique à l'interface et  $\rho_m$  est la masse volumique moyenne entre deux phases ( $\rho_m = (\rho_1 + \rho_2)/2$ ).

De plus, il est bénéfique d'appliquer cette modélisation non pas à  $\rho$ , mais à une fonction lissée  $\underline{\rho}$  définie par (par exemple) :

$$\underline{\rho}_{i,j} = \frac{\rho_{i,j}}{2} + \frac{\rho_{i-1,j} + \rho_{i+1,j} + \rho_{i,j-1} + \rho_{i,j+1}}{8} \quad (3.11)$$

## 3.4 Résolution de l'équation de l'énergie

L'équation de l'énergie (3.4) présentée plus haut peut s'écrire en faisant intervenir la fraction solide définie par  $f_S = 1 - f_L$  :

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \rho L_f \frac{\partial f_S}{\partial t} + \overline{\overline{\sigma}} : \overline{\overline{D}} \quad (3.12)$$

### 3.4.1 Prise en compte du changement de phase

Quelques auteurs ont présenté la synthèse des travaux numériques réalisés pour simuler le changement de phase solide-liquide d'un corps pur. Citons parmi eux [Crank 84, Shamsundar 88, Bertrand 99]. Nous utilisons pour notre part une méthode utilisée au laboratoire [Vincent 00] qui est basée sur la technique « New Source » de Voller [Voller 90].

L'équation de l'énergie est résolue par un algorithme de convergence de type point fixe sur la fraction solide afin de prendre en compte la solidification. On suppose que la variation de l'enthalpie est linéaire en fonction de la température. Le terme source de changement de phase peut alors s'écrire :

$$S_C = \rho L_f \frac{\partial f_S}{\partial t} = \rho C_p (T - T_f) \quad (3.13)$$

Si  $f_S^k$  est la fraction solide à la  $k$  ième itération du point fixe,  $f_S^{k+1}$  est tiré de (3.13) par :

$$f_S^{k+1} = f_S^k + \Delta t \frac{S_C}{\rho L_f} \quad (3.14)$$

À chaque itération de ce point fixe, on utilise une discrétisation temporelle hybride explicite/implicite. Les termes d'advection sont discrétisés par un schéma Lax-Wendroff TVD. Ceci nous permet de bien représenter les gradients importants de température sans introduire d'instabilité numérique.

### 3.4.2 Prise en compte des résistances thermiques

Comme nous l'avons vu dans la section 1.5.2, l'influence des résistances de contact a un effet notable sur l'évolution du champ de température. Dans le cas du moulage des polymères, la RTC provient principalement des aspérités présentes sur la paroi du moule qui empêchent un bon contact.

La loi de variation de la RTC en fonction de la pression  $p$  est donnée par une loi déterminée à partir de mesures effectuées par S. Quilliet [Quilliet 98] (figure 3.10). Nous utilisons une expression du type :

$$\frac{1}{RTC} = \alpha e^{\beta p} \quad (3.15)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont les constantes du modèle correspondant au contact entre de l'ABS et un acier 40CMD8 de rugosité  $R_a = 0,7 \mu m$ .

$R_a$  est une rugosité moyenne *arithmétique* définie par :

$$R_a = \frac{1}{nm} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |Z_{ij}| \quad (3.16)$$

où  $Z$  est l'écart d'altitude du point (i,j) par rapport au plan de base.

Il est également possible de définir la rugosité moyenne *quadratique*  $R_q$  par :

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{nm} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m Z_{ij}^2} \quad (3.17)$$

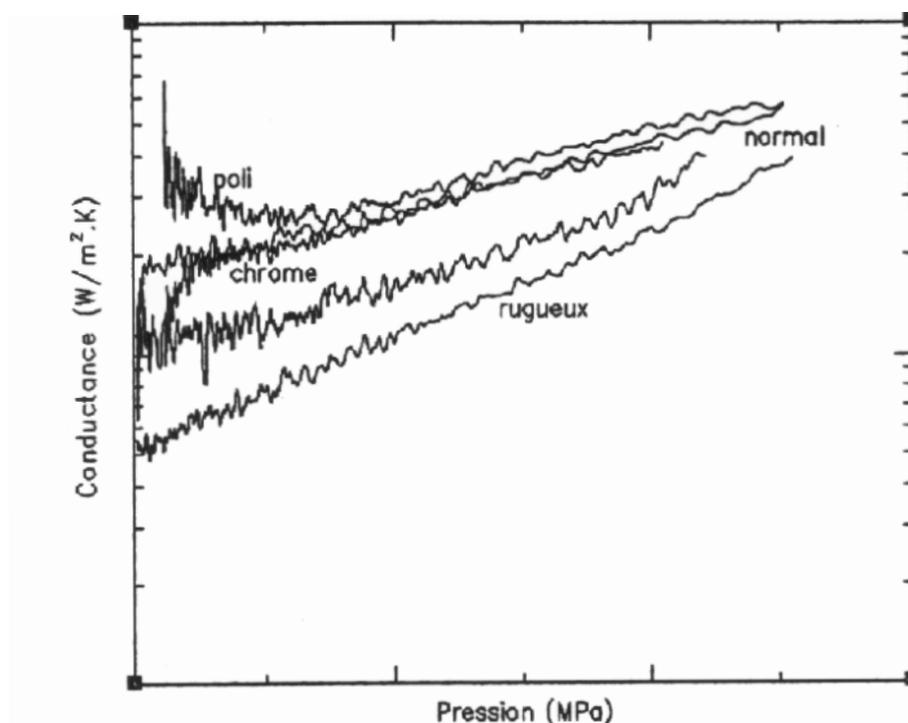


Figure 3.10 : Variation de la conductance en fonction de la pression

Cependant, la seule connaissance de la RTC est insuffisante. Il arrive en effet qu'une lame d'air s'intercale entre les parois du moule et de la pièce. Le calcul du champ de déplacement permet alors de connaître l'épaisseur de ces lames d'air. L'application d'un modèle tri-couche en série pour calculer la conductivité thermique à l'interface (3.18) permet de prendre en compte l'ensemble des contributions à la résistance thermique (figure 3.11).

$$k^* = \frac{\Delta x + \delta}{R_0 + RTC + R_{air}} \quad (3.18)$$

où  $\Delta x$  est le pas d'espace du maillage,  $R_0$  est la résistance thermique de l'interface parfaite (due à la discrétisation),  $RTC$  est la résistance thermique de contact, et  $R_{air}$  est la résistance thermique liée à la présence de la lame d'air.

$$\text{avec } R_{air} = \frac{\delta}{k_{air}} \text{ et } R_0 = \frac{k_{moule} + k_{poly}}{2k_{moule}k_{poly}} \Delta x$$

où  $\delta$  est l'épaisseur de la lame d'air,  $k_{air}$ ,  $k_{moule}$  et  $k_{poly}$  sont respectivement les conductivités thermiques de l'air, du moule et du polymère.

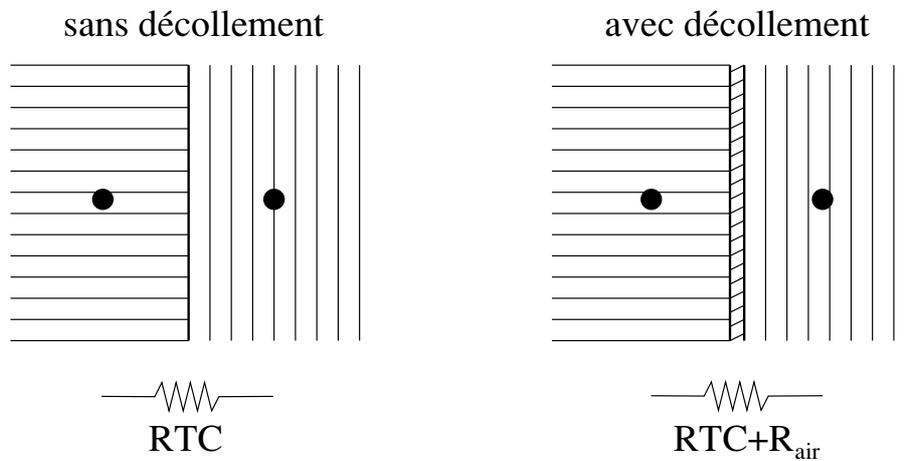


Figure 3.11 :  $RTC$  avant et après décollement

### 3.5 Résolution de l'équation des solides

L'équation aux déplacements (2.102) est discrétisée sur un maillage cartésien irrégulier. Les inconnues de cette équation sont les composantes du vecteur déplacement. Dans la formulation proposée par P. Roux [Roux 94], c'est l'équation d'équilibre qui est écrite et qui permet d'aboutir à l'équation aux déplacements discrétisée en suivant le cheminement présenté sur la figure 3.12.

L'équation d'équilibre statique s'écrit classiquement (2.97). Dans le cas où l'on ajoute un second membre, cette équation devient :

$$\frac{1}{V} \iiint_D \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}} \, dv + \frac{1}{V} \iiint_D \mathbf{f} \, dv = \mathbf{0} \quad (3.19)$$

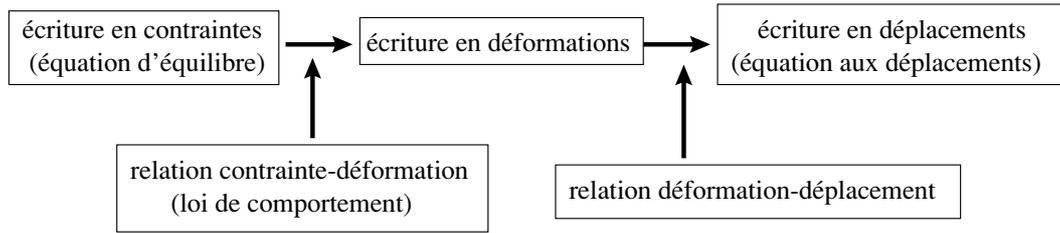


Figure 3.12 : *Obtention de l'équation aux déplacements discrétisée*

En utilisant le théorème de la divergence, on obtient :

$$\frac{1}{V} \iint_S \bar{\bar{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \, ds + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (3.20)$$

La discrétisation sur le volume cartésien présenté sur la figure 3.13 donne :

$$\begin{cases} \frac{1}{dx \, dy} \iint_S (\sigma_{xx}(e) - \sigma_{xx}(o)) \, dy + \frac{1}{dx \, dy} \iint_S (\sigma_{xy}(n) - \sigma_{xy}(s)) \, dx + f_x = 0 \\ \frac{1}{dx \, dy} \iint_S (\sigma_{xy}(e) - \sigma_{xy}(o)) \, dy + \frac{1}{dx \, dy} \iint_S (\sigma_{yy}(n) - \sigma_{yy}(s)) \, dx + f_y = 0 \end{cases} \quad (3.21)$$

où  $e$ ,  $o$ ,  $n$  et  $s$  sont les indices respectifs des faces est, ouest, sud et nord d'un volume de contrôle (figure 3.14).

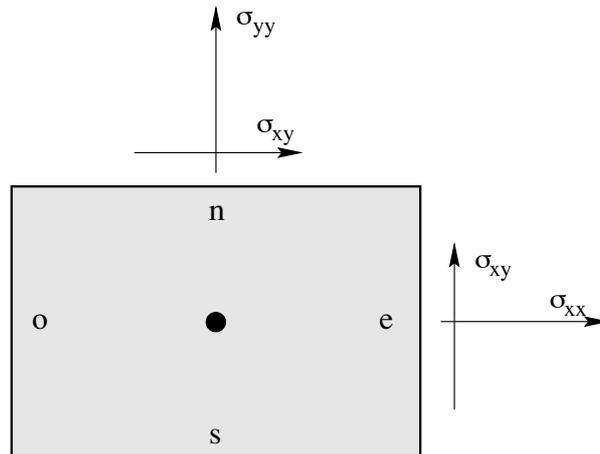


Figure 3.13 : *Volume de contrôle pour l'équation aux déplacements*

Les deux composantes du déplacement sont situées sur les nœuds du maillage tandis que les caractéristiques physiques et les contraintes sont stockées sur les coins du volume de contrôle afin de réduire les interpolations.

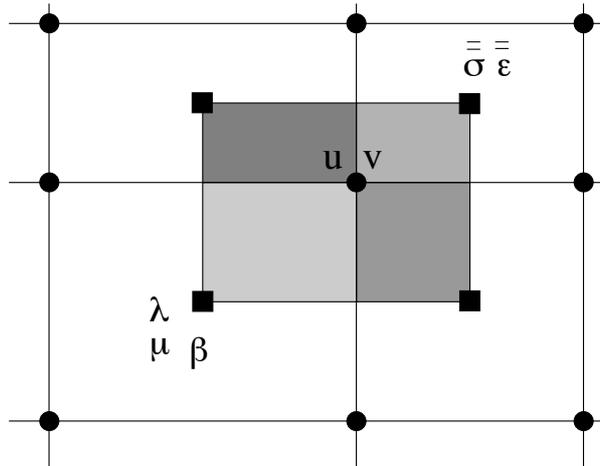


Figure 3.14 : Maillage décalé pour l'équation aux déplacements

Pour exprimer ces contraintes sur les coins du volume de contrôle en fonction des contraintes situées sur les interfaces, nous écrivons des moyennes barycentriques sur les interfaces :

$$\begin{cases} \sigma_{xj}(p) = f(\sigma_{xj}^n(p), \sigma_{xj}^s(p)) & p = e, o \\ \sigma_{iy}(q) = f(\sigma_{iy}^e(q), \sigma_{iy}^o(q)) & q = n, s \end{cases} \quad (3.22)$$

La loi de comportement permet ensuite d'obtenir des écritures en déformations sur les coins des volumes de contrôle.

Puis nous utilisons l'équation qui relie les contraintes et les déformations. Les dérivées des composantes des vecteurs déplacement sont approchées par un schéma aux différences finies. En remarquant que les dérivées des termes principaux ( $u$  ou  $v$  pour l'équation projetée respectivement selon  $x$  ou  $y$ ) sont dans les mêmes directions que les normales des surfaces sur lesquelles elles sont définies, nous utilisons un schéma de discrétisation à cinq points. Par exemple :

$$\frac{\partial b^n}{\partial x}(e) = \frac{\partial b^s}{\partial x}(e) = \frac{b_{i+1,j} - b_{i,j}}{\Delta x_e} \quad b = u, v \quad (3.23)$$

Les termes de couplage ( $v(u)$  pour l'équation projetée selon  $x(y)$ ) ont leurs dérivées définies dans une direction tangentielle à la surface sur laquelle elle sont définies. Nous utilisons alors un schéma de discrétisation à 9 points pour les définir. Par exemple :

$$\frac{\partial b^o}{\partial y}(s) = \frac{(b_{i,j} + b_{i-1,j}) - (b_{i,j-1} + b_{i-1,j-1})}{2\Delta y_s} \quad b = v, u \quad (3.24)$$

Nous obtenons alors un système matriciel où les blocs principaux  $A$  et  $D$  contiennent 5 diagonales ; les blocs de couplage  $B$  et  $C$  contenant quant à eux 9 diagonales.

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_x \\ \Phi_y \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

### 3.5.1 Influence des hypothèses d'élasticité plane

Lors du refroidissement de la pièce après la phase de compactage, la pression diminue dans le moule. Ce phénomène, dû à la contraction du polymère sous l'effet de l'abaissement de sa température, nécessite une attention particulière en ce qui concerne sa modélisation.

En effet, cette phase en réalité tridimensionnelle doit être modélisée dans un environnement bidimensionnel en tenant compte des effets de couplage dans la troisième direction (cf. section 2.7.3).

La variation de pression en fonction de la température dépendra directement de l'hypothèse choisie, comme nous allons l'illustrer sur un exemple simple.

Soit une tige de longueur  $L$  (supposée monodimensionnelle) constituée d'un matériau de module d'Young  $E$ , de coefficient de Poisson  $\nu$  et de coefficient de dilatation thermique  $\alpha$ .

Cette tige soumise à une augmentation uniforme de température d'amplitude  $\tau$  va s'allonger d'une longueur (3.26) :

$$u = \alpha\tau L \quad (3.26)$$

Si ce déplacement est bloqué (par exemple si la tige est maintenue entre deux plans) une contrainte de compression indépendante des dimensions (3.27) est générée :

$$\sigma = E\varepsilon = E\frac{u}{L} = E\alpha\tau \quad (3.27)$$

Cela signifie que pour créer une contrainte  $\sigma_0$ , il faut imposer une augmentation de température d'amplitude  $\tau = \frac{\sigma_0}{E\alpha}$ .

Dans les cas bi- et tridimensionnels, un couplage par effet Poisson intervient ; ses conséquences sont présentés dans le tableau 3.1. Ce tableau récapitulatif permet également de faire apparaître la variable  $\beta$  utilisée dans l'équation aux déplacements (2.102).

Tableau 3.1 : Hypothèses d'élasticité plane

	1D	2D contr. pl.	2D def. pl.	3D
contrainte (Pa)	$\alpha E \tau$	$\frac{\alpha E \tau}{1 - \nu}$	$\frac{\alpha E \tau}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$	$\frac{\alpha E \tau}{1 - 2\nu}$
exemple $\tau = 1K$ (bar)	1,00	1,43	1,92	2,50
température (K)	$\frac{\sigma_0}{\alpha E}$	$\frac{\sigma_0(1 - \nu)}{\alpha E}$	$\frac{\sigma_0}{\alpha E}(1 - \nu)(1 + \nu)$	$\frac{\sigma_0(1 - 2\nu)}{\alpha E}$
exemple $\sigma_0 = 1bar$ (K)	1,00	0,70	0,52	0,40
$\beta$ (Pa.K <sup>-1</sup> )	$\alpha E$	$\frac{\alpha E}{1 - \nu}$	$\frac{\alpha E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$	$\frac{\alpha E}{1 - 2\nu}$

avec  $E = 10^9 Pa$ ,  $\alpha = 10^{-4} K^{-1}$  et  $\nu = 0,3$  pour les exemples numériques.

Nous remarquons qu'une variation de 1 degré dans le matériau va entraîner une variation de pression de respectivement 1,43 et 1,92 bars suivant l'hypothèse retenue (contraintes planes ou déformations planes).

De la même façon, pour créer une contrainte d'amplitude 1 bar, il faudra appliquer une variation de température de respectivement 0,7 et 0,52 degré.

Dans le cas du moulage par injection, la pièce est bloquée dans le moule suivant la direction perpendiculaire à la coupe dans laquelle s'effectue le calcul. Nous effectuons donc le calcul en *déformations planes*.

### 3.5.2 Évolution temporelle

Dans un cas simple, la résolution d'un problème thermoélastique instationnaire ne pose pas de problème particulier. En effet, la loi de comportement élastique implique une indépendance par rapport au temps : à une sollicitation correspond un état déformé

instantané. On peut donc traiter le problème comme une succession d'états déformés ayant tous pour origine l'état initial.

Nous pouvons illustrer cela en étudiant le cas simple du refroidissement d'une plaque.

On suppose donc une plaque initialement à la température  $T_1$  refroidie par un de ses côtés à la température  $T_0$ , les autres faces étant supposées adiabatiques. On impose des contraintes nulles sur les faces de la plaque, qui peut ainsi se dilater ou se contracter librement.

L'état initial est choisi comme état de référence : les déplacements et les contraintes y sont nuls.

On cherche l'évolution au cours du temps du champ de déplacement.

- Après le temps  $\delta t$ , le champ de température est  $T^1$ . L'écart de température  $\tau$  est alors  $T^1 - T^0$ , correspondant à un déplacement  $\mathbf{U}^1$ .
- Après le temps  $n\delta t$ , le champ de température est  $T^n$ . L'écart de température  $\tau$  est alors  $T^n - T^0$ , correspondant à un déplacement  $\mathbf{U}^n$ .

On remarque que le champ de déplacement à l'instant  $n\delta t$  est totalement indépendant de l'état mécanique aux instants précédents. Il y a une relation directe entre température et déplacement indépendamment de la valeur du pas de temps. Cela provient du fait que le champ de température est *découplé* du problème mécanique.

Mais ce n'est pas toujours le cas. Si au lieu d'avoir une face maintenue à la température  $T_0$ , c'est une autre plaque indéformable, isotherme et initialement accolée à notre plaque qui assure le refroidissement, les choses sont très différentes. En effet, plus la température va diminuer, plus elle va se contracter et donc s'éloigner de la source froide, une lame d'air s'intercalant entre les deux solides. Le champ de température dépend du champ de déplacement, comme dans le cas précédent, mais le champ de déplacement dépend également du champ de température par l'intermédiaire de l'épaisseur de la lame d'air.. Il y a alors *couplage* entre la thermique et la mécanique du problème, qui doivent donc être traitées d'un seul bloc.

De plus, la loi de comportement élastique (2.98) implique une indépendance par rapport au temps : à une sollicitation donnée correspond un état déformé instantané. On peut

alors traiter le problème comme la superposition d'une succession d'états déformés ayant pour origine l'état initial.

L'algorithme de résolution est le suivant :

1. Les caractéristiques thermiques du matériau sont connues à l'instant  $n$  ;
2. Le calcul thermique est effectué et donne le champ de température à l'instant  $n + 1$  ( $T^{n+1}$ ) ;
3. Le calcul mécanique est effectué en utilisant le champ de température  $T^{n+1} - T^n$  et donne le champ de déplacement partiel  $\underline{\mathbf{U}}^{n+1}$  ;
4. Les champs de déformation et de contraintes  $\underline{\underline{\varepsilon}}^{n+1}$  et  $\underline{\underline{\sigma}}^{n+1}$  sont calculés à partir de  $\underline{\mathbf{U}}^{n+1}$  ;
5. Les champs finaux sont calculés grâce au *principe de superposition* [Salençon 88] :  
 $\overline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{n+1} = \overline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^n + \underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^{n+1}$ ,  $\overline{\underline{\underline{\sigma}}}^{n+1} = \overline{\underline{\underline{\sigma}}}^n + \underline{\underline{\underline{\sigma}}}^{n+1}$ ,  $\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n + \underline{\mathbf{U}}^{n+1}$ .
6. Connaissant les valeurs de la température et de la pression, on peut utiliser des lois rhéologiques pour réactualiser les caractéristiques thermomécaniques.

L'utilisation du principe de superposition permet donc de traiter un problème thermo-élastique couplé. Cependant, les champs finaux étant la somme de tous les champs intermédiaires, il est nécessaire de résoudre précisément le problème à chaque itération.

Le pas de temps doit par ailleurs être choisi avec soin : trop grand, il altère la qualité de la résolution du couplage thermomécanique. Si il est trop petit, il conduit à des temps de calcul prohibitifs dans les cas complexes.

Des essais à différents pas de temps ont été effectués de façon à trouver un bon compromis qui assure la qualité des résultats (cf. chapitre 4).

### 3.5.3 Gestion du contact

Les relevés expérimentaux réalisés amènent à penser que la pièce décolle des parois du moule et peut être même se déplace dans celui-ci. Il est donc important de prévoir ces éventualités et donc de concevoir un code capable d'y faire face.

### Lame d'air

La présence d'une lame d'air entre deux matériaux est prise en compte de la façon suivante :

- Pour la partie thermique : l'épaisseur de la lame d'air est calculée par la partie mécanique pour chaque maille de l'interface. On applique alors un modèle de conduction thermique tricouche en série (une demi-maille du matériau 1, l'air, une demi-maille du matériau 2). On obtient ainsi une conductivité thermique équivalente qui est injectée dans le modèle thermique (cf. section 3.4.2).
- Pour la partie mécanique : on donne à la maille d'interface entre les deux matériaux les propriétés mécaniques de l'air. Il est évidemment impossible de donner à cette maille les dimensions réelles de la lame d'air, qui peut être d'épaisseur variable. Il faut alors faire un choix et privilégier l'étude d'un des deux côtés, tandis que l'autre se voit amputé d'une maille. Cependant, il faut noter que dans le cas où le moule est supposé indéformable, cela n'a aucune incidence, et que dans le cas général cette épaisseur est de l'ordre de la dizaine de microns et n'influe que très peu sur le calcul mécanique. Cela n'a en outre aucune influence sur le calcul thermique. Dans notre cas, la maille d'interface appartient au moule et possède donc les propriétés thermiques de l'acier. Ses caractéristiques mécaniques sont cependant variables : acier lorsqu'il y a contact et air lorsqu'il y a décollement, de façon à permettre le mouvement.

### Collement et décollement

Il est nécessaire d'envisager le cas où la pièce polymère vient en contact avec le moule et donc où la lame d'air disparaît. Si rien de plus n'est fait, on peut aboutir à des situations non physiques où la pièce et le moule s'interpénètrent. On teste donc à chaque itération qu'aucun de ces déplacements ne se produit. Si c'est le cas, la condition à la limite sur la maille incriminée est modifiée de façon à empêcher son mouvement, ce qui revient à la coller au moule. Si on suppose un moule déformable, il suffit de remplacer localement les caractéristiques de l'air par celles du moule. Une fois cette opération effectuée, on recommence le calcul de l'itération en cours avec ces nouvelles conditions aux limites.

Il convient alors de tester l'état de contrainte sur l'ensemble des mailles « collées ». En effet, lors de la deuxième phase du calcul peuvent y être générées des contraintes de traction indiquant un décollement du polymère de la paroi du moule. Il faut alors recréer la lame d'air. Cette opération de collement–décollement se poursuit jusqu'à satisfaction des conditions aux limites exactes. un cas test de présentation de cette méthode est présenté dans le chapitre 4.

### Frottement

Le déplacement de la pièce dans le moule entraîne un frottement à l'interface polymère – moule. Nous utilisons la loi de Coulomb pour modéliser ce phénomène. Cette loi introduit un coefficient de frottement  $C$  qui dépend de la nature des deux matériaux en contact.

Un solide  $S$  sur lequel on applique une force  $P$  normale à la paroi ainsi qu'une force  $F$  parallèle à la paroi est retenu par un force de frottement  $R$  telle que (figure 3.15) :

$$\begin{cases} \text{si } F < CP & R = F & \text{il n'y a pas de mouvement} \\ \text{si } F \geq CP & R = CP & \text{il y a mouvement} \end{cases}$$

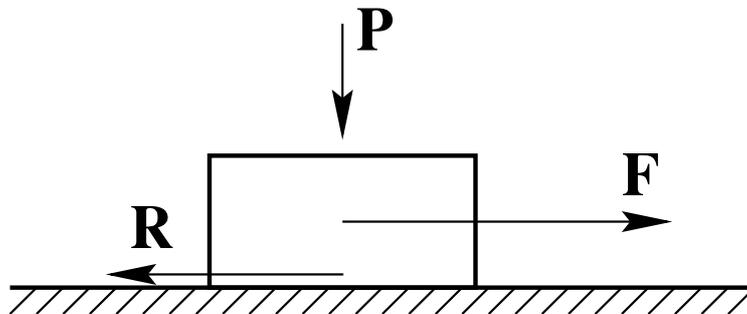


Figure 3.15 : *Frottement de Coulomb*

Dans la cas qui nous intéresse, l'algorithme se présente de la façon suivante : le déplacement tangentiel à la paroi du moule des mailles de contact est empêché dans un premier temps par les conditions aux limites. Le calcul mécanique est ensuite effectué afin de calculer les contraintes tangentielles générées dans chaque maille. Deux cas de figure se présentent alors :

1. La contrainte tangentielle à l'interface est inférieure au produit du coefficient de

frottement et de la contrainte normale. Il n'y a pas de mouvement et la maille reste bloquée.

2. La contrainte tangentielle à l'interface est supérieure ou égale au produit du coefficient de frottement et de la contrainte normale. Il y a alors mouvement avec apparition d'une force de frottement. Le déplacement nul imposé à la maille se transforme en contrainte imposée dans le sens opposé au déplacement d'amplitude connue et constante. Le déplacement se termine alors lorsque la force de frottement devient égale à la force appliquée sur la maille.

Cependant, il est important de remarquer que le polymère se transforme dans le moule. Sa nature variant au cours du temps, il en va de même du coefficient de frottement. On peut supposer un coefficient infini lorsque le polymère est liquide, traduisant ainsi son adhérence à la paroi. Cependant, il est difficile de déterminer un coefficient de frottement entre la paroi du moule et le polymère lorsque la pièce est solide. Une telle loi devrait faire intervenir de nombreux paramètres comme la pression, la température, la rugosité du moule, etc. Il n'y a pas à notre connaissance de loi de frottement de ce type, nous supposons donc, faute de mieux, un glissement parfait du polymère contre la paroi du moule.

La technique de gestion du contact que nous avons mise en place repose sur différents tests effectués sur les mailles situées à l'interface entre la pièce et le moule. Les déplacements et contraintes normaux aux parois permettent de gérer le collement et le décollement local de la pièce tandis que les contraintes normales peuvent être utilisées pour évaluer le glissement de la pièce sur le moule.

Cette méthode présente l'avantage de pouvoir s'adapter à n'importe quelle configuration géométrique de la pièce. Cependant elle nécessite des calculs supplémentaires destinés à repérer les différentes conditions au limites à appliquer, ce qui augmente sensiblement le temps de calcul.

## 3.6 Résolution des systèmes linéaires

La discrétisation des équations (3.2) et (2.73) conduit à l'écriture d'un système linéaire de type  $Ax = b$  où  $A$  est une matrice carrée à 5 diagonales pour l'équation (2.73) et à 23 diagonales pour l'équation (3.2).  $x$  est la solution (la température ou les composantes du vecteur déplacement) et  $b$  est le second membre.

Il existe deux méthodes de résolution des systèmes linéaire : les méthodes directes et les méthodes itératives (voir par exemple [Théodor 83]).

1. Les méthodes directes, dont la plus connue est certainement celle du « pivot de Gauss », résolvent la solution exacte du système. Cependant, ces méthodes imposent le stockage en mémoire de l'ensemble de la matrice, elles ne tirent donc pas parti de sa structure creuse et diagonale (on obtient même au cours du calcul une matrice totalement pleine !). Enfin, le temps de calcul pour une matrice de  $n \times n$  composantes est fonction de  $n^3$ , ce qui conduit à des temps de calculs prohibitifs pour de grands systèmes et limite de ce fait le nombre de mailles utilisées.

Ces méthodes directes sont donc inadaptées à la résolution de grands systèmes linéaires à structure diagonale comme ceux que nous obtenons.

2. Les méthodes itératives, théoriquement moins précises, sont en fait plus performantes, moins coûteuses en mémoire et en temps de calcul, et s'adaptent bien aux matrices à structure diagonale.

La solution finale, à l'issue d'un processus itératif, n'est pas exacte. Cependant, il est possible de choisir un majorant de l'erreur commise. Nous prenons en pratique dans nos calculs une erreur inférieure à  $10^{-13}$ . Remarquons enfin qu'il est vain de fixer une précision trop basse, la précision des résultats étant limitée par les capacités de la machine (typiquement  $10^{-16}$ ).

Nous utilisons une méthode itérative de type *gradient conjugué*, introduite en 1952 par Hestenes et Stiefel. La résolution d'un système linéaire  $Ax = b$  par cette méthode consiste à écrire :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

où  $\alpha_k$  est un scalaire (à l'itération  $k$ ) et  $p_k$  une *direction de descente* entre  $x_k$  et  $x_{k+1}$ .

Les différentes méthodes de gradient conjugué diffèrent par la technique employée pour déterminer ces deux paramètres.

On note le *résidu*  $r = Ax - A\bar{x}$ , où  $\bar{x}$  est la solution numérique approchée.

Résoudre le système  $Ax = b$  est alors équivalent à minimiser la fonctionnelle :

$$E(x) = (A(x - \bar{x}), x - \bar{x})$$

La convergence de l'algorithme se traduit par  $E(x_{k+1}) < E(x_k)$ . Pour vérifier cette inégalité, on choisit pour une itération  $k$  une direction de descente  $p_k \neq 0$  et un scalaire  $\alpha_k$ . Il existe un paramètre optimal [Théodor 83] :

$$\alpha_k = \frac{(r_k, p_k)}{(Ap_k, p_k)}$$

On note que la direction  $p_k$  est orthogonale au résidu  $r_{k+1}$  :  $(p_k, r_{k+1}) = 0$ .

Nous utilisons pour la résolution un algorithme appelé BI-CGStab [Vandervorst 92]. L'algorithme de résolution est décrit dans l'annexe D.

De plus, afin d'améliorer l'efficacité de la résolution de nos grands systèmes linéaires, les matrices sont préconditionnées [Khadra 90]. Nous utilisons un préconditionnement MILU pour l'équation (2.73) et Jacobi pour l'équation (2.102).

### 3.7 Conclusion

Ce chapitre présente la façon dont nous résolvons numériquement les équations introduites au chapitre précédent. La méthode des volumes finis est utilisée pour les équations de la mécanique des solides. L'écriture de la conservation des contraintes sur chaque volume de contrôle permet d'obtenir une solution en déplacements. À partir de cette solution, nous remontons aux déformations puis aux contraintes en utilisant successivement l'hypothèse des petites perturbations et la loi de comportement thermoélastique.

L'aspect numérique du couplage thermomécanique est également présenté : l'utilisation du principe de superposition permet de résoudre les problèmes présentant un tel couplage, ce qui est le cas du moulage par injection.

Nous avons de plus couplé cette discrétisation au code volumes finis utilisée au laboratoire pour résoudre les équations de la mécanique des fluides et de la thermique.

Les méthodes de gestion des interfaces et des fronts sont présentées, ainsi que les particularités liées à la détermination du mouvement de la pièce dans le moule.

Ces méthodes numériques vont maintenant être validées afin de tester leur fiabilité et la qualité de leur comportement.



# Chapitre 4

## Validations

Le refroidissement d'une pièce polymère dans un moule fait intervenir plusieurs phénomènes distincts qu'il est nécessaire de modéliser. Le refroidissement en lui-même nécessite de calculer les transferts de chaleur au sein de la pièce et du moule. Ces champs de température sont à l'origine de déformations qui doivent permettre un collement ou un décollement de la pièce sur le moule, et ce au niveau local. De plus, des contraintes résiduelles sont générées au sein du polymère.

Dans le but de s'assurer de la fiabilité du code pour la résolution de l'ensemble des points cités ci-dessus, nous nous sommes assurés que chaque étape prise séparément était correctement simulée. C'est l'objet de ce chapitre de validations.

Nous présentons également une première approche du remplissage du moule. Cela nous permet de présenter l'influence du mouillage du fluide sur les parois ainsi que l'aspect prépondérant de la production de chaleur par dissipation visqueuse dans cette phase du procédé.

### 4.1 Thermique

Ce premier cas de validation montre l'influence de la RTC sur les transferts de chaleur instationnaires entre deux matériaux différents.

Nous considérons ici deux matériaux semi-infinis, de caractéristiques thermiques et températures initiales différentes, mis en contact imparfait sur l'abscisse  $x = 0$ .

La solution analytique est donnée par les équations (4.1). Les indices  $d$  et  $g$  font référence respectivement aux parties *droite* et *gauche* du domaine (cf. annexe E).

$$\begin{cases} T_g(x, t) = T_g^0 + \frac{(T_d^0 - T_g^0)b_d}{b_d + b_g} \left[ -e^{\left(\frac{-hx}{\sqrt{a_g}} + h^2t\right)} \operatorname{erfc}\left(h\sqrt{t} - \frac{x}{2\sqrt{a_g t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{-x}{2\sqrt{a_g t}}\right) \right] \\ T_d(x, t) = T_d^0 + \frac{(T_g^0 - T_d^0)b_g}{b_d + b_g} \left[ -e^{\left(\frac{hx}{\sqrt{a_d}} + h^2t\right)} \operatorname{erfc}\left(h\sqrt{t} + \frac{x}{2\sqrt{a_d t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_d t}}\right) \right] \end{cases} \quad (4.1)$$

avec  $a_i$ : diffusivité thermique du matériau  $i$ ,  $T_i^0$ : température initiale du matériau  $i$ ,  $h = \frac{b_g + b_d}{Rb_g b_d}$  et  $R$ : résistance thermique de contact.

Le graphe 4.1 montre la bonne correspondance entre les solutions analytique et numérique, ce qui valide la technique de prise en compte des RTC développée au paragraphe 3.4.2. On note l'absence de nœud de calcul à l'interface, conséquence du mode de discrétisation choisi.

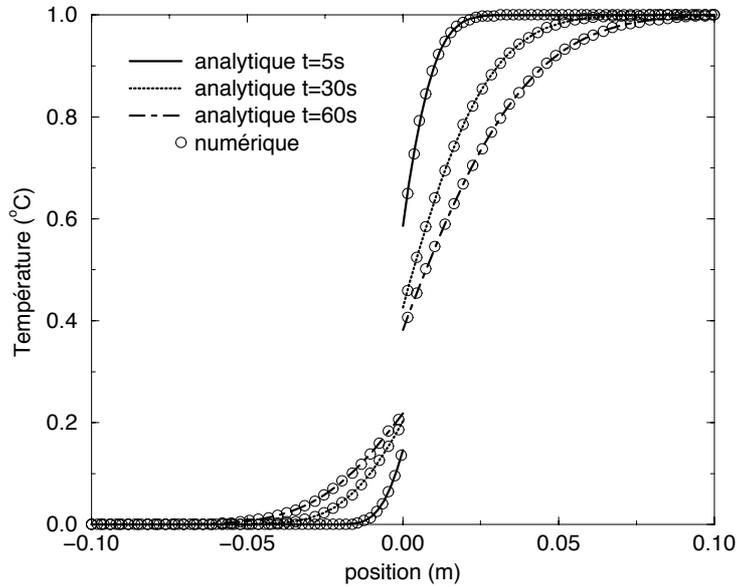


Figure 4.1 : Évolution des températures -  $\rho_1 = 2000$ ,  $C_{p1} = 2000$ ,  $k_1 = 20$ ,  $\rho_2 = 1000$ ,  $C_{p2} = 1000$ ,  $k_2 = 10$ ,  $RTC = 1.10^{-3}$  (unités S.I.)

## 4.2 Mécanique

L'apparition de lames d'air conduit à la nécessité de gérer les problèmes engendrés par le fait que le polymère peut être localement en contact avec le moule ou décollé de celui-ci. De plus, lors de l'histoire du refroidissement de la pièce, des phases de décollement et de recollement successifs peuvent se produire et doivent donc être gérés de façon automatique par le code.

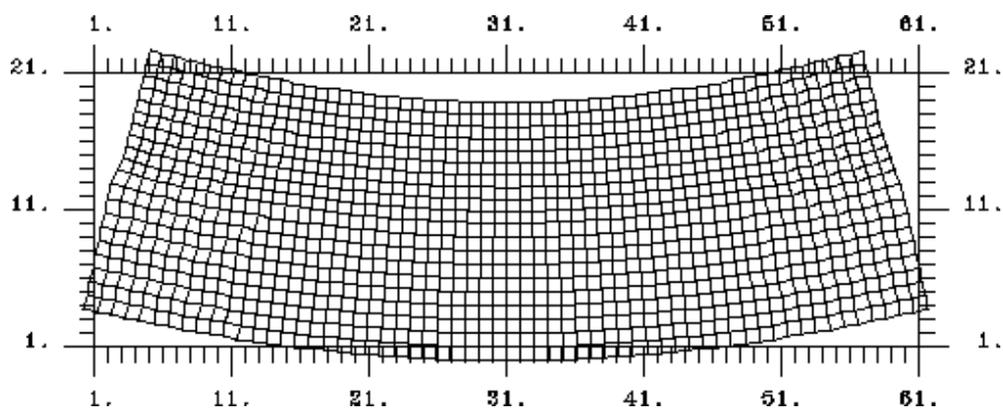
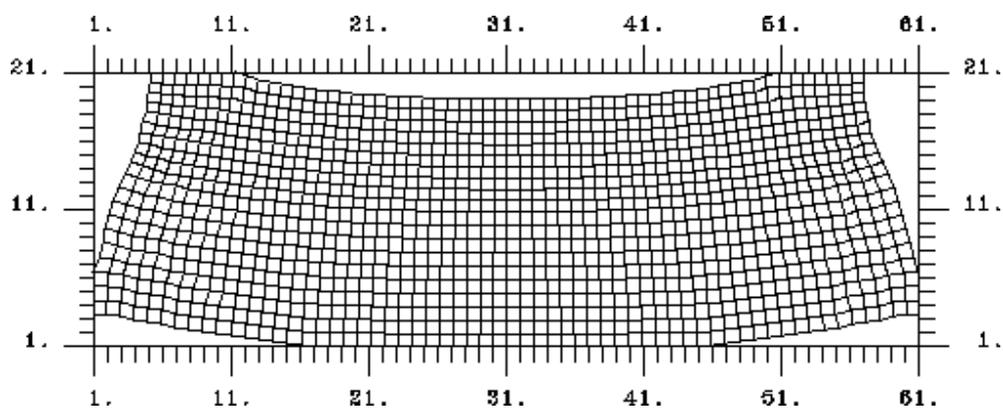
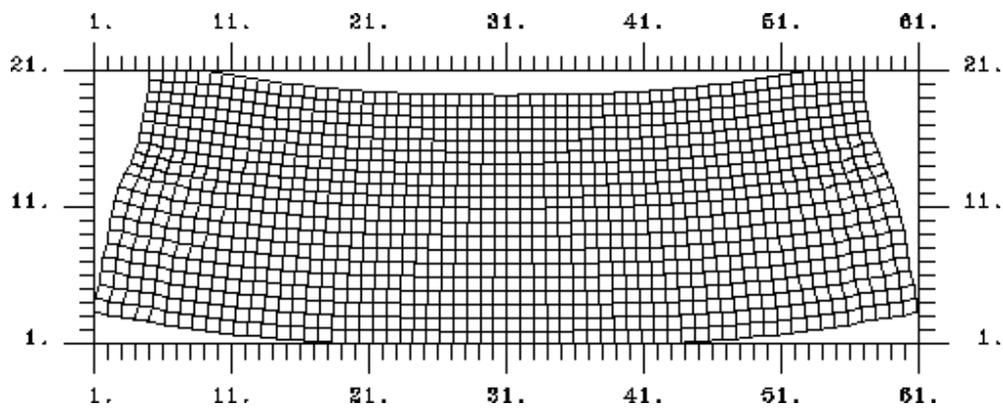
Nous présentons dans l'exemple suivant la méthode utilisée pour prendre en compte le contact. On suppose un bilame enfermé dans une boîte telle qu'à l'instant initial les parois de cette boîte soient en contact avec toutes les faces du bilame. Le matériau constituant sa partie supérieure est un solide de coefficient de dilatation thermique  $\alpha_0$ , tandis que sa partie inférieure a un coefficient de dilatation thermique nul.

Le bilame est tout d'abord uniformément refroidi. Sa partie supérieure va alors se contracter sous l'effet de l'abaissement de température, déformant ainsi l'ensemble du solide qui prend une forme cintrée typique.

Du fait de la contraction de sa partie supérieure, le solide va diminuer de taille et va donc décoller des parois de sa boîte. Le problème est de connaître la géométrie qu'il va adopter.

Lors de la première étape, on suppose que les parois sont « perméables ». Le bilame prend alors son état déformé naturel. Les points qui apparaissent hors de la boîte sont marqués et de nouvelles conditions aux limites (déplacement nul) sont appliquées aux mailles correspondantes (figure 4.2). Un nouveau calcul est effectué qui conduit à l'étape 2 (figure 4.3). Il convient alors de tester l'état de contraintes sur les mailles « collées ». En effet, lors de la deuxième phase du calcul peuvent y être générées des contraintes de traction indiquant un décollement du polymère de la paroi du moule. Il faut alors « relâcher » ces zones de tension (étape 3) (figure 4.4). Cette opération de collement-décollement se poursuit jusqu'à satisfaction des conditions aux limites exactes.

Cette validation qualitative permet de simuler les phénomènes de collement et décollement d'un solide dans une boîte. Le cas de la pièce dans le moule est plus complexe, mais les phénomènes décrits ici ont également été observés lors des simulations de refroidissement, et ont permis d'obtenir de bons résultats.

Figure 4.2 : *Étape 1*Figure 4.3 : *Étape 2*Figure 4.4 : *Étape 3*

## 4.3 Couplage thermomécanique

### 4.3.1 Décollement de deux matériaux

On considère dans cet exemple une pièce polymère chaude d'épaisseur 2 mm initialement accolée à un moule indéformable froid. Le refroidissement du polymère va provoquer sa contraction (figure 4.5). La figure 4.6 montre la déformée (amplifiée) obtenue ; on remarque la présence de la maille d'air très déformée à l'interface. Les paramètres physiques utilisés sont les suivants :

- pour le polymère  $T_0=240\text{C}$ ,  $\rho=1100 \text{ kg.m}^{-3}$ ,  $C_p=2000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ,  $k= 0,2 \text{ W.m}^{-1}$ ,  $\alpha=2 \cdot 10^{-4}\text{K}^{-1}$ .
- pour le moule  $T_0=7\text{C}$ ,  $\rho C_p \rightarrow \infty$ . Cette dernière valeur lui permet de conserver une température constante.

La figure 4.7 montre l'évolution temporelle du retrait de la pièce polymère. La ligne pointillée montre l'épaisseur finale théorique de ce retrait une fois que le système a atteint une température uniforme froide. On note une bonne correspondance entre les valeurs théorique et calculée.

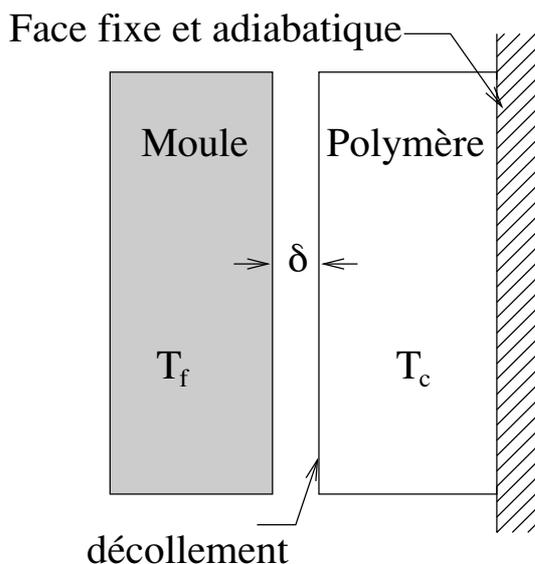


Figure 4.5 : Schéma du problème

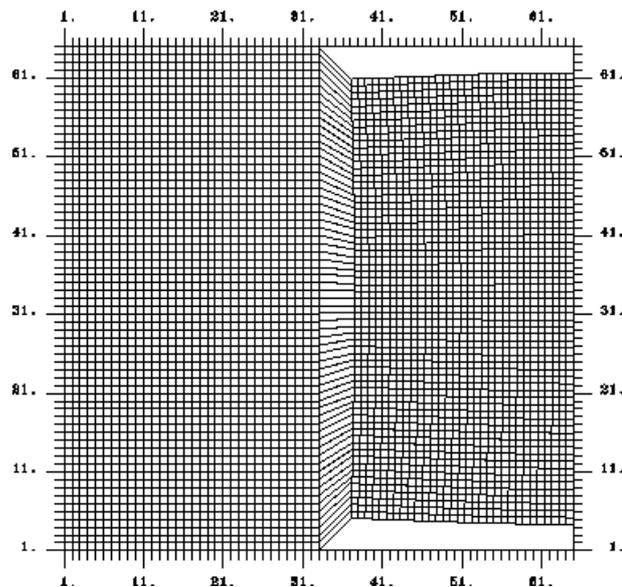


Figure 4.6 : Déformée

La figure 4.8 représente l'évolution de la température au cœur du polymère ainsi qu'à l'interface (en fait le nœud de calcul est situé à une demi-maille de l'interface). On remarque que cette courbe présente une inflexion aux premiers instants du calcul. En effet, dès la mise en contact des deux matériaux, la température d'interface devient instantanément égale à la température du moule – dont l'effusivité est infinie – et la chaleur du polymère est évacuée très rapidement. La lame d'air qui s'intercale alors diminue la conductivité thermique au niveau de l'interface et isole la pièce. Dès lors, sa température va avoir tendance à s'homogénéiser plus vite qu'elle ne peut céder sa chaleur au moule.

Sur cette même figure, le cas où la résistance thermique due à la lame d'air est nulle est également présenté. On suppose dans ce cas que les deux matériaux (moule et polymère) ont un coefficient de dilatation thermique nul. Le contact reste alors parfait au cours du temps et le problème mécanique devient trivial (tous les déplacements sont nuls).

On note l'effet de ralentissement du refroidissement provoqué par la présence de la lame d'air.

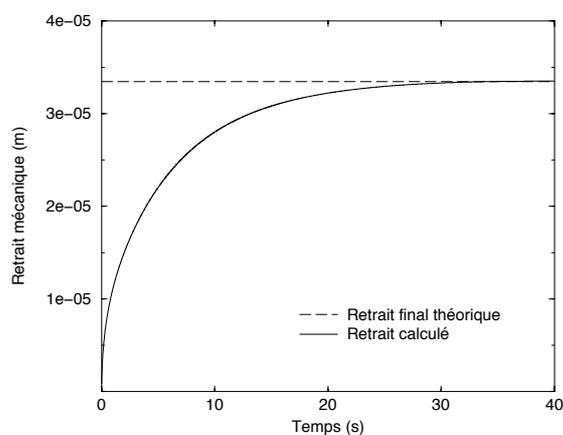


Figure 4.7 : Épaisseur de la lame d'air

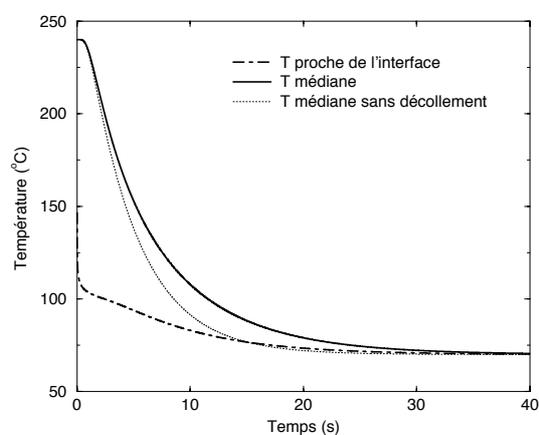


Figure 4.8 : Évolution des températures

### 4.3.2 Accolement de deux matériaux

C'est le corollaire de l'exemple précédent mais il fait intervenir une technique de gestion de lame d'air plus évoluée, puisqu'elle n'apparaît que lorsque la contrainte de compression s'annule. On est ici en présence d'un barreau de longueur  $L$  dont la partie droite est

encastrée tandis que l'extrémité gauche est située à une distance  $l$  d'un mur indéformable. L'essai consiste à chauffer le solide de diffusivité thermique  $a$  en imposant à son extrémité encastrée une température constante  $T_0$ . Les faces opposée et latérales sont supposées adiabatiques. La solution analytique du champ de température est donnée classiquement par (4.2) [Carslaw 56]:

$$T(x, t) = T_0 \left[ 1 + 4 \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{(-1)^{n+1}}{(2n+1)\pi} e^{-\frac{a(2n+1)^2 \pi^2 t}{4L^2}} \cos \left( \frac{(2n+1)\pi x}{2L} \right) \right) \right] \quad (4.2)$$

Durant une première phase, les contraintes restent nulles tandis que le barreau se dilate, le déplacement est donné par (4.3) :

$$\delta(t) = \alpha \int_0^L T(x, t) dx \quad (4.3)$$

À partir du moment où le contact se produit, le déplacement n'évolue plus, mais une contrainte de compression dont l'amplitude est proportionnelle au module d'Young  $E$  (4.4) est générée.

$$\sigma(t) = E [\delta(t) - l] \quad (4.4)$$

Ce cas test montre la capacité du code à prendre en compte le phénomène de collement de la pièce sur une paroi. On note en effet sur les figures 4.9 et 4.10 une excellente correspondance entre la théorie et le calcul, y compris à l'instant où le contact se produit. Cet instant est détecté automatiquement par le code qui ajuste les conditions aux limites mécaniques pour faire face à la situation.

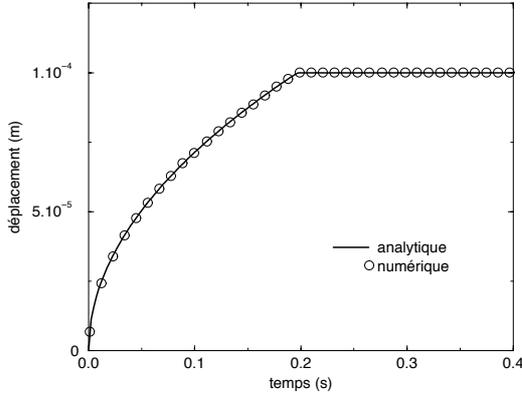


Figure 4.9 : Évolution du déplacement

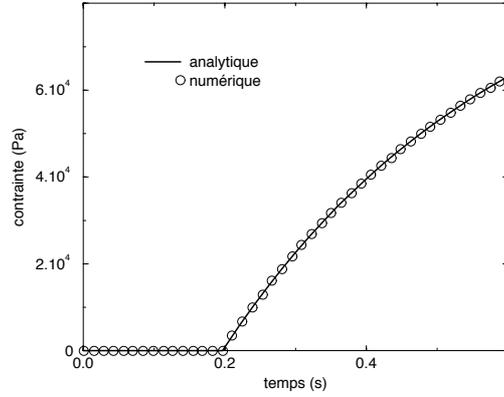


Figure 4.10 : Évolution de la contrainte

## 4.4 Contraintes résiduelles

L'apparition de contraintes résiduelles dans un polymère en solidification est à l'origine de nombreux défauts de fabrications (pièces tordues ou même cassées, opacification de matériaux transparents...). Il est donc important de pouvoir modéliser ces contraintes résiduelles.

Nous utilisons comme solution de référence la formulation proposée par [Edujee 89]. C'est un modèle utilisant un matériau *thermoélastique* basé sur une approche discrète en temps comme en espace. D'autres études utilisent un modèle de ce type pour calculer les contraintes résiduelles, citons par exemple [Boitout 95] et [Isayev 87].

Le matériau est divisé en  $n$  couches dans l'épaisseur de l'échantillon. Chacune de ces couches possède une température ainsi que des propriétés mécaniques *constants*.

Au pas de temps  $t$  et dans la couche  $i$ , on écrit la contrainte créée par le passage du pas de temps  $t - 1$  à  $t$  (4.5) :

$$\Delta\sigma_i = \frac{E_i}{1 - \nu} \left[ \frac{\sum_{i=1}^n E_i \alpha_i \Delta T_i}{\sum_{i=1}^n E_i} - \alpha_i \Delta T_i \right] \quad (4.5)$$

avec  $\Delta T_i = (T_i)_t - (T_i)_{t-1}$  où  $(T_i)_t$  est la température de la couche  $i$  au pas de temps  $t$ .

La contrainte résiduelle totale de la couche  $i$  est donnée par (4.6) :

$$\sigma_i(t) = \sum_{t=0}^t \Delta \sigma_i \quad (4.6)$$

La contrainte résiduelle après refroidissement est obtenue pour  $t \rightarrow \infty$ . En pratique nous nous assurons que les disparités de température au sein de la pièce en fin de calcul n'excèdent pas  $1\text{C}$ .

Les caractéristiques mécaniques du matériau utilisé pour cette validation sont tirées de [Edujee 89]. Le module d'Young et le coefficient de dilatation thermique linéaire sont constants dans chaque phase :

$$\begin{aligned} E &= 2,6.10^9 Pa \text{ pour } T < T_g \\ &= 10^2 Pa \text{ pour } T \geq T_g \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha &= 2,6.10^{-4} K^{-1} \text{ pour } T < T_g \\ &= 1,85.10^{-4} K^{-1} \text{ pour } T \geq T_g \end{aligned}$$

avec  $T_g = 140\text{C}$ .

Les caractéristiques thermiques ainsi que le coefficient de Poisson sont pour leur part constants sur toute la plage de températures :

$$\rho = 1260 \text{ kg.m}^{-3}, k = 0,5 \text{ W.K}^{-1}.\text{m}^{-1}, C_p = 2000 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}, \nu = 0,3.$$

L'essai consiste à refroidir symétriquement une plaque d'épaisseur 2 mm de température uniforme égale à  $340\text{C}$  jusqu'à une température de  $23\text{C}$ . Lors du refroidissement, la température de la pièce passe par la température de transition vitreuse du matériau ce qui permet de piéger des contraintes résiduelles. Le coefficient d'échange imposé sur les parois vaut  $h=1,5 \text{ W.m}^{-2}$ .

La résolution de l'équation (4.5) nécessite une discrétisation des caractéristiques physiques ainsi que de la température. Le code du laboratoire a fait l'objet de validations

qui ont montré sa précision pour le calcul des champs de température, c'est pourquoi nous utiliserons ses résultats pour la détermination des  $T_i$  nécessaire à la fois au modèle théorique et au code de calcul (figure 4.11).

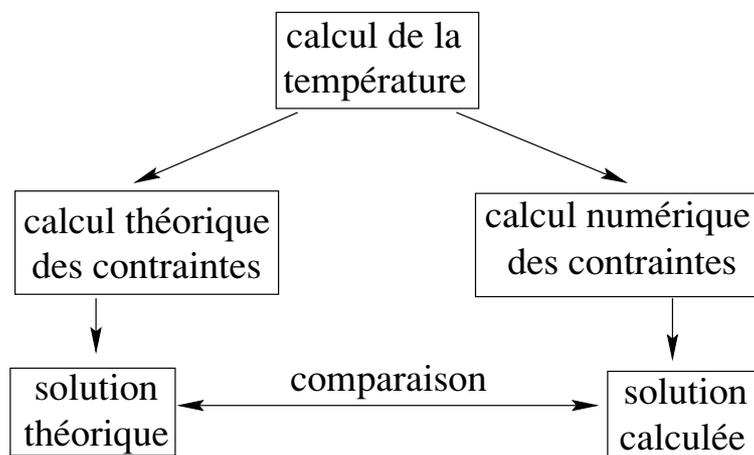


Figure 4.11 : *Mode opératoire*

Les résultats sont montrés sur la figure 4.12. Les solutions données par le modèle et le code sont placés respectivement sur les parties gauche et droite de la figure. On note une excellent correspondance entre les deux solutions. Il faut toutefois rappeler que les modèles physiques utilisés dans le code et pour la solution analytique sont exactement les mêmes.

## 4.5 Aspect rhéologique

L'écoulement du polymère dans le moule est la phase du procédé de moulage par injection qui lui donne son nom, et elle a une importance déterminante quant à la qualité finale de la pièce. De nombreux défauts de fabrication peuvent avoir pour origine un mauvais remplissage [Agassant 97].

Les polymères sont des matériaux dont la rhéologie est complexe. Une simulation du remplissage de la cavité moulante ne peut donner de bons résultats qu'avec une prise en compte de cette caractéristique des polymères.

Par ailleurs, la viscosité importante de ces matériaux associée à leur mauvaise conduction de la chaleur rend le phénomène d'échauffement par dissipation visqueuse non négli-

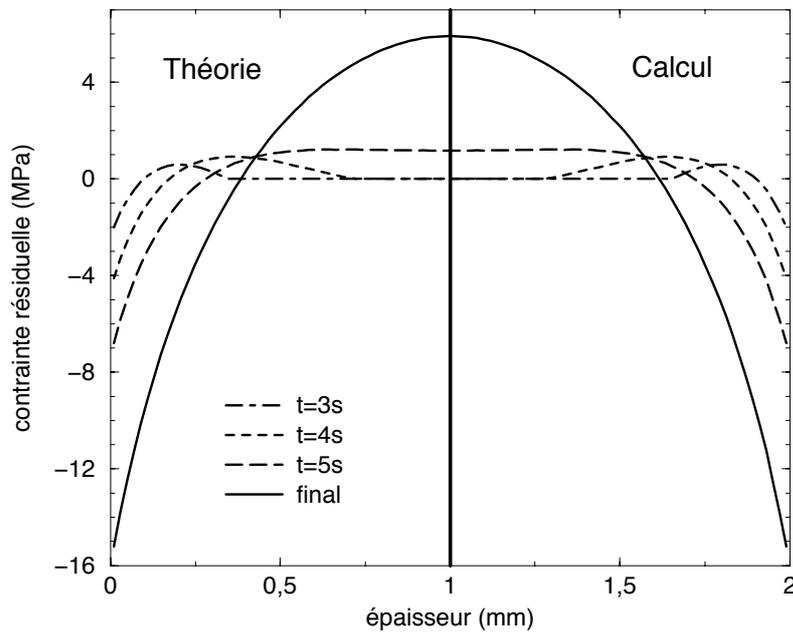


Figure 4.12 : Contraintes résiduelles. Comparaison modèle-calcul

geable. Il est ainsi possible de brûler le polymère lors de l'injection dans les zones de fort cisaillement.

Enfin, il est important de prendre en compte le phénomène de mouillabilité du fluide sur les parois du moule. Les problèmes numériques classiques rencontrés dans ce type d'écoulement conduisent en effet à la présence d'une lame d'air entre le fluide et le moule, et donc à une résistance thermique.

#### 4.5.1 Écoulement de Poiseuille pseudoplastique

La section 2.6.1 présente les différents types de fluides rencontrés couramment, ainsi que les lois qui permettent de modéliser leur comportement. Du fait de la complexité de ces lois, il n'existe que peu de solutions analytiques à ces problèmes d'écoulements. Nous utiliserons dans ce cas de validation la loi rhéologique la plus simple (la loi puissance) dans un écoulement de Poiseuille bidimensionnel. La solution analytique à ce problème existe, et est développée dans l'annexe B. La présentation de ce cas test nous permettra

de mettre en évidence les particularités des fluides pseudoplastiques.

Nous faisons varier l'indice de pseudoplasticité  $n$  de  $n = 1$  (écoulement Newtonien) à  $n = 0$ , ce qui correspond à un écoulement « bouchon ». On observe une diminution de la vitesse maximale de l'écoulement ainsi qu'un « aplatissement » du profil des vitesses. Une excellente corespondance est observée entre les profils théoriques et expérimentaux (figure 4.13).

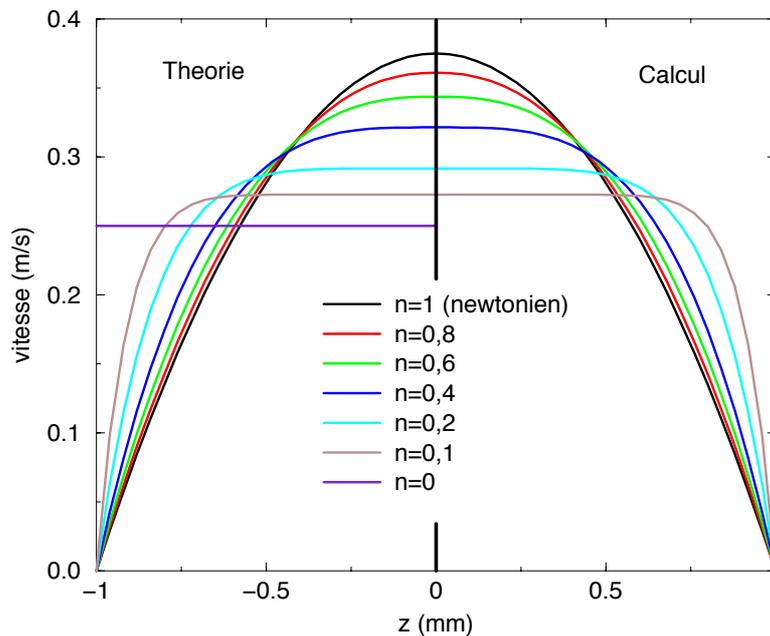


Figure 4.13 : Évolution du profil de vitesse en fonction de l'indice de pseudoplasticité

Ces résultats sont présentés à *débit constant* (et donc à vitesse moyenne constante) quelque soit l'indice de pseudoplasticité. En effet, comme le montre la figure 4.14, la perte de charge varie très fortement avec l'indice de pseudoplasticité et une injection à une pression donnée va entraîner des vitesses extrêmement disparates. C'est une propriété intéressante des polymères : pour une pression d'injection imposée par la vis d'extrusion, le débit d'entrée sera d'autant plus important (et le moule d'autant plus vite rempli) que l'indice de pseudoplasticité sera faible.

On peut également s'intéresser à la valeur de la viscosité en fonction de l'indice de pseudoplasticité. Plus ce dernier est faible, moins la viscosité du fluide cisailé (près de

la paroi) est faible. De plus cette faible viscosité près des parois entraîne une diminution du gradient des vitesses et donc une augmentation de la viscosité dans la partie centrale de l'écoulement. Nous avons donc affaire à un phénomène couplé gradient de vitesses – viscosité, le couplage étant d'autant plus marqué que l'indice de pseudoplasticité est faible.

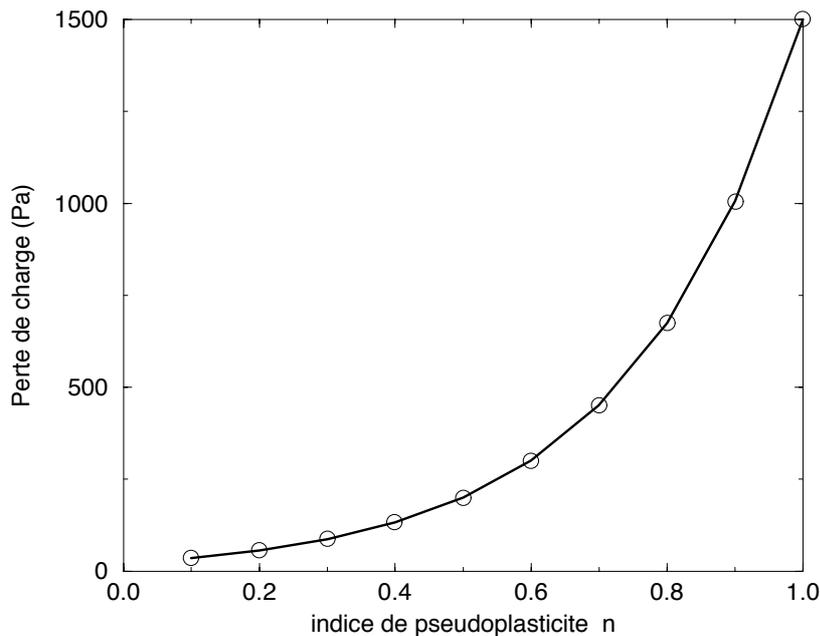


Figure 4.14 : *Évolution de la perte de charge en fonction de l'indice de pseudoplasticité*

Du point de vue numérique, la résolution est donc délicate, comme le montre la table 4.1. Il est nécessaire d'utiliser des maillages de plus en plus fins au fur et à mesure de la baisse de l'indice de pseudoplasticité pour obtenir une bonne convergence du calcul.

### 4.5.2 Remplissage du moule

Ce cas test consiste à injecter, à la vitesse de  $1 \text{ cm.s}^{-1}$ , un polymère dans un domaine initialement plein d'air. Un profil plat est imposé en entrée et la sortie est libre. Une température de  $200^\circ\text{C}$  est appliquée sur les parois, l'air et le polymère sont initialement à

Tableau 4.1 : Comparaison des erreurs numériques sur la vitesse maximale en fonction du maillage et de l'indice de pseudoplasticité

	Théorie	32 <sup>2</sup>	64 <sup>2</sup>	128 <sup>2</sup>	256 <sup>2</sup>	512 <sup>2</sup>
1	0,37500	< 0,01% <sup>a</sup>				
0,8	0,36111	0,29%	0,07%	< 0,01%		
0,6	0,34375	0,33%	0,08%	0,02%	< 0,01%	
0,4	0,32143	0,68%	0,16%	0,04%	< 0,01%	
0,2	0,29167	4,1%	0,58%	0,18%	0,04%	< 0,01%
0,1	0,27273	20%	5,4%	1,4%	0,49%	< 0,01% <sup>b</sup>

<sup>a</sup> En fait la solution est exacte à l'erreur machine près, la méthode des volumes finis donnant des résultats exacts pour les solutions d'ordre deux (en l'occurrence ici une parabole).

<sup>b</sup> La convergence de ce calcul a nécessité un ajustement précis des paramètres de convergence du lagrangien augmenté ainsi qu'un temps de calcul important (30 heures CPU sur une station HP 9000!).

température nulle<sup>1</sup>.

Les dimensions du domaine de calcul sont de 13 cm de long sur 2 cm de large, le maillage est de 128 × 128 et la technique utilisée pour le diphasique est la méthode VOF.

On observe sur la figure 4.15 l'allure du front de matière avec et sans mouillabilité. On note une erreur manifeste, dans le cas non mouillé, due à la vitesse nulle imposée par la présence de la paroi paroi sur les mailles qui contiennent les frontières du domaine de calcul. La fonction de couleur  $C$  qui indique les différentes phases ne peut donc pas être advectée dans ces mailles ce qui conduit à un résultat manifestement erroné.

Nous prenons en compte le phénomène de mouillabilité en remplissant artificiellement toute maille jouxtant la paroi dès que la fonction couleur  $y$  atteint 0,3. Une valeur plus forte de ce seuil provoque un profil plus plat tandis qu'une valeur plus faible piège des bulles d'air contre la paroi. Cette technique sommaire permet d'éviter l'artefact numérique sans toutefois prétendre modéliser correctement ce phénomène physique par ailleurs très complexe à prendre en compte.

1. Dans ce cas test, les propriétés physiques du polymère sont supposées indépendantes de la température.

La figure 4.16 montre un zoom sur le front de matière. On y voit que l'indétermination de la position de l'interface est limitée à une seule maille. De plus l'effet de la mouillabilité sur la paroi est mis en évidence.

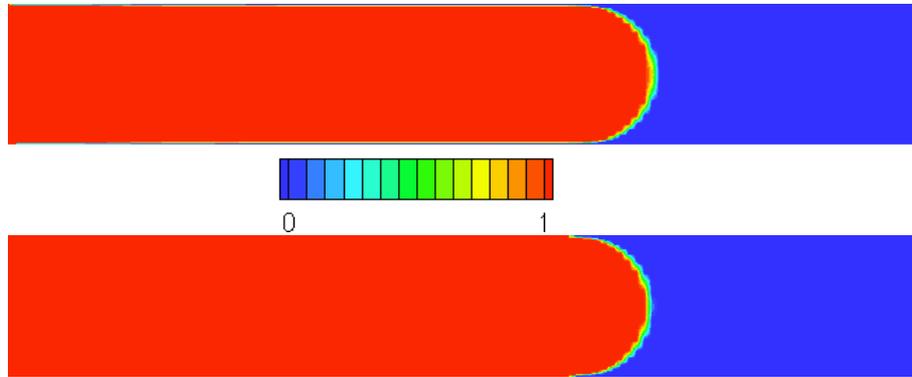


Figure 4.15 : *Fonction couleur avec et sans mouillabilité*

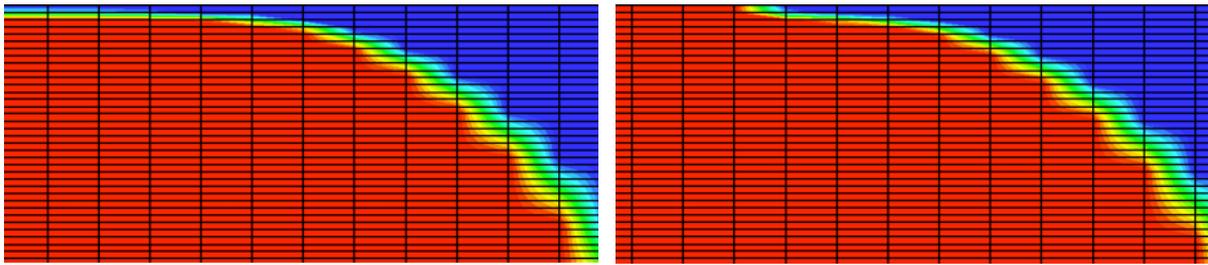
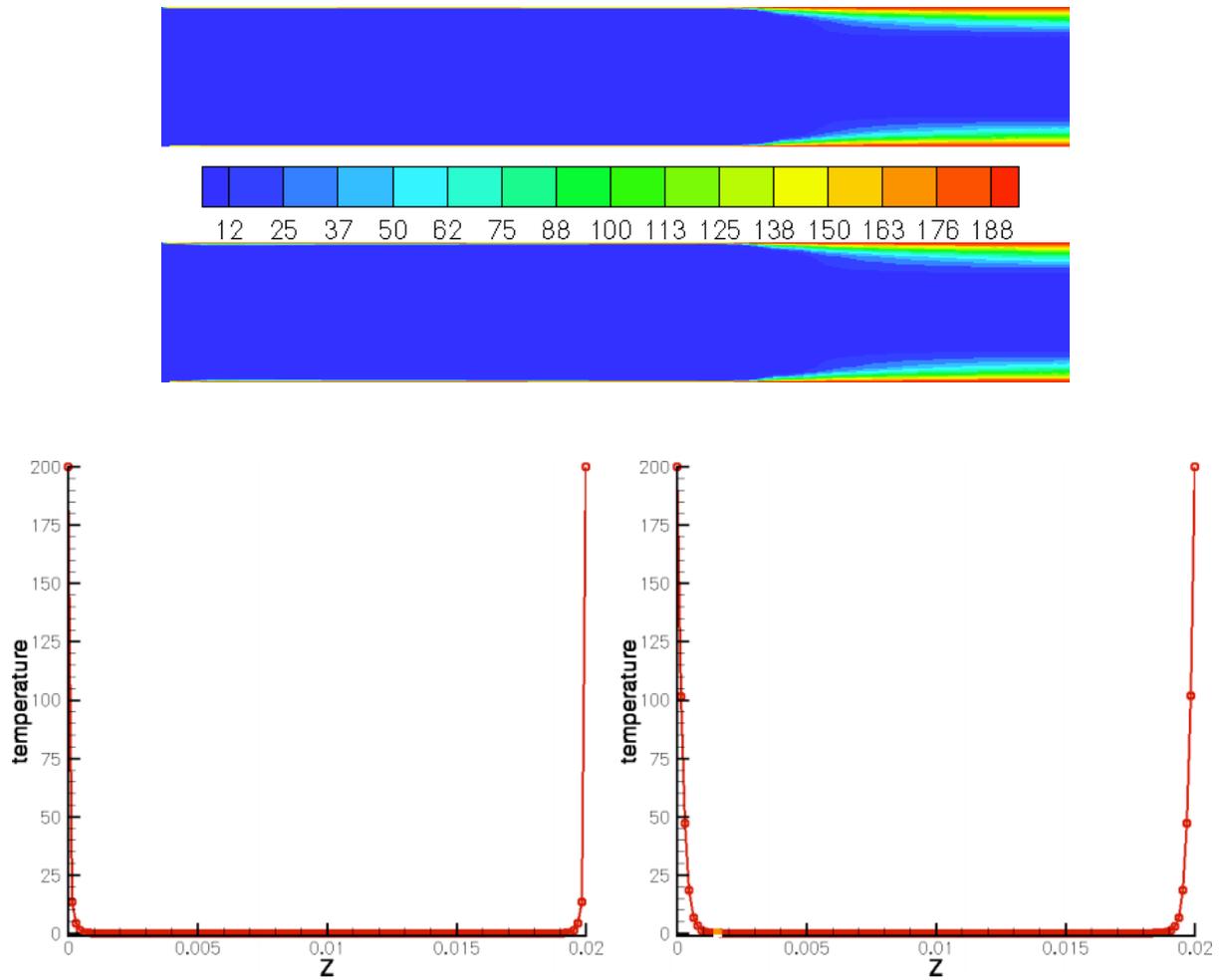
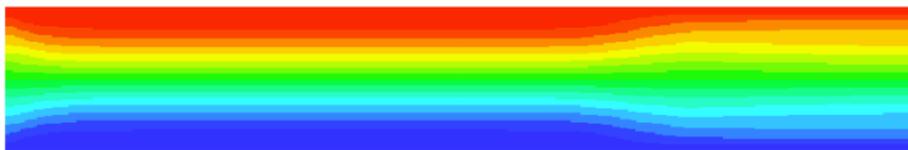


Figure 4.16 : *Zoom sur le front de matière*

La figure 4.17 montre le champ de température avec et sans prise en compte de la mouillabilité. On pourrait s'attendre à une différence importante du fait de la disparition d'une lame d'air isolante entre la paroi chauffée et le polymère froid. Cependant la faible conductivité thermique du polymère empêche une bonne propagation de la chaleur et les différences entre les deux résultats sont minimales (les coupes sont effectuées à l'endroit où la différence est la plus marquée). On remarque par ailleurs que l'air chauffé par les parois est poussé vers l'extérieur par le polymère.

Les lignes de courant (avec mouillabilité) sont présentées sur la figure 4.18. On y observe une constriction à l'entrée due au passage du profil plat imposé au profil parabolique calculé. Au niveau du front de matière, les lignes de courant s'écartent, traduisant la présence de l'effet fontaine bien connu.

Ce même calcul a été également fait avec un fluide non newtonien (loi puissance avec

Figure 4.17 : *Températures avec et sans mouillabilité*Figure 4.18 : *Lignes de courant*

un indice de pseudoplasticité de 0,85). Les résultats restent semblables à ceux obtenus avec un fluide newtonien, mis à part l'aplatissement du profil des vitesses déjà mis en évidence dans la section 4.5. Ils ne sont donc pas présentés ici.

Si l'on s'intéresse au champ de température à la fin du remplissage, il est nécessaire de prendre en compte la production de chaleur due à la dissipation visqueuse dans le polymère. Dans l'exemple suivant, la pièce à injecter fait 6 cm de long sur 3 mm d'épaisseur. L'injection se fait à la vitesse de  $1 \text{ cm.s}^{-1}$  au travers d'un seuil large de 2 mm. Le maillage utilisé est de  $128 \times 64$ .

Le fluide est un polymère obéissant à la loi puissance ( $n = 0,85$ ), de viscosité au repos  $\mu = 100 \text{ Pa.s}$  et de température initiale égale à  $240^\circ\text{C}$ . Les parois du moule sont à une température fixée de  $40^\circ\text{C}$ .

La figure 4.19 montre respectivement les champs de couleur, vitesse horizontale, viscosité, température et température sans prise en compte du terme de production.

L'allure du champ de couleur est identique à celle rencontrée dans l'exemple précédent.

On observe sur le champ de vitesse le rétrécissement dû au seuil d'injection qui laisse une zone « morte » dans les coins gauches du domaine. Le champ de couleur nous montre toutefois que la prise en compte de la mouillabilité permet de remplir cette partie de l'empreinte.

La cartographie de la viscosité est bien sûr très liée aux zones de cisaillement. Elle est forte dans les zones de faible cisaillement et inversement. La viscosité minimale (outre dans l'air) est donc située sur les bords du seuil d'injection. De plus, du fait de l'aplatissement du profil des vitesses dans la zone centrale de l'écoulement dû au caractère pseudoplastique du fluide, la viscosité y reste forte.

La température dans le cas avec prise en compte de la dissipation visqueuse montre une sur-température à l'entrée. La température monte à  $338^\circ\text{C}$  alors que le polymère est injecté à  $240^\circ\text{C}$ . Il est intéressant de noter que les coins à gauche du domaine sont chaud malgré un cisaillement faible. Cette zone où le polymère est quasi-immobile semble en fait être chauffée par conduction tout au long de l'injection.

On note également que près du front de matière la température au cœur du polymère est plus chaude au moment de l'observation que sur les bords. Il y a là une compétition

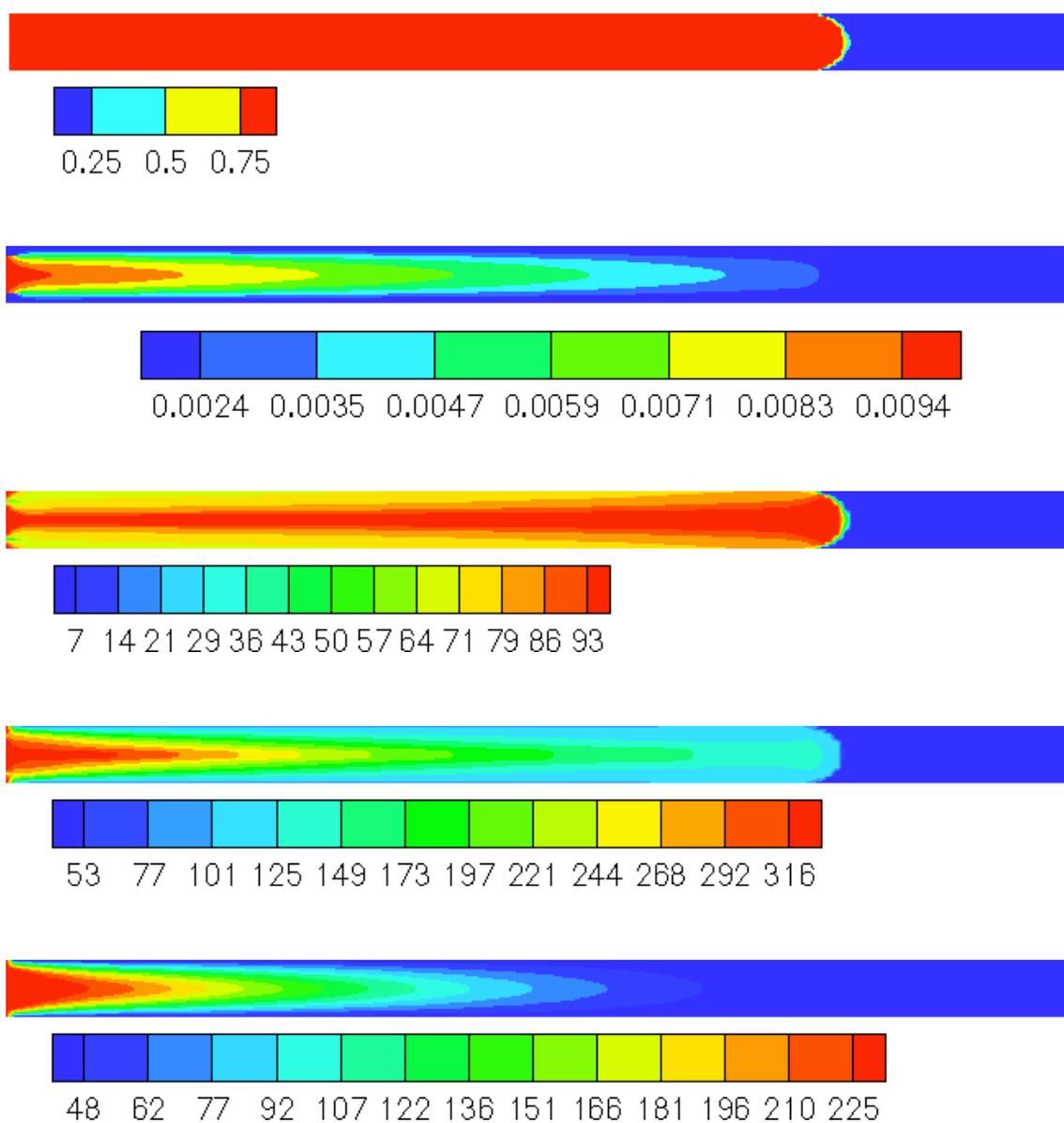


Figure 4.19 : *Champs de couleur, vitesse horizontale, viscosité, température avec et sans dissipation visqueuse*

entre deux phénomènes. D'une part la zone centrale, qui a été fortement chauffée à l'entrée, refroidit par conduction du fait du faible cisaillement qui ne génère plus de chaleur. D'autre part, la zone proche des parois qui était plus froide que le cœur s'échauffe du fait du gradient de vitesse qui existe près des parois.

La température sans prise en compte de la dissipation visqueuse est nettement plus basse. On note donc l'influence capitale de la dissipation visqueuse, qui modifie la viscosité du fluide et surtout augmente considérablement la température. Une fois le moule rempli, cette différence de température est toujours très marquée (figure 4.20).

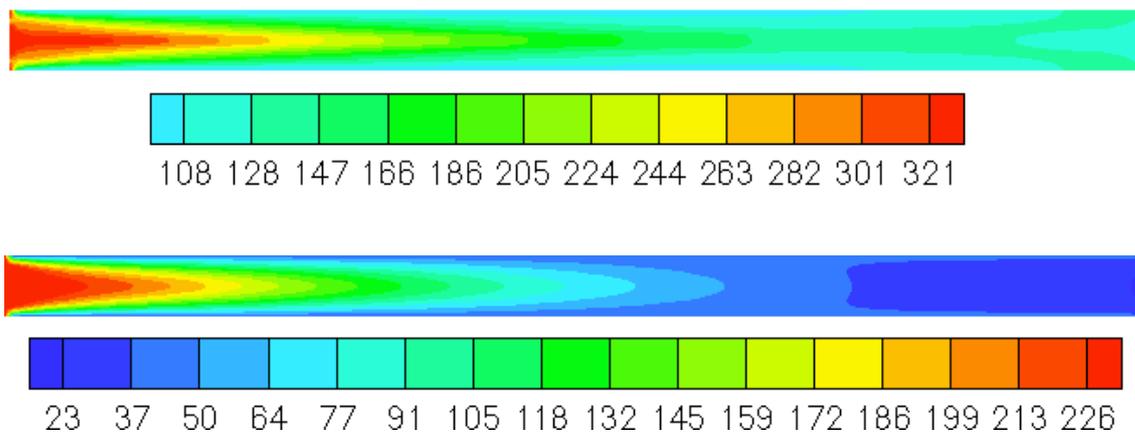


Figure 4.20 : *Champs de températures finaux avec et sans dissipation visqueuse*

## 4.6 Conclusion

Nous présentons dans ce chapitre les validations effectuées sur notre code de calcul. Les validations purement mécaniques (traction pure, cisaillement simple,...) donnent des résultats exacts à la précision machine près et ont été omises. De plus, le code de calcul du laboratoire (Aquilon) a été validé par ailleurs et nous présentons donc ici les parties que nous avons développées.

Notre technique de prise en compte des résistances thermiques de contact s'est révélée très efficace, qu'il y ait ou non une lame d'air à l'interface.

Les comparaisons entre les contraintes résiduelles obtenues par notre code de calcul et

celles issues d'un modèle élastique sont très bonnes. Il est vrai que la physique présente dans le modèle – qui donne par ailleurs de bons résultats – est exactement la même que celle implantée dans le code.

Les modèles de rhéologie des fluides utilisés donnent également de bons résultats. Nous avons également programmé les modèles de Carreau, Bingham, Hershel-Bulkley et Cross, qui n'ont pas été utilisés par manque de solution analytique disponible. Cependant, une comparaison entre ces modèles est en cours au laboratoire dans le cadre d'un DEA.

Finalement, notre technique très simple de prise en compte de la mouillabilité du fluide sur les parois donne des résultats acceptables, et permet surtout d'éviter les erreurs importantes qui résulteraient de l'omission de ce phénomène.

# Chapitre 5

## Application au moulage par injection

### 5.1 Descriptif de l'expérience

La simulation numérique est un outil extrêmement puissant et souple puisqu'il permet d'appliquer les modèles physiques choisis à des configurations variées et ce dans de nombreuses conditions opératoires différentes. Une première phase de validations présentée dans le chapitre 4 a permis de vérifier le bon fonctionnement et la précision du traitement numérique des modèles physiques et d'affiner les paramètres numériques de convergence.

Cependant, si le code est capable de reproduire la physique que l'on a souhaité y mettre, cette physique – avec ses hypothèses et ses simplifications – est-elle capable de représenter la réalité des phénomènes qui se produisent lors du moulage par injection d'une pièce polymère?

Seule une campagne expérimentale sur presse peut fournir des éléments de réponse. Notre collaboration active avec le laboratoire de Thermocinétique de l'École Polytechnique Universitaire de Nantes nous a permis de tirer parti du savoir faire du laboratoire pour mener à bien ces expériences et nous fournir des données variées. Car si les mesures « classiques » de flux de chaleur et de pression sont indispensables, un plus indéniable est apporté par les mesures de températures, RTC et même épaisseur des lames d'air ou encore profil initial du champ de température.

Des expériences ont donc été menées sur les deux empreintes disponibles et dans des conditions opératoires différentes afin d'obtenir des cas de figures variés. L'empreinte de

3 mm sera tout d'abord utilisée pour un cas « classique » de moulage (forte pression d'injection, températures du moule symétriques). Nous utiliserons ensuite l'empreinte de 2 mm pour un essai destiné à identifier des phénomènes particuliers qui sont observés fréquemment, comme le mouvement de la pièce dans le moule. Pour cela, les conditions opératoires seront particulières (faible pression d'injection, forte dissymétrie des températures du moule). Le matériau utilisé dans toutes ces expériences est de l'ABS caractérisé précisément au laboratoire (cf. section 2.4).

### 5.1.1 Moules

Le premier moule est le moule d'éprouvette (figure 5.1). Il est constitué de deux parties : sur la partie gauche de la pièce (sur la figure), on distingue les deux éprouvettes qui ne sont pas utilisées pour notre étude. La plaque est située à droite de la pièce ; les mesures sont effectuées dans cette zone, celle-ci étant suffisamment grande (120 mm × 140 mm) et d'épaisseur constante égale à 2 mm.

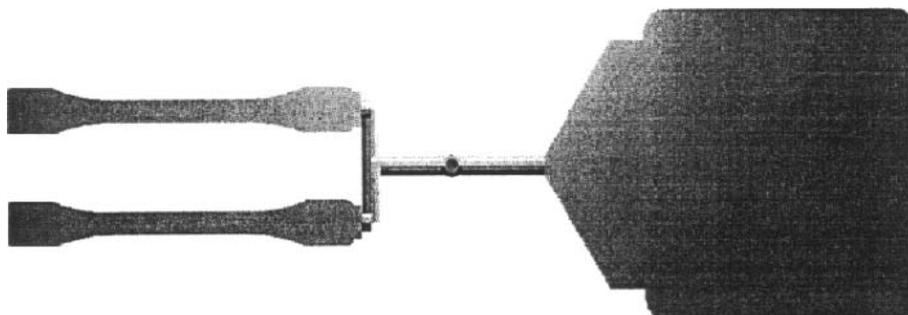


Figure 5.1 : *Plaque de 2 mm – [Quilliet 98]*

Le second moule est quand à lui composé de deux empreintes indépendantes, d'épaisseurs respectivement de 1 mm et 3 mm. Un bloc amovible pivotant autour de l'axe  $z$  permet d'alimenter l'une ou l'autre des deux empreintes (figure 5.2). Nous utiliserons ici uniquement l'empreinte de 3 mm, de dimensions 60 mm × 62 mm.

### 5.1.2 Systèmes d'alimentation

Le remplissage du premier moule a été simulé grâce au logiciel commercial Modflow. Le matériau utilisé pour cette simulation est un polypropylène dont les propriétés sont issues

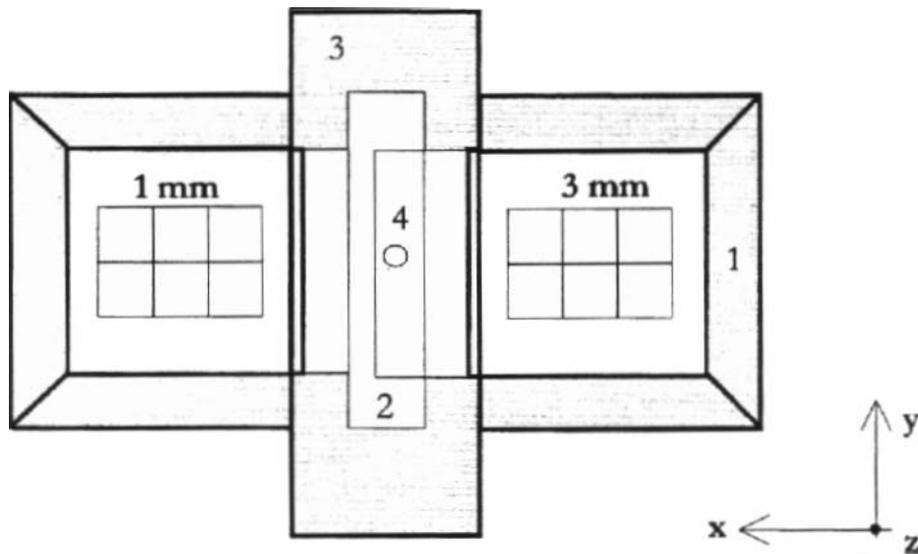


Figure 5.2 : Moule de 3 mm – [Quilliet 98]

de la base de données du logiciel. La figure 5.3 montre l'évolution du front de matière en fonction du temps. Il apparaît que ce front n'est pas parfaitement plan, en particulier à proximité du seuil d'injection.

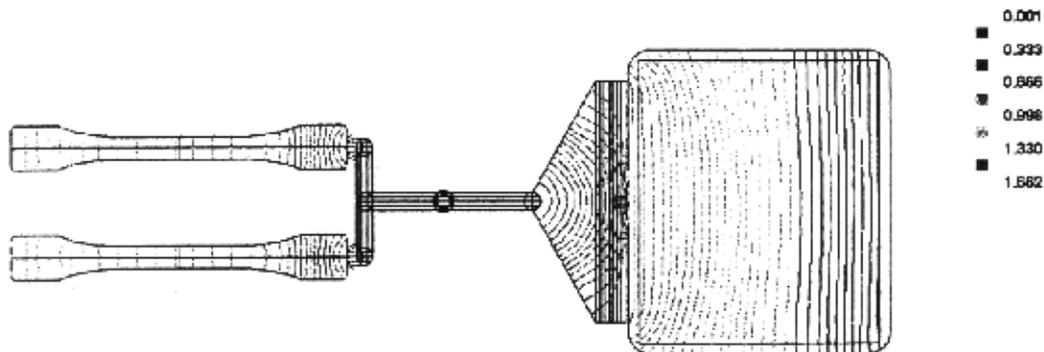


Figure 5.3 : Avancée du front de matière – [Quilliet 98]

Ceci est dû au fait que les distances d'écoulement sont différentes selon la position par rapport à la carotte d'injection. C'est pourquoi il a été imaginé pour le deuxième moule une nappe d'injection tridimensionnelle conçue de telle façon que la distance carotte – seuil soit la même sur toute la largeur du seuil d'injection.

Le LTVP de l'ENSAM a proposé la modélisation de cette géométrie par l'équation suivante :

$$f(x) = \frac{h}{2} \left( 1 + \cos \frac{\pi}{a} x \right) \quad (5.1)$$

On obtient alors un faisceau de paraboles qui définissent le profil de la nappe d'alimentation (figures 5.4 et 5.5). Cette pièce a été usinée par la société LEGRAND.

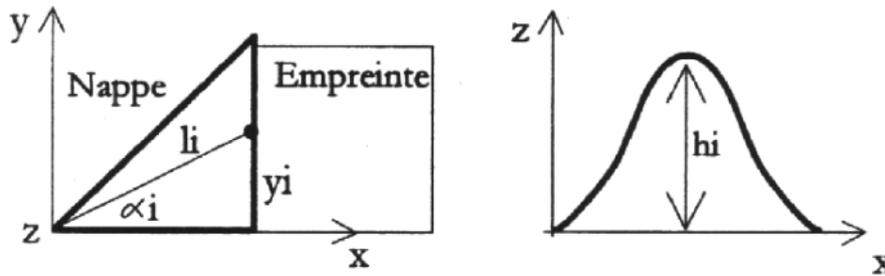


Figure 5.4 : Schéma de la nappe d'injection – [Quilliet 98]

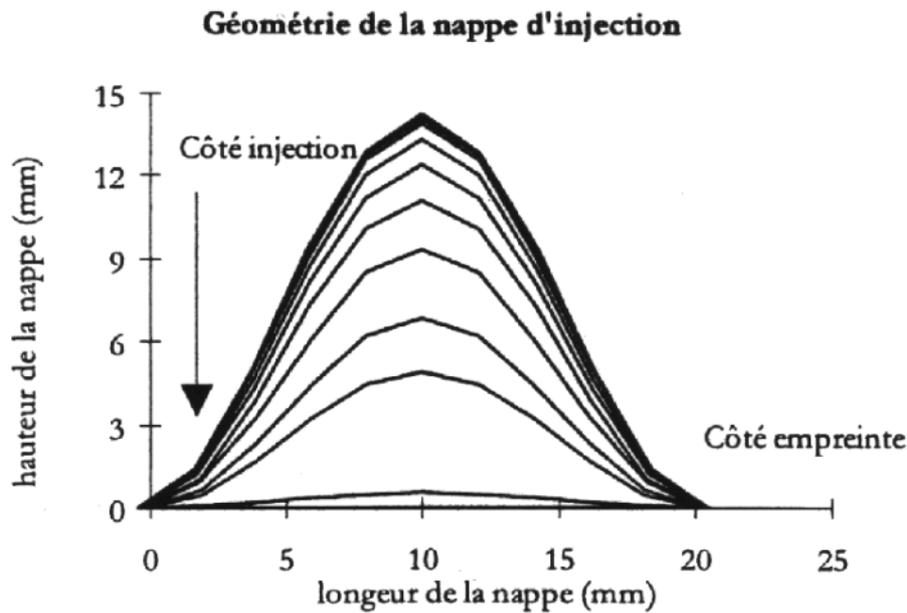


Figure 5.5 : Profil de la nappe d'injection – [Quilliet 98]

Une simulation du remplissage de la pièce par Modflow (figure 5.6) montre que le front de matière est bien plan et que la polymère remplit la cavité de façon homogène. La fabrication d'incomplets de la pièce a permis de valider les résultats de cette simulation.

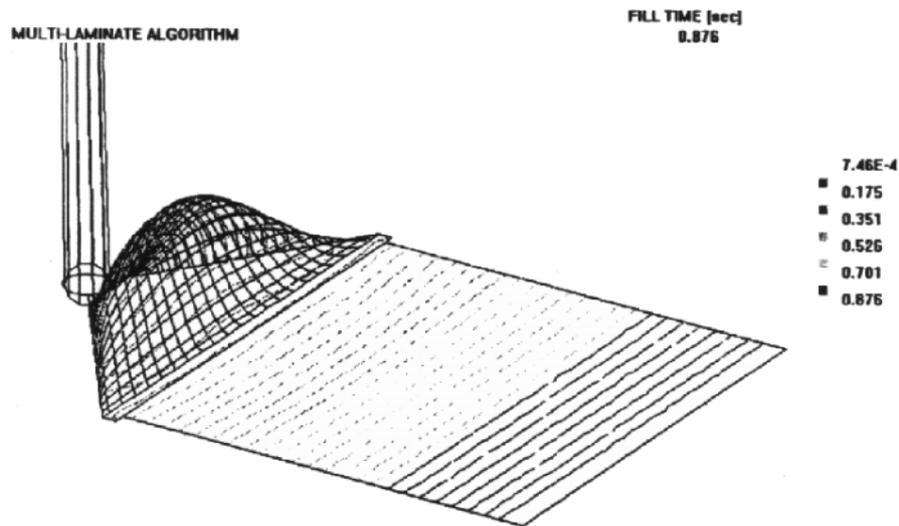


Figure 5.6 : Avancée du front de matière – [Quilliet 98]

### 5.1.3 Instrumentation

Deux **capteurs de pression** de marque Kistler sont implantés dans le moule, affleurant la surface de l’empreinte. Dans le cas du moule de 3 mm, ils sont situés respectivement à 17 mm et à 47 mm du seuil d’injection (situé à gauche sur la figure 5.7).

Le **capteur de flux** (figure 5.8) permet d’obtenir des données d’une importance primordiale dans l’analyse des phénomènes. En effet, les mesures issues de ce seul capteur permettent de calculer bien sûr la densité de flux thermique, mais aussi les températures de surface du moule et du polymère et les résistances de contact ainsi que l’épaisseur des lames d’air entre la pièce et le moule. Un soin tout particulier a donc été apporté aussi bien à la conception, qu’à la réalisation et à l’étalonnage de ce capteur.

En premier lieu la mesure se doit d’être non intrusive, c’est à dire que la quantité de chaleur ainsi que l’orientation des lignes de flux qui traversent la paroi du moule doivent être les mêmes avec ou sans capteur. Il est à noter que les capteurs de flux commerciaux ne remplissent généralement pas cette condition.

Afin de satisfaire cette exigence, le matériau constitutif du moule et du capteur doit être le même. De plus, l’état de surface du capteur doit également être le même que celui du moule dans lequel il est implanté. Enfin, les fils des thermocouples du capteur doivent avoir une direction normale aux lignes de flux, c’est à dire être placés le long d’isothermes.

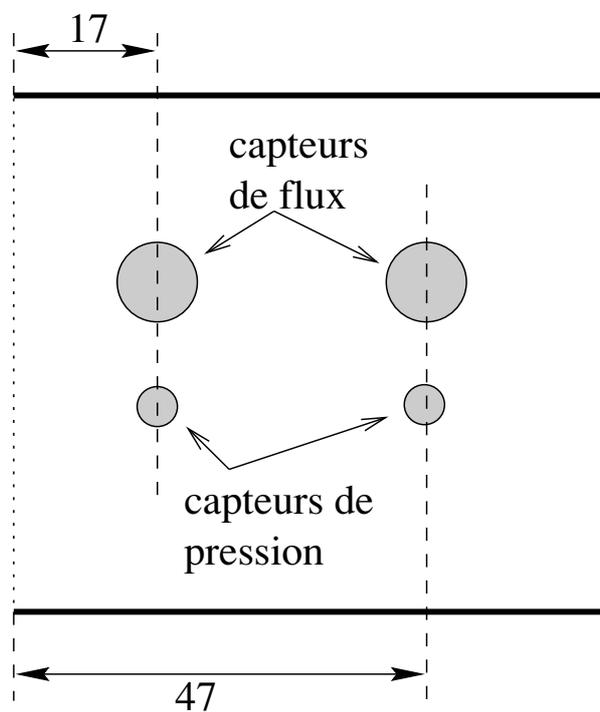


Figure 5.7 : Position des capteurs (empreinte de 3 mm)

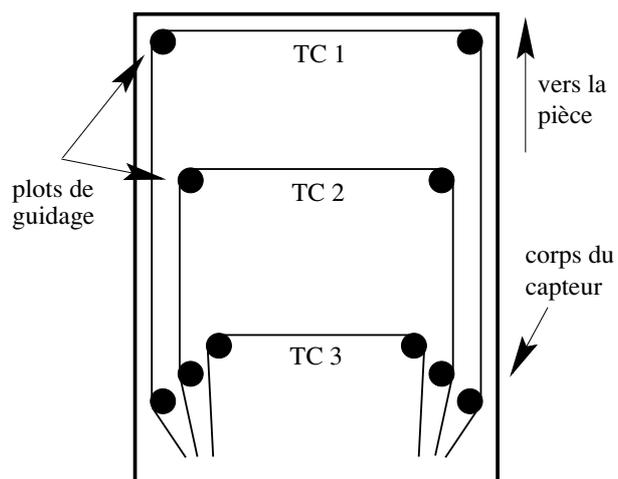


Figure 5.8 : Schéma du capteur de flux

Ce capteur est découpé en deux demi-cylindres dont le plan de coupe est normal à la surface du moule. Trois thermocouples chrome/alumel constitués de deux fils de diamètre  $25\ \mu\text{m}$  sont soudés sur l'axe de l'un des demi-cylindres. Les deux fils sont soudés sur le corps du capteur, en contact séparé, la liaison électrique étant réalisée par le métal du capteur, selon une isotherme. On bénéficie ainsi d'une constante de temps d'un thermocouple intrinsèque tout en gardant la forte sensibilité des thermocouples classiques (type K en l'occurrence) [Lebot 98].

## 5.2 Techniques de dépouillement

Le soin important avec lequel les capteurs de flux ont été conçus et leur utilisation validée permet d'obtenir des données fiables et précises. Philippe Le Bot [Lebot 98] et Stéphane Quilliet [Quilliet 98] ont mis au point une technique de dépouillement qui utilise la technique des méthodes inverses pour extraire des mesures les données concernant les flux, les températures ou les résistances thermiques.

Nous présentons ici le principe de cette méthode de façon à donner une idée de son fonctionnement. Une analyse complète et détaillée est toutefois développée dans les deux thèses précédemment citées.

### 5.2.1 Détermination des flux et températures

L'obtention du flux et de la température de surface à partir des données fournies par les trois thermocouples qui constituent le capteur repose sur un calcul par méthode inverse séquentielle [Beck 85]. Le principe de cette méthode consiste en la comparaison des températures obtenues par les capteurs avec celles issues de la résolution de l'équation monodimensionnelle de la chaleur.

Si on veut déterminer une condition surfacique dans un problème de transfert de chaleur monodimensionnel par conduction dans une paroi d'épaisseur  $L$ , il faut résoudre les équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \text{ pour } 0 < x < L \text{ et } 0 < t < t_f \\ -k \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = q(t) \text{ pour } x = 0 \text{ et } 0 < t < t_f \\ T(L, t) = f(t) \text{ pour } 0 < t < t_f \\ T(x, 0) = T_0(x) \text{ pour } 0 < x < L \end{array} \right. \quad (5.2)$$

La diffusivité thermique  $a$ , la conductivité thermique  $k$ , le champ initial  $T_0(x)$  (pour  $0 < x < L$ ) et la température  $T_L(t)$  en  $x = L$  sont supposés connus. On veut déterminer la densité de flux  $q(t)$  en  $x = 0$  et la température de surface  $T_s$ .

L'information additionnelle nécessaire est apportée par les deux relevés de température  $Y_1(t_k)$  et  $Y_2(t_k)$  pour  $t_k = n dt$ , réalisés dans la paroi aux emplacements d'abscisse  $x_1$  et  $x_2$  respectivement. Le capteur 3 est situé en  $x = L$  de sorte que  $Y_3 = T_L$ .

Le problème direct se résout par une méthode numérique aux différences finies, dite  $\theta$  – méthode (pour laquelle  $\theta = 0,5$  signifie un schéma de Cranck–Nicholson et  $\theta = 1$  signifie un schéma implicite).

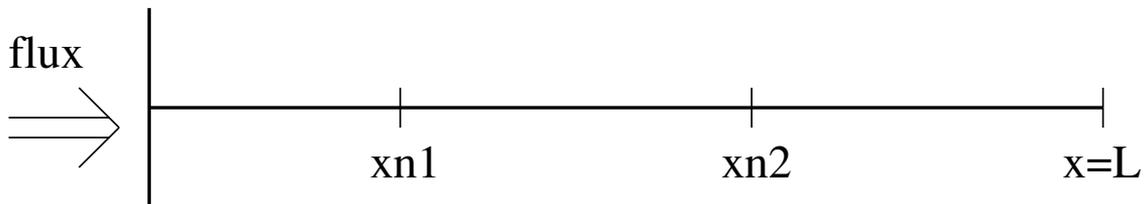


Figure 5.9 : Position des capteurs

La méthode séquentielle est basée sur les concepts de « spécifications de fonctions » et de « pas de temps futurs ». Les détails de la méthode sont décrits dans [Beck 85]. On peut résumer l'algorithme ainsi :

1. À l'instant  $t_n$  on suppose connus :
  - le champ de température  $T_i^n = T(x_i, t_n)$  pour  $i = 1, N + 1$  ;
  - la densité de flux  $q^n$  ;
  - les relevés de température  $Y_1^k, Y_2^k, Y_3^k$  pour  $k = 1, \dots, r$  où  $r$  désigne le nombre de pas de temps futurs.

2. La valeur  $q^{n+1}$  s'obtient alors par les relations suivantes :

$$q^{n+1} = q^n + \sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^2 K_j^k [Y_j^{n+k} - V_j^{n+k}] \quad (5.3)$$

où  $K_j^k$  est le gain calculé à partir des coefficients de sensibilité de la température aux points de mesures.

Ces coefficients de sensibilité sont les dérivées partielles des paramètres d'observation (ici, les températures aux points  $x_{n1}$  et  $x_{n2}$ ) aux paramètres identifiés (ici, la condition surfacique de densité de flux) :

$$S_j^{n+k} = \frac{\partial \theta_j^{n+k}}{\partial q} \quad (5.4)$$

Ils sont solution des équations de sensibilité :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial t} = a \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \text{ pour } 0 < x < L \text{ et } t_n < t < t_{n+f} \\ -k \frac{\partial S(0, t)}{\partial x} = 1 \text{ pour } t_n < t < t_{n+f} \\ S(L, t) = 0 \text{ pour } t_n < t < t_{n+f} \\ S(x, t_n) = 0 \text{ pour } 0 < x < L \end{array} \right. \quad (5.5)$$

dans ces conditions, on a :

$$K_j^k = \frac{S_j^k}{\sum_{k=1}^r \sum_{j=1}^2 [S_j^k]^2} \quad (5.6)$$

$V_j^{n+k}$  est la température calculée au niveau du  $j^{\text{ème}}$  capteur en résolvant le problème direct sur l'intervalle de temps  $[t_n, t_{n+r}]$ . Cette résolution est effectuée en spécifiant *a priori* l'évolution du flux sur cet intervalle. En pratique, on prend une évolution constante.

3. On en déduit le champ de température  $T_i^{n+1} = T(x_i, t_{n+1})$  par la relation  $T_i^{n+1} = \underline{T}_i^{n+1} + (q^{n+1} - q^n) S_i^1$  pour  $i=1, \dots, 3$  et où  $\underline{T}_i^n$  est la température estimée par la résolution du problème direct en  $x_i$  et au temps  $t_n$  pour un flux  $q^n$  considéré.

4. Le calcul est répété tant que  $t_{n+r} < t_{final}$ .

L'association du capteur et de la méthode inverse utilisée pour analyser les mesures a été soumise à des validations ainsi qu'à des tests de sensibilité effectués sur un problème possédant une solution analytique et dont les paramètres sont proches de ceux rencontrés expérimentalement [Lebot 98, Quilliet 98]. Il en ressort les points suivants :

1. Le nombre de pas de temps futurs  $r$  doit être choisi avec soin en fonction du phénomène étudié. En effet, si  $r$  est petit, l'anticipation temporelle est réduite ce qui permet de suivre des évolutions rapides du flux. Cependant la sensibilité du capteur au bruit de mesure est alors accrue. Un nombre  $r$  élevé jouera en revanche un rôle de filtre sur le bruit de mesure, mais introduira un lissage de l'évolution du flux. Il est donc nécessaire de trouver un compromis, suivant la qualité des mesures (beaucoup ou peu de bruit) et la connaissance *a priori* de l'évolution du flux (lente ou rapide). L'influence du paramètre  $r$  sur un signal volontairement bruité est présenté sur la figure 5.10.
2. L'utilisation de la méthode inverse suppose une connaissance parfaite de l'emplacement des trois thermocouples dans le capteur. Or, il existe une incertitude sur la localisation de ces fils, estimée à 25  $\mu\text{m}$  selon [Quilliet 98], qui tire les conclusions suivantes :
  - L'erreur sur le positionnement du premier thermocouple entraîne un biais faible sur le calcul du flux et négligeable sur l'identification de la température de surface.
  - L'effet de l'incertitude sur la position du deuxième thermocouple a une influence négligeable étant donné le peu de sensibilité de celui-ci sur la mesure. En revanche une erreur sur le calcul des résidus est générée.
  - C'est sur le troisième thermocouple que cette incertitude de position introduit l'erreur la plus importante, celui-ci servant en effet de condition à la limite au calcul. L'influence de l'erreur de positionnement sur l'identification des flux est présentée sur la figure 5.11.
3. Les tests effectués sur le paramètre  $\theta$  du  $\theta$ -schéma montrent qu'une valeur comprise entre 0,8 et 1 (cette dernière valeur correspondant à un schéma implicite pur) donne les meilleurs résultats.

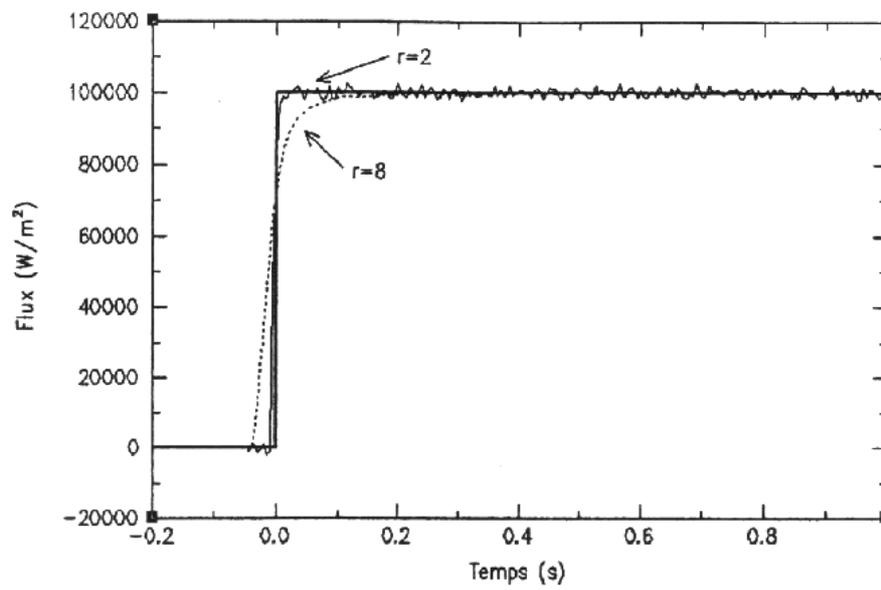


Figure 5.10 : Influence du bruit – [Lebot 98]

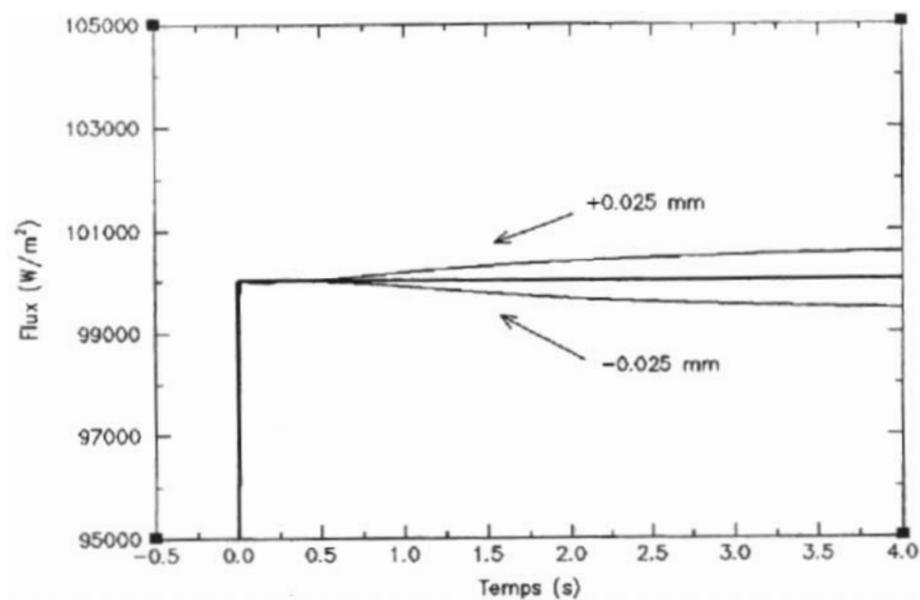


Figure 5.11 : Influence de l'erreur sur la localisation du troisième thermocouple – [Lebot 98]

### 5.2.2 Détermination de la RTC

Les validations présentées au chapitre précédent ainsi que les expériences sur presse ont montré l'importance capitale jouée par les RTC sur l'évolution thermique de la pièce. L'équipe du LT de l'EPUN a mis au point une méthode permettant d'identifier les RTC grâce à la connaissance de la densité de flux traversant la paroi interne du moule. Nous présentons ici, dans un cas simplifié (symétrique et pour lequel un seul paramètre fonction du temps, la résistance, est à identifier) l'adaptation de la méthode séquentielle de Beck qui a été utilisée [Lebot 98].

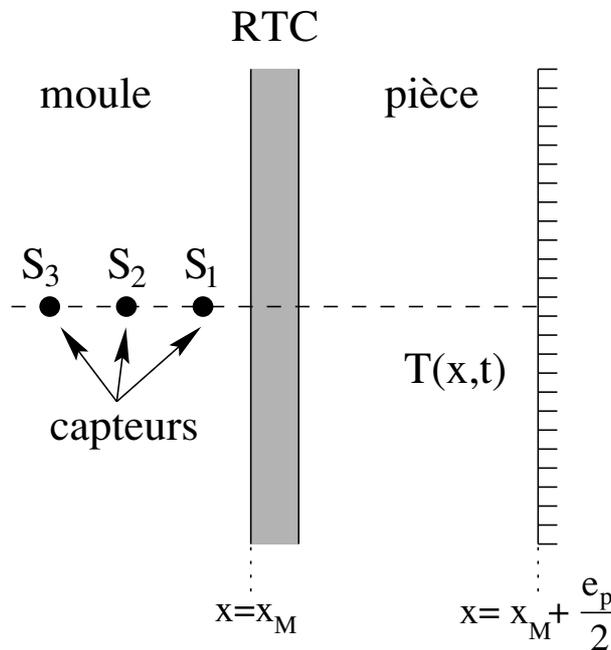


Figure 5.12 : Description du cas d'étude

Les équations qui régissent les transferts thermiques dans le cas présenté dans la figure 5.12 sont les suivantes :

1. Dans le moule, pour  $0 < x_M^-$

$$\rho_1 C_{p1} \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_1 \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right) + Q \quad (5.7)$$

2. À l'interface polymère – moule

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 \frac{\partial T(x, t)}{x} \Big|_{x_M^-} = h(t) (T(x_M^+, t) - T(x_M^-, t)) \end{array} \right. \quad (5.8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_2 \frac{\partial T(x, t)}{x} \Big|_{x_M^+} = h(t) (T(x_M^+, t) - T(x_M^-, t)) \end{array} \right. \quad (5.9)$$

Dans le polymère, pour  $x_M^+ < x < x_M^+ + \frac{e_p}{2}$

$$\rho_2 C_{p2} \frac{\partial T(x, t)}{t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_2 \frac{\partial T(x, t)}{x} \right) \quad (5.10)$$

À  $t = 0$ , les deux matériaux, initialement isothermes, sont mis en contact :

$$\left\{ \begin{array}{l} T(x, 0) = T_0^1 \text{ pour } 0 < x < x_M \\ T(x, 0) = T_0^2 \text{ pour } x_M < x < x_M + \frac{e_p}{2} \end{array} \right. \quad (5.11)$$

Pratiquement, les équations (5.7) à (5.10) sont discrétisées selon un schéma aux différences finies semi-implicite de type Cranck – Nicholson.

Nous utilisons ensuite la méthode inverse pour déterminer la résistance de contact polymère – moule. Pour cela, nous supposons que jusqu'à l'instant  $k$ , le paramètre  $h(t)$  est connu sur un nombre donné de pas de temps futurs  $r$ . On détermine alors  $h$  à l'instant  $t_{k+1}$  en minimisant la norme du critère d'écart :

$$J(h) = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{n=1}^r [Y_i^{k+n} - S_i^{k+n}]^2 \quad (5.12)$$

où  $Y_i^k$  est la température expérimentale relevée au capteur  $i$  au temps  $k$ , et  $S_i^k$  est la température calculée à la position du même capteur  $i$  au même temps  $k$ .

$N_c = 2$  dans notre cas.

On cherche la valeur de  $h$  qui minimise cette norme et qui vérifie donc :

$$\frac{\partial J}{\partial h} = -2 \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r [Y_i^{k+n} - S_i^{k+n}] \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \quad (5.13)$$

Il s'agit donc de calculer les termes  $\frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h}$  pour les pas de temps futurs  $t_{k+n}$ ,  $n = 1..r$ .

La discrétisation des équations (5.8) et (5.9) s'écrit sous forme matricielle :

$$[A(h)] [T^{k+1}] = [B(h)] [T^k] + [C^k] \quad (5.14)$$

En dérivant cette expression par rapport à  $h$ , on obtient :

$$\frac{[A(h)]}{\partial h} [T^{k+1}] + [A(h)] \frac{\partial [T^{k+1}]}{\partial h} = \frac{[B(h)]}{\partial h} [T^k] + [B(h)] \frac{\partial [T^k]}{\partial h} \quad (5.15)$$

Il faut donc résoudre à chaque pas de temps futur l'équation matricielle suivante, pour  $k = 1..r$ . L'inconnue est la *sensibilité de la température par rapport au paramètre identifié*  $h$  :  $\frac{\partial [T]}{\partial h}$ .

$$[A(h)] \frac{\partial [T^{k+1}]}{\partial h} = [B(h)] \frac{\partial [T^k]}{\partial h} - \frac{[A(h)]}{\partial h} [T^{k+1}] + \frac{[B(h)]}{\partial h} [T^k] \quad (5.16)$$

La résolution de cette équation donne alors accès aux termes  $\frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h}$ .

On cherche la variation du coefficient d'échange  $h$  qui minimise le terme  $\frac{\partial J}{\partial h}$ . En d'autres termes, on cherche  $\Delta h$  tel que :

$$h^{k+n} = h^k + \Delta h \text{ pour } n = 1..r \quad (5.17)$$

et

$$\frac{\partial J(h^k + \Delta h)}{\partial \Delta h} = 0 \quad (5.18)$$

On linéarise  $S_i(h)$ , ce qui permet d'obtenir pour  $n = 1..r$  :

$$\frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} = \frac{S_i^{k+n}(h^k + \Delta h) - S_i^{k+n}(h^k)}{\Delta h} \Rightarrow S_i^{k+n}(h^k + \Delta h) = S_i^{k+n}(h^k) + \Delta h \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \quad (5.19)$$

Or

$$J(h^k + \Delta h) = \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r [Y_i^{k+n} - S_i^{k+n}(h + \Delta h)]^2 \quad (5.20)$$

Donc

$$J(h^k + \Delta h) = \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r \left[ Y_i^{k+n} - S_i^{k+n} - \Delta h \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \right]^2 \quad (5.21)$$

En développant, il vient :

$$J(h^k + \Delta h) = \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r (E_i^{k+n})^2 - 2\Delta h \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r E_i^{k+n} \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} + (\Delta h)^2 \sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r \left( \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \right)^2 \quad (5.22)$$

avec  $E_i^k = (Y_i^k - S_i^k)$ .

Pour terminer, en appliquant (5.18) à (5.22), on obtient :

$$\Delta h = \frac{\sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r \left[ E_i^{k+n} \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \right]}{\sum_{i=1}^{Nc} \sum_{n=1}^r \left( \frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h} \right)^2} \quad (5.23)$$

avec  $\frac{\partial S_i^{k+n}}{\partial h}$  solution de l'équation (5.16).

La résistance de contact vaut alors :

$$\boxed{R^{k+1} = \frac{1}{h^k + \Delta h}} \quad (5.24)$$

**Remarque :** Lorsqu'il y a décollement, nous considérons que se mettent en série la résistance thermique de contact à pression nulle, connue par la loi (3.15), et la résistance due

à la lame d'air  $R_{air}$  ( $R = RTC(p = 0) + R_{air}$ ). Cela permet de déterminer la valeur de  $R_{air}$ , et donc de l'épaisseur de la lame d'air  $\delta$  par :

$$R_{air} = \frac{\delta}{k_{air}} \quad (5.25)$$

où  $k_{air}$  est la conductivité thermique de l'air.

L'épaisseur de la lame d'air après décollement est donc donnée à partir de la résistance thermique identifiée par méthode inverse par :

$$\delta = k_{air} [R - RTC(p = 0)] \quad (5.26)$$

Nous pouvons ainsi comparer les déplacements calculée par le code de calcul à ceux issus des mesures.

### 5.2.3 Identification du champ initial de température

La prédiction de l'évolution thermique de la pièce est, comme l'ont montré les chapitres précédents, intimement liée à la connaissance des caractéristiques physiques du matériau comme à la prise en compte des résistances de thermiques de contact ou l'apparition de lames d'air entre les parois du polymère et du moule. Cependant la connaissance de l'état initial du champ de température est indispensable pour initialiser les conditions initiales du calcul.

Or les calculs de ce type proposés dans la littérature utilisent en général la température d'injection du polymère, sans prendre en compte la formation quasi-instantanée d'une croûte de polymère solide au contact du moule froid, les échanges thermiques importants qui ont lieu pendant le remplissage ni même les résistances de contact dont l'importance est avérée.

Les travaux conjuguée de Ph. Le Bot et S. Quilliet [Lebot 98, Quilliet 98] ont permis de mettre au point une méthode permettant de déterminer le champ initial de température (supposé monodimensionnel) du polymère connaissant uniquement l'évolution des flux thermiques au cours du temps et l'enthalpie finale de la pièce.

## 5.3 Essai sur le moule de 3mm

### 5.3.1 Résultats expérimentaux

Cet essai se fait à forte pression d'injection (400 bars), la régulation en température du moule est programmée de façon à assurer une bonne symétrie thermique tout au long de la durée de l'essai.

Les températures enregistrées par les quatre capteurs de température sont présentées sur les figures 5.13 à 5.16. Sur chaque graphe sont présentées les données issues des trois thermocouples constituant chaque capteur. La température de surface identifiée par la méthode inverse (cf. section 5.2.1) est quasiment confondue avec les données provenant du thermocouple le plus proche de la surface.

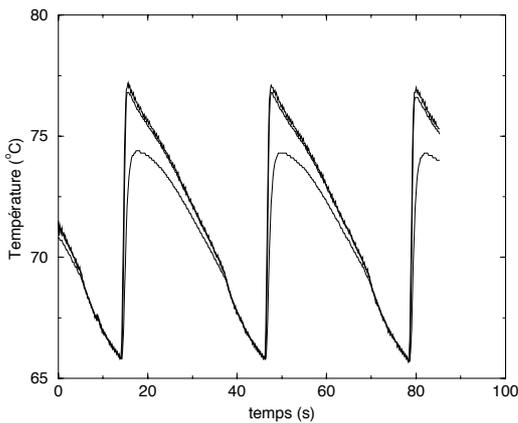


Figure 5.13 : *Températures issues du capteur n°1*

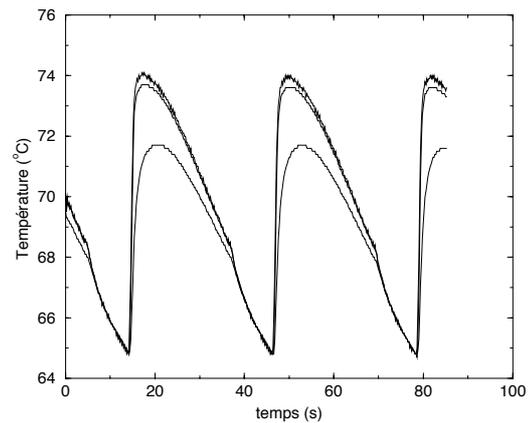


Figure 5.14 : *Températures issues du capteur n°2*

Le temps d'acquisition englobe environ trois cycles (injection, compactage - maintien, refroidissement, éjection). On note une excellente reproductibilité des températures d'un cycle sur l'autre, ce qui montre que la presse avait atteint son équilibre thermique au moment où les mesures ont été effectuées.

On remarque en outre que les capteurs donnent des résultats légèrement différents. Par exemple, l'augmentation de température au moment de l'injection du polymère dans la cavité moulante varie de 9 à 1°C. Cela montre la difficulté expérimentale à obtenir la

symétrie des températures.

On note de plus que le moule est équipé d'un système de guillotine qui, lorsqu'il est activé, sépare la pièce du seuil d'injection et ferme le moule. L'intérêt d'une telle opération est d'éviter que les mouvements dus au refroidissement de la carotte et du seuil d'injection ne se répercutent sur la pièce. De plus, c'est une garantie d'avoir un refroidissement à masse constante dans la cavité moulante.

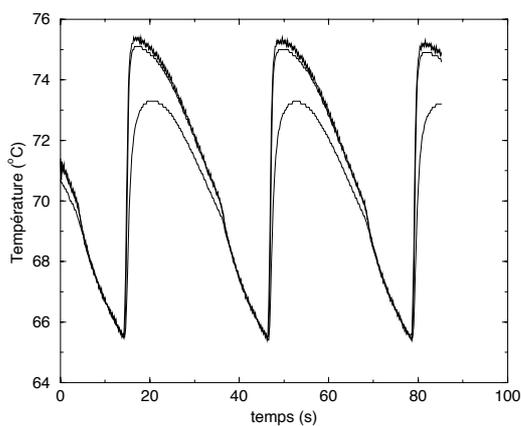


Figure 5.15 : *Températures issues du capteur n° 3*

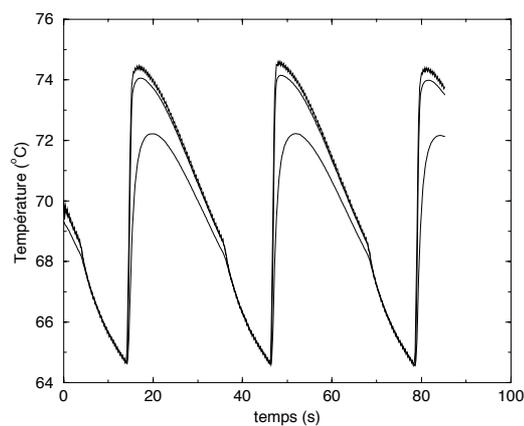


Figure 5.16 : *Températures issues du capteur n° 4*

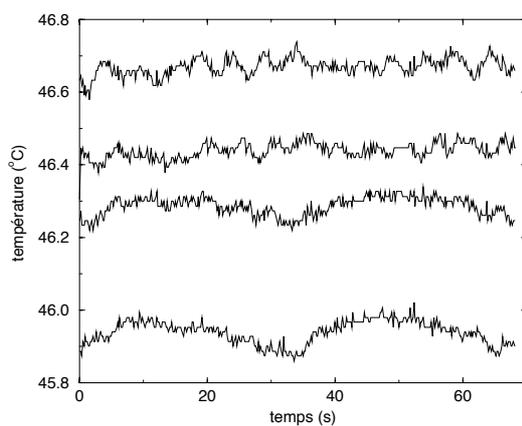


Figure 5.17 : *Température de l'eau de refroidissement*

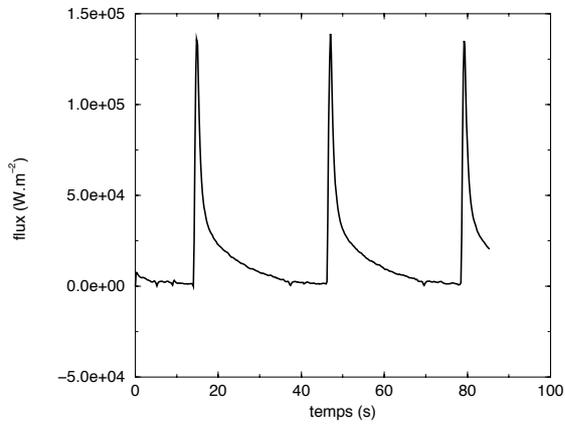


Figure 5.18 : Flux thermique relevé par le capteur n° 1

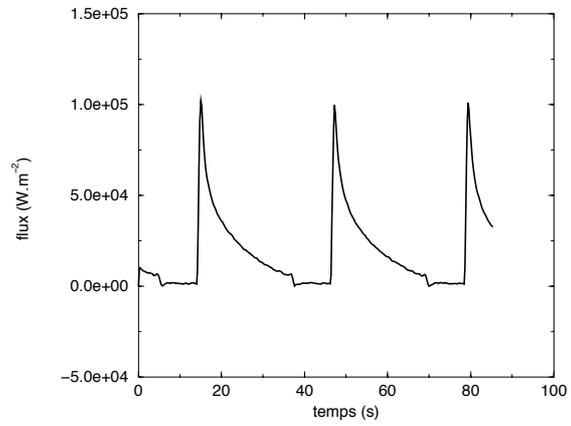


Figure 5.19 : Flux thermique relevé par le capteur n° 2

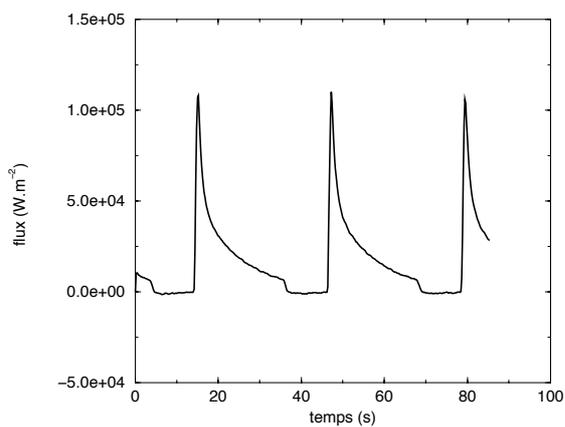


Figure 5.20 : Flux thermique relevé par le capteur n° 3

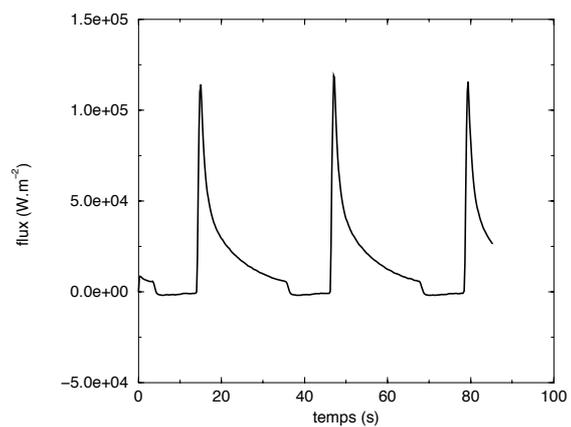


Figure 5.21 : Flux thermique relevé par le capteur n° 4

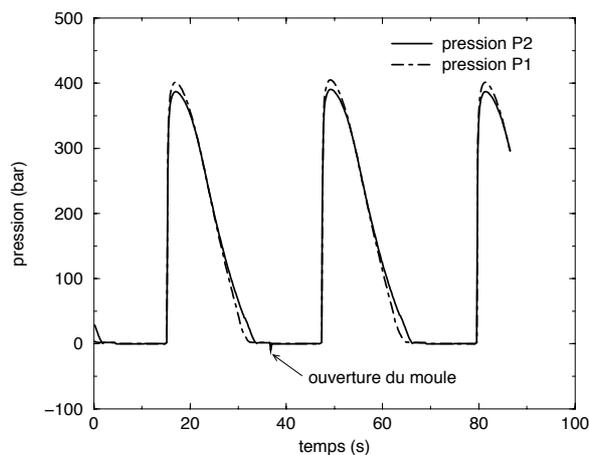


Figure 5.22 : Pressions mesurées par les deux capteurs

### 5.3.2 Résultats numériques

Nous présentons ici les résultats obtenus par le code de calcul que nous avons développé. Rappelons que nous résolvons de façon couplée les équations de Navier (2.102) et de l'énergie (2.73) ainsi que la loi d'État du matériau.

Le polymère utilisé lors des expériences est l'Acrylonitrile Butadiène Styène (ABS). Un échantillon du lot utilisé a servi à la caractérisation qui a été faite au LT de l'EPUN. Ces données expérimentales thermodépendantes (conductivité thermique, capacité calorifique) ont été interpolées de façon à pouvoir ensuite être implantées dans le code (cf. section 2.4).

Le cas du volume spécifique, à la fois thermo- et piézodépendant, est pris en compte par l'utilisation conjointe de mesures et d'une loi semi-empirique, la loi de Tait (cf. section 2.4.3).

Par ailleurs, nous supposons un comportement élastique du solide (cf. section 2.8). La détermination du module d'Young et du coefficient de Poisson est importante puisqu'elle va diriger l'évolution de la pression au cours du refroidissement. L'hypothèse des contraintes planes que nous avons choisie (cf. section 3.5.1) permet d'avoir une relation qui lie les caractéristiques mécaniques à la pression dès lors que le diagramme PVT est connu :

$$p = \frac{\alpha ET}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (5.27)$$

L'utilisation de cette équation comporte cependant des limitations. En effet, même s'il est possible de se donner une évolution du coefficient de Poisson réaliste (par exemple  $\nu=0,2$  pour  $T < T_g$  et  $\nu=0,4$  pour  $T > T_g$ ), le moment du décollement rend le module d'Young indéterminé puisque la pression devient nulle. En cas de décollement local ou de cisaillement important, une telle approche ne prenant en compte que la pression est inadaptée. Par exemple, si la pression –et donc le module d'Young– est faible, une contrainte de cisaillement minime suffira à provoquer des déplacements importants. Il est donc nécessaire de « caler » la loi d'évolution du module d'Young sur les données expérimentales en donnant lui une valeur minimale qui est dans notre cas de 52,5 MPa lorsque la température est inférieure à celle de transition vitreuse. Pour les autres températures, c'est l'équation (5.27) qui est utilisée.

Les résistances thermiques de contact à l'interface polymère–moule sont prises en compte (cf. section 3.4.2), que ce soit avec ou sans contact de la pièce sur les parois. Le collement et le décollement sont également gérés par le code (cf. section 4.2) de façon à permettre les mouvements. Le glissement de la pièce contre les parois du moule est supposé parfait, cependant un coefficient de frottement – qui reste à déterminer – peut être pris en compte (cf. section 3.5.3).

L'algorithme de résolution est présenté sur la figure 5.25.

Les caractéristiques thermiques (volume spécifique, conductivité thermique, capacité calorifique) sont tout d'abord déterminées dans chaque maille en fonction des valeurs de la température et de la pression (cf. section 2.4). Une fois ces caractéristiques connues, le champ de température est calculé par l'équation de l'énergie (2.73). La connaissance des températures permet d'actualiser la valeur du module d'Young, suivant la loi présentée plus haut.

Une boucle destinée à déterminer la forme de la pièce débute ensuite. On recherche en fait seulement le mouvement par rapport à l'itération précédente, en vertu du principe de superposition. Cependant, pour permettre l'exécution du test, les champs de déplacements et de contraintes totaux (i.e. superposés) sont calculés après chaque itération de cette

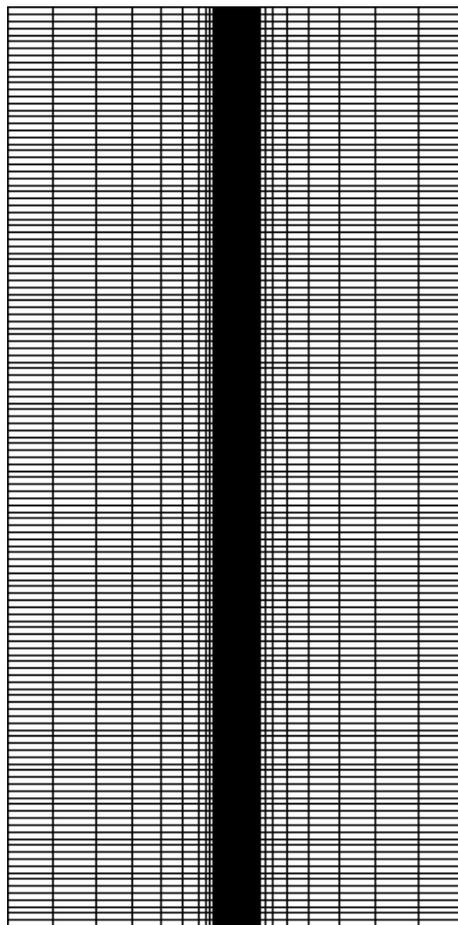


Figure 5.23 : Maillage du moule de 3 mm

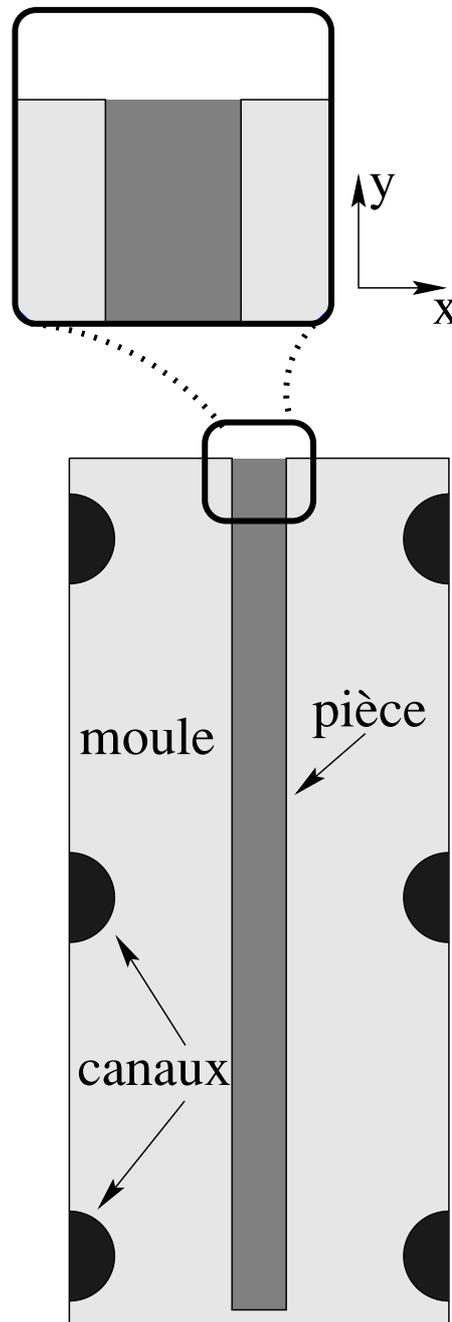


Figure 5.24 : Schéma du moule de 3 mm

boucle interne.

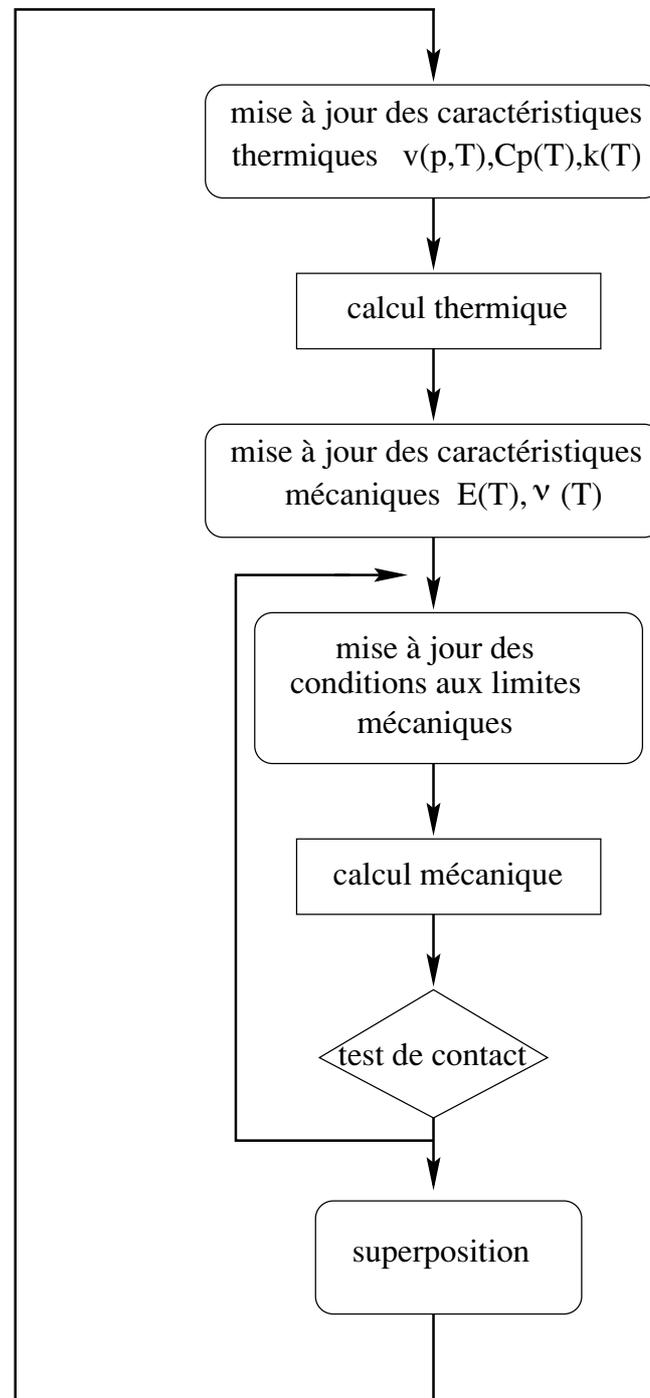
On suppose tout d'abord que les mailles qui étaient collées (resp. décollées) à la fin de l'itération en temps précédente restent collées (resp. décollées) au début de l'itération en cours. La résolution des équations de Navier (2.102) avec ces conditions aux limites donne la forme de la pièce. Le test de contact détaillé dans la section 3.5.3 est ensuite appliqué et une série de modifications des conditions aux limites et de calculs du champ de déplacements se poursuit jusqu'à l'obtention de la forme finale de la pièce. Moins de trois itérations sont en général nécessaires pour atteindre la convergence. Cependant, il arrive quelquefois que la position d'une maille soit indéterminée (si elle est libre, le test demande de la coller et lorsqu'elle est collée les contraintes la relâchent). Cette maille est toujours située à la frontière entre un groupe de mailles collées et un autre de mailles décollées. Ceci est dû au fait que les mailles ont des dimensions finies, ce qui donne une indétermination lorsque le point de contact « théorique » se situe environ à équidistance de deux nœuds. Un test supplémentaire permet alors de sortir de la boucle si la même configuration se reproduit au cours des itérations internes. La maille en cause est alors arbitrairement collée et le problème disparaît généralement à l'itération en temps suivante. L'effet sur le résultat final est alors négligeable.

Lorsque la forme de la pièce est déterminée, les champs sont superposés et le résultat mis en mémoire. Le temps est ensuite incrémenté et l'itération suivante commence.

L'évaluation de la taille et de la forme de l'empreinte ne pose pas de problème particulier, des mesures précises pouvant être effectuées sur les pièces démoulées. En revanche, les choix concernant la partie thermique sont beaucoup plus délicats. La taille du moule est plus importante que celle de la pièce. Sa forme, et donc la position des canaux de refroidissement, a une influence très importante sur les conditions aux limites thermiques à imposer.

Nous avons donc utilisé les plans du moule en reproduisant fidèlement la position ainsi que la taille des canaux de refroidissement. Les flux extraits par ces canaux sont évalués en fonction de la température de l'eau de refroidissement dont les fluctuations locales sont faibles (cf. figure 5.17). Les autres conditions aux frontières du domaine de calcul ont été évaluées sous forme de flux thermiques qui tiennent compte des épaisseurs d'acier.

La durée du cycle est d'environ vingt secondes entre l'injection du polymère et l'ouver-

Figure 5.25 : *Algorithme*

ture du moule. On remarque sur les figures 5.18 à 5.21 que le flux de chaleur à l'interface moule – polymère n'est pas nul au moment de l'éjection de la pièce, ce qui est courant dans ce procédé. La discontinuité de flux qui montre l'ouverture du moule sur ces mêmes figures est cependant faible, la pièce a donc atteint une température proche de la consigne donnée par l'huile qui circule dans les canaux de refroidissement. Après l'ouverture du moule la pièce se refroidit lentement dans l'air. Cette combinaison d'un refroidissement lent sur une plage de températures (et donc de caractéristiques thermomécaniques) réduite nous permet de supposer que le profil de contraintes résiduelles à l'ouverture du moule est proche de celui qui existe après refroidissement total. Nos simulations auront donc la même durée que celle du cycle à savoir vingt secondes.

Les calculs sont effectués sur le Cray J90 du laboratoire, d'une puissance de 200 Mflops par processeur<sup>1</sup>. La modélisation d'un cycle d'une vingtaine de secondes nécessite environ trois jours de calcul.

### Températures

Les figures 5.26 à 5.29 montrent la cartographie des températures dans la pièce et le moule après respectivement 1,5,10 et 20 secondes, ce dernier temps correspondant à l'ouverture du moule.

On remarque que la présence des résistances thermiques ainsi que la différence des caractéristiques thermophysiques entre la pièce et le moule permettent de « visualiser » la pièce uniquement grâce au champ de températures. La présence des canaux de refroidissement est bien visible mais la bonne conception du moule permet d'obtenir tout de même un refroidissement quasi homogène de la pièce, à l'exception de ses extrémités.

### Déplacements

Les déplacements horizontaux et verticaux<sup>2</sup> après respectivement 10 et 20 secondes sont présentés sur les figures 5.30 à 5.33.

---

1. Notre code est vectoriel mais pas parallèle, les calculs s'effectuent donc sur un seul processeur.

2. Pour plus de commodité les directions horizontales et verticales données ici font référence à l'orientation présentée sur les figures.

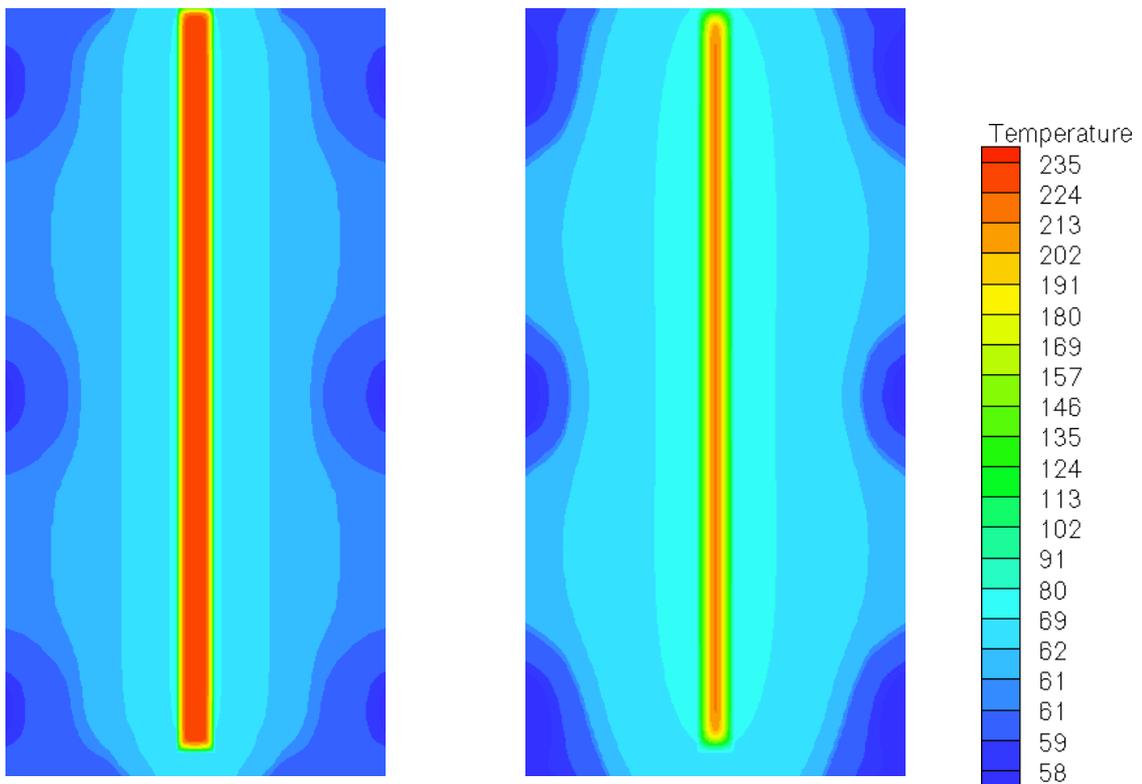


Figure 5.26 : *Températures après 1 seconde*

Figure 5.27 : *Températures après 5 secondes*

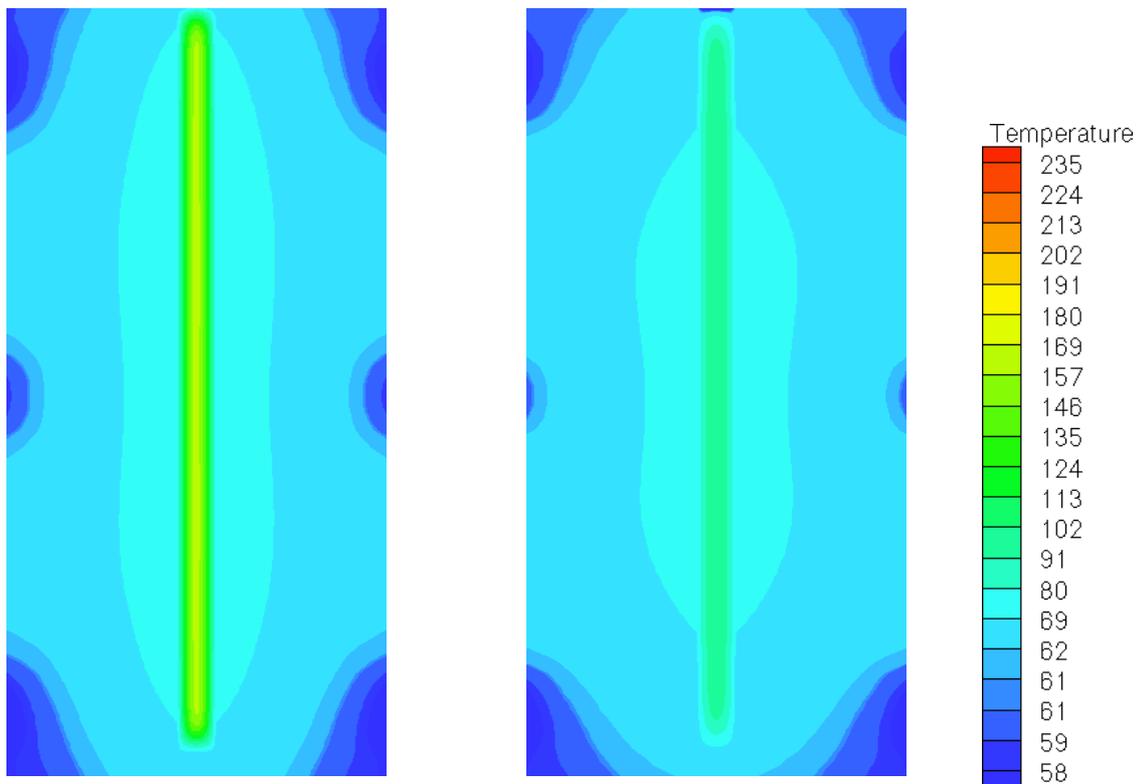


Figure 5.28 : *Températures après 10 secondes*      Figure 5.29 : *Températures après 20 secondes*

On observe qu'il n'y a pas de décollement de la pièce des parois horizontales du moule comme le montrent les graphes de flux (5.18 à 5.21) et de température du moule (5.13 à 5.16) qui ne montrent aucune discontinuité<sup>3</sup>. Les déplacements horizontaux visibles ici sont donc provoqués uniquement par la déformation de la pièce qui reste cependant en contact avec le moule. On observe néanmoins des décollements aux extrémités de la pièce dus aux effets de coin.

Les déplacements verticaux montrent une contraction de la pièce dans le sens de sa longueur. Après fermeture de la guillotine (cf. section 5.3.1) la partie supérieure de la pièce est en effet totalement libre et la pièce se rétracte de part et d'autre d'un point situé environ en son centre. La légère dissymétrie des déplacements vient de la dissymétrie des conditions aux limites thermiques imposées suivant la direction verticale du moule.

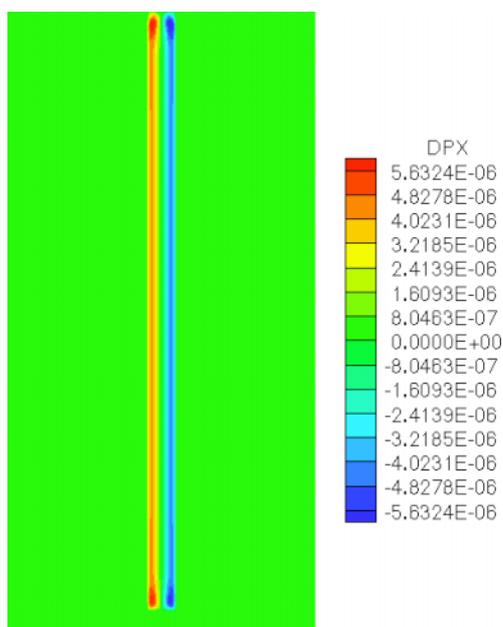


Figure 5.30 : *Déplacements horizontaux après 10 secondes*

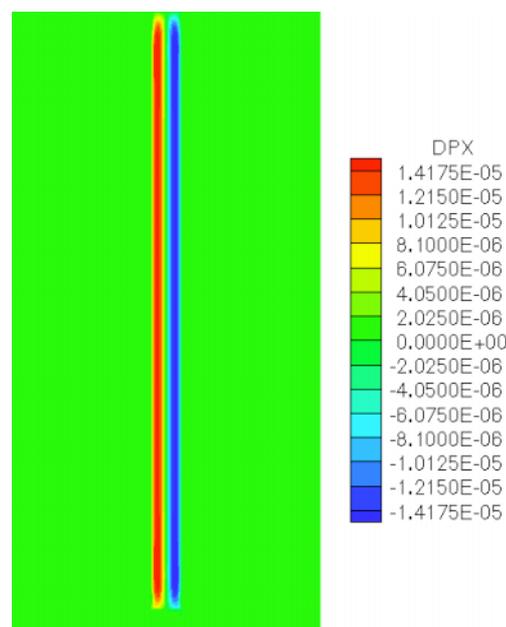


Figure 5.31 : *Déplacements horizontaux après 20 secondes*

## Contraintes

Les figures 5.34 à 5.40 montrent la valeur des champs de contrainte au sein de la pièce.

Les contraintes horizontales sont présentées sur les figures 5.34 et 5.35. On observe

3. L'effet d'un décollement est aisément détectable, comme nous le verrons pour la pièce de 2 mm.

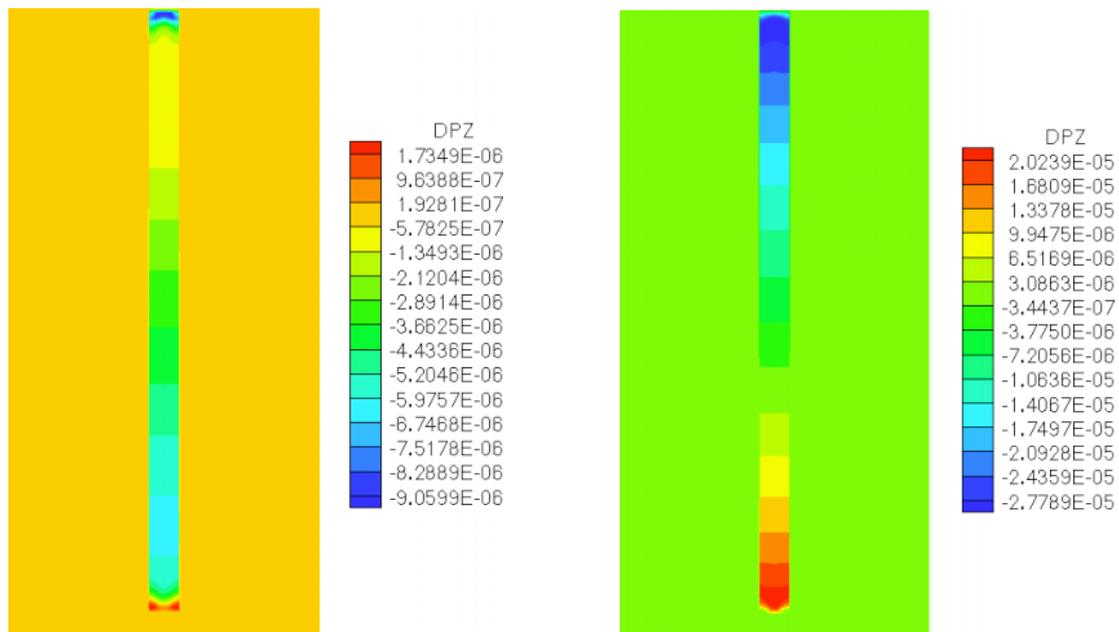


Figure 5.32 : *Déplacements verticaux après 10 secondes*      Figure 5.33 : *Déplacements verticaux après 20 secondes*

une diminution au cours du temps de cette valeur dans la partie centrale de la pièce. Cette contrainte horizontale est en effet assimilable à la pression exercée par la pièce sur la paroi du moule et mesurée par les capteurs<sup>4</sup>. Le volume de la pièce restant constant, la baisse de température entraîne une diminution de la pression suivant la loi donnée par le diagramme PVT. Après 20 secondes, la pression de la pièce sur la paroi du moule est inférieure à la pression atmosphérique ( $10^5$  Pa) comme le montre également l'enregistrement expérimental de la pression (figure 5.22).

Les extrémités de la pièce subissent un refroidissement à la fois par des gradients de température horizontaux et verticaux. Cette partie verticale du gradient provoque des contraintes résiduelles horizontales (cf. section 4.4).

De la même façon, le gradient de température horizontal présent dans la majeure partie de la pièce provoque des contraintes résiduelles verticales. Les coupes présentées sur les figures 5.37 et 5.39 sont effectuées au milieu de la pièce. On peut y observer un profil de contrainte similaire à celui obtenu par [Edujlee 89] (cf. section 4.4).

L'influence de la contrainte verticale sur le profil des contraintes résiduelles à l'intérieur

4. Une valeur de contrainte négative indique une compression.

du moule peut cependant être modifiée par les conditions opératoires. En effet, dans le cas où la pression reste suffisamment élevée, ces contraintes vont « traduire » le profil des contraintes résiduelles. En effet, la compression va se retrancher à la valeur des contraintes, alors qu'au contraire un effet de frottement du polymère contre le moule va provoquer une traction qui va augmenter leur valeur. À l'ouverture du moule cependant cette influence mécanique directe du moule sur la pièce disparaît.

Les contraintes de cisaillement (figure 5.40) sont quant à elles très faibles hormis les effets de coin, ce qui n'est guère surprenant au vu de la géométrie simple de la pièce. Il est cependant courant d'observer sur des pièces en « L » des déformations qui tendent à les « fermer » et qui sont dues à des contraintes résiduelles de cisaillement.

### Comparaisons avec l'expérience

Après les résultats concernant des cartographies à un instant donné des champs dans la pièce, nous présentons ici l'évolution temporelle de données classiques pouvant être mesurées lors du cycle, en l'occurrence température du moule, flux de chaleur et pression dans la cavité moulante.

Les figures 5.41 à 5.43 montrent la comparaison entre les mesures et le calcul de ces grandeurs physiques. On note une bonne correspondance globale des résultats.

Cependant, si l'on regarde de plus près les résultats concernant la thermique, on note une erreur sur le flux en début de calcul. Ce décalage entre les mesures et le calcul a bien sûr une influence sur la température du moule à cet instant. Nous pensons que c'est la non prise en compte de la phase de remplissage qui amène à une méconnaissance du champ de température initial et donc à une erreur sur les conditions initiales thermiques du problème. Ceci n'est pas surprenant dans la mesure où, même si un soin tout particulier a été apporté au maillage et aux conditions aux limites thermiques, le moule reste une pièce tridimensionnelle complexe. La modélisation bidimensionnelle montre rapidement ses limites mais rappelons que notre but est plus la compréhension des phénomènes qui se produisent dans le moule que la reproduction fidèle de résultats expérimentaux.

Cependant, l'évolution calculée de la température du moule et des flux a une évolution comparable aux expériences. Il serait certainement profitable de simuler le remplissage tridimensionnel du moule pour en extraire ensuite une « tranche » qui puisse servir de

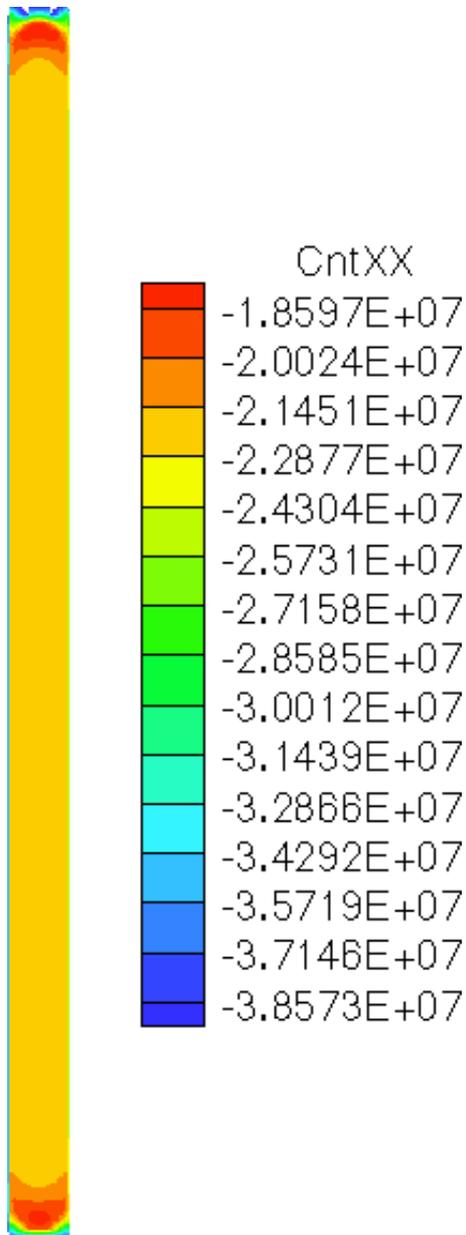


Figure 5.34 : *Contraintes horizontales après 10 secondes*

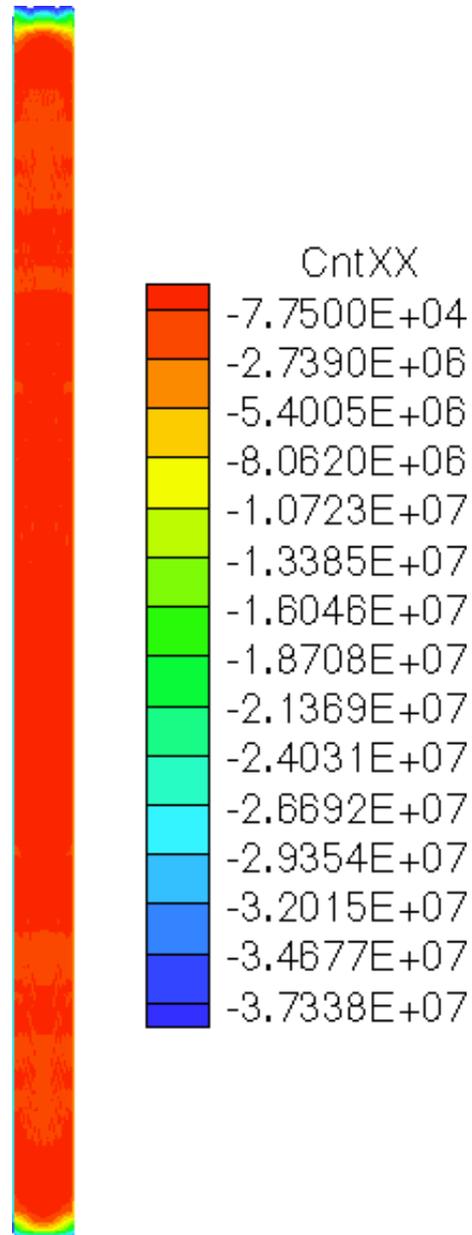


Figure 5.35 : *Contraintes horizontales après 20 secondes*

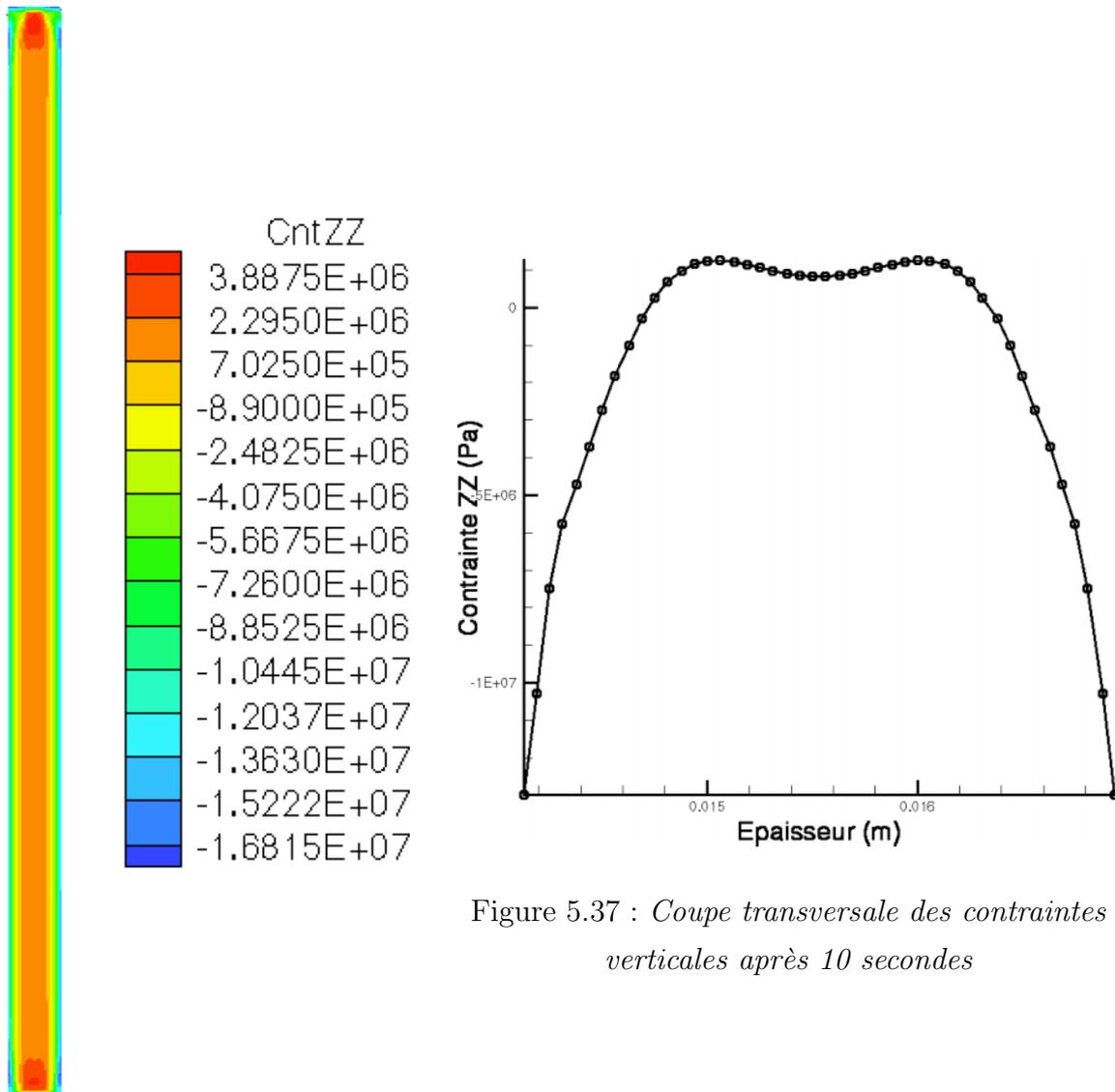


Figure 5.36 : Contraintes verticales après 10 secondes

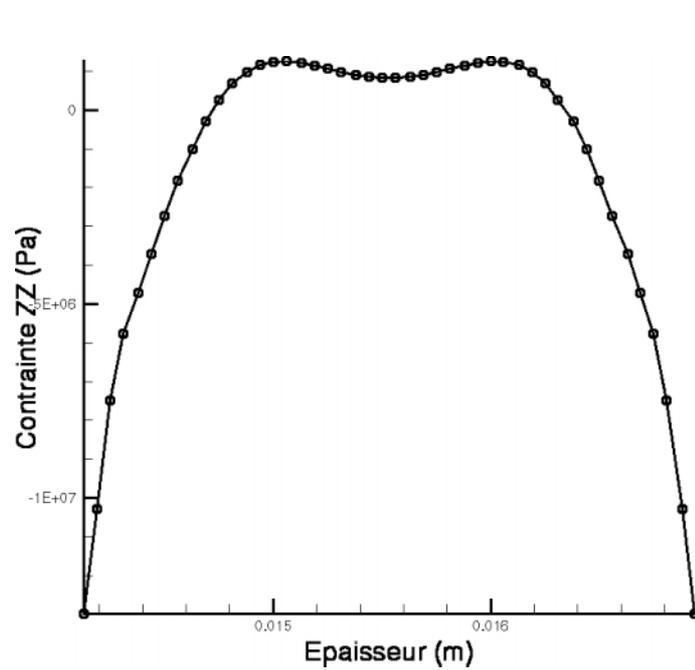


Figure 5.37 : Coupe transversale des contraintes verticales après 10 secondes

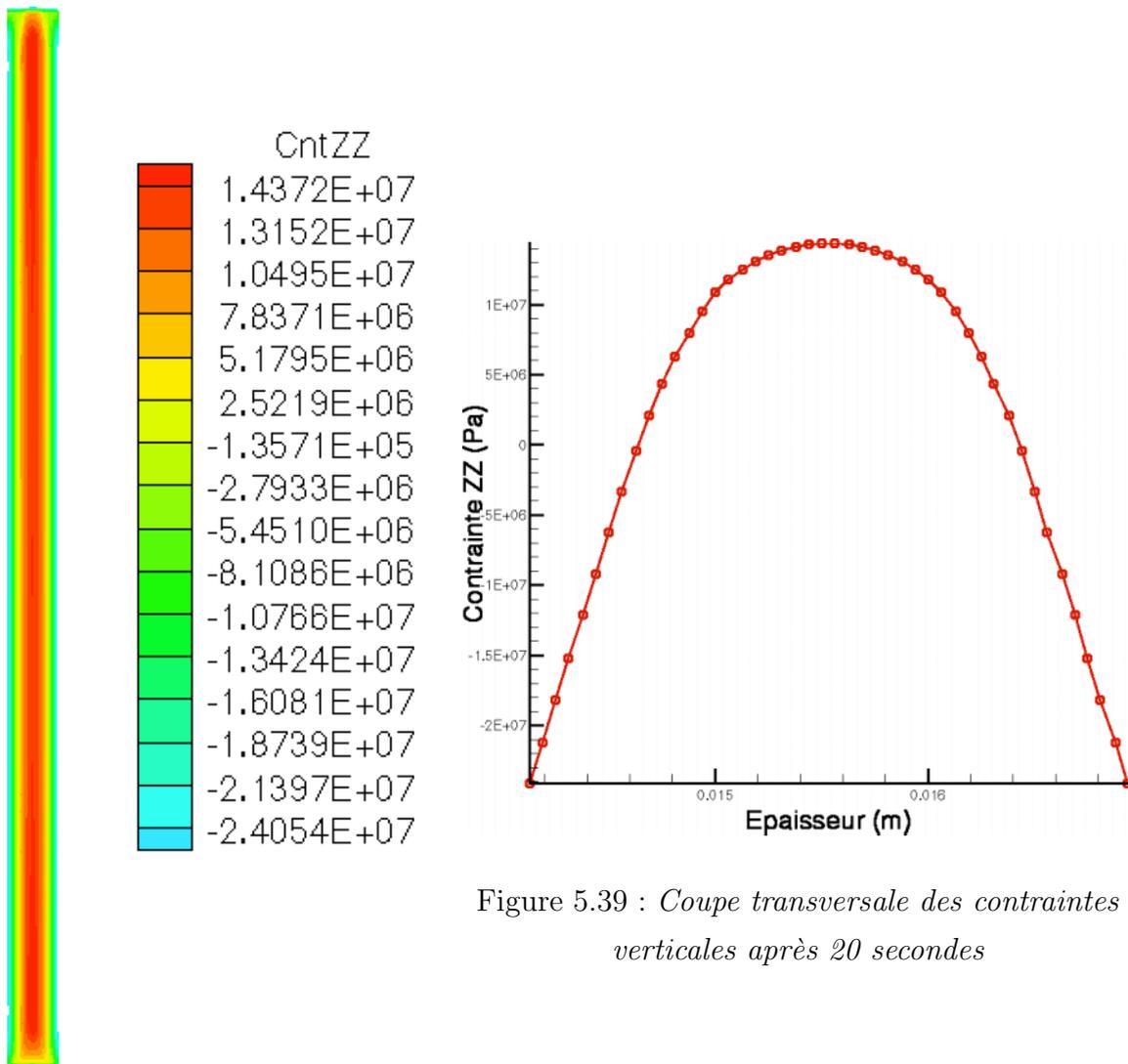


Figure 5.38 : *Contraintes verticales après 20 secondes*

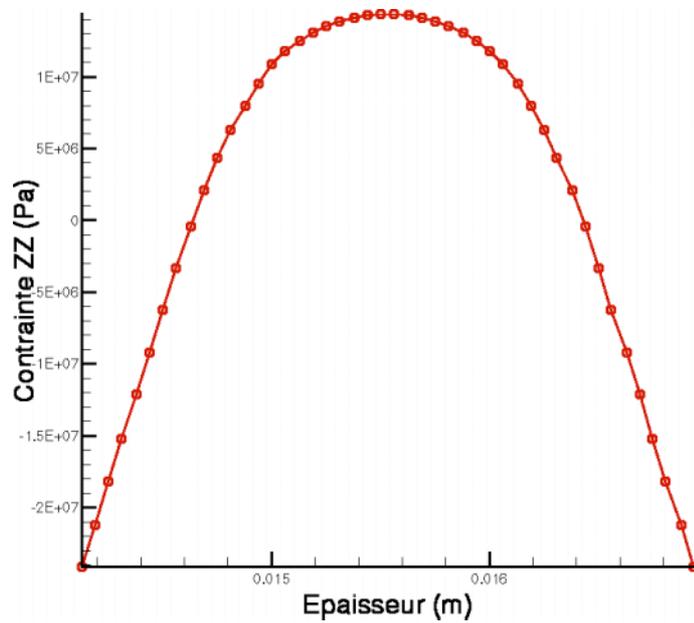


Figure 5.39 : *Coupe transversale des contraintes verticales après 20 secondes*

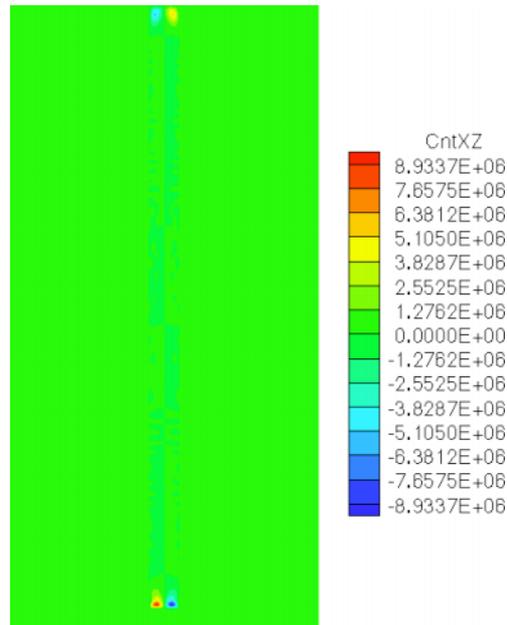


Figure 5.40 : *Contraintes de cisaillement après 20 secondes*

conditions initiale.

L'allure du graphe représentant l'évolution de la pression dans la cavité au cours du temps présente trois phases distinctes :

1. Le maintien en pression dure environ deux secondes. Durant cette phase la pression est maintenue numériquement égale à 400 bars. On note que les données expérimentales ne montrent pas un pallier aussi parfait, cependant cette méthode d'approximation du cycle de pression est couramment employée.
2. La baisse de pression à volume constant qui suit dure jusqu'à environ 16 secondes. L'écart entre le calcul et l'expérience reste faible, et peut être imputé aux imprécisions sur la température initiale ainsi qu'à la loi rhéologique simplifiée (élastique) utilisée. On note cependant un bon temps de décollement qui traduit une bonne évaluation de la valeur du module d'Young en fonction de la température.
3. Au delà de 16 secondes, la pression est inférieure à la pression atmosphérique, aussi bien expérimentalement que numériquement.

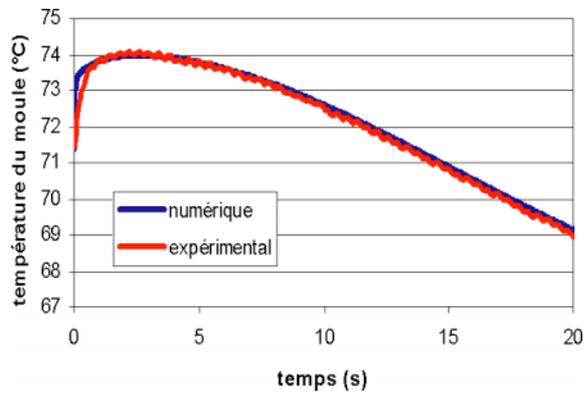


Figure 5.41 : *Évolution des températures du moule*

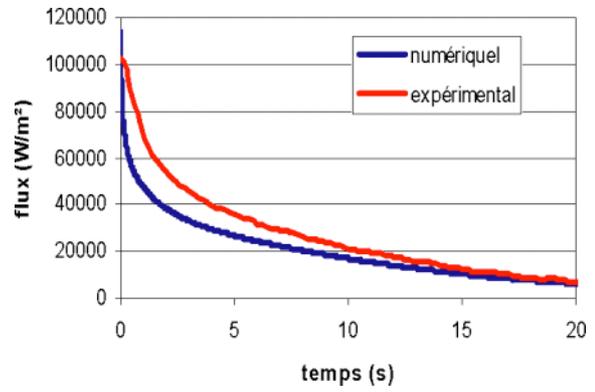


Figure 5.42 : *Évolutions des flux à l'interface pièce - moule*

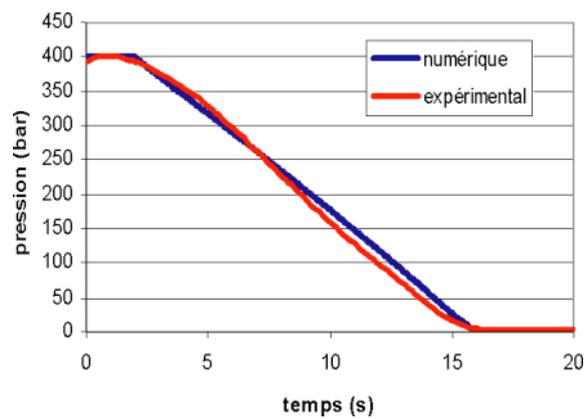


Figure 5.43 : *Évolution des pressions*

## 5.4 Essai sur le moule de 2mm

### 5.4.1 Résultats expérimentaux

Les différences opératoires par rapport au moulage de la pièce de 3 mm tiennent principalement dans la pression d'injection et dans la dissymétrie des températures. En effet, cette pièce est moins épaisse et plus longue que la précédente, et de ce fait est plus à même de se déformer dans le moule. De plus, la pression d'injection est ici extrêmement réduite (environ 26 bars) de façon à favoriser le décollement.

Ce moule, contrairement au précédent, ne dispose pas de guillotine. Le seuil d'injection est donc lié à la pièce en permanence au cours du refroidissement.

La différence de température entre les deux côtés du moule – appelés *chaud* et *froid* – est de 10°C, ce qui correspond à la consigne expérimentale.

### 5.4.2 Résultats numériques

Le maillage utilisé pour cette pièce est présenté sur la figure 5.44. Le domaine physique est ici constitué d'un moule de deux centimètres d'épaisseur qui entoure la pièce sur trois de ses faces. Les températures de consigne sont imposées sur les parois latérales ainsi que sur la face inférieure. La frontière supérieure du domaine est supposée adiabatique, de façon à prendre en compte le fait qu'il y a de la matière chaude dans le seuil d'injection.

Le moule est ici modélisé de manière sommaire, sans utilisation des plans comme cela a été le cas pour l'autre l'empreinte. Notre but n'est pas ici de simuler exactement le refroidissement de la pièce. Nous nous intéressons aux phénomènes de décollement et de battement observés expérimentalement de façon reproductible.

En ce qui concerne les déplacements, la présence du seuil d'injection, qui retient mécaniquement la partie supérieure de la pièce, est pris en compte par des conditions aux limites qui empêchent tout mouvement à cet endroit. Notre technique de gestion du contact (cf. section 3.5.3) est utilisée sur la partie restante de cette face ainsi que sur toutes les surfaces en contact avec le moule.

Le rapport de forme longueur / épaisseur de la pièce moulée expérimentalement est

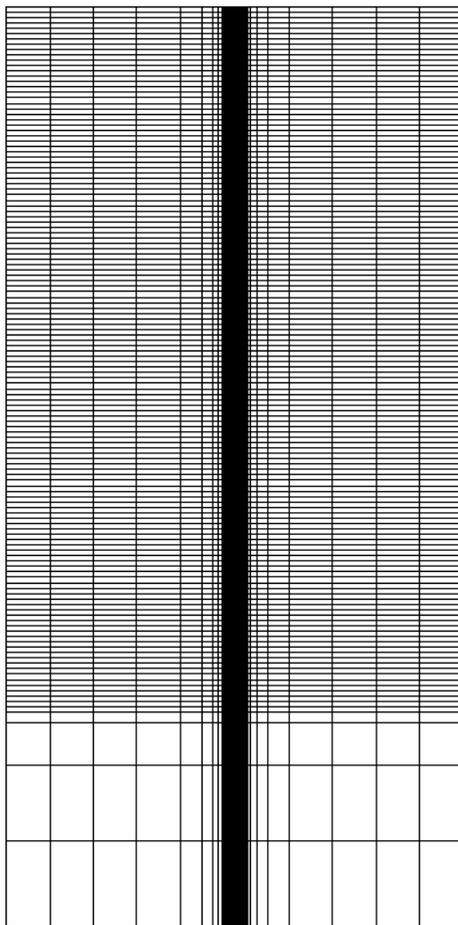


Figure 5.44 : Maillage du moule de 2 mm

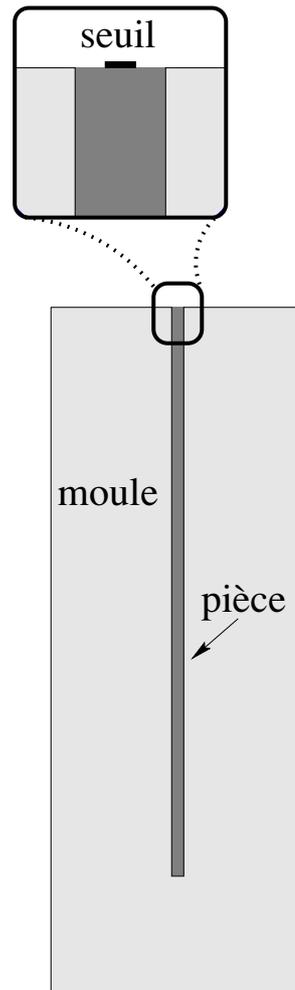


Figure 5.45 : Schéma du moule de 2 mm

très important (il vaut 70). Cela pose quelques problèmes au niveau numérique. Cette plaque nécessite en effet un maillage conséquent pour permettre la convergence du calcul. Or, notre technique de gestion du contact est très fortement pénalisée en terme de temps de calcul par le nombre de mailles à prendre en compte au niveau de l'interface moule – pièce. De plus, les conditions opératoires sont choisies de façon à avoir un décollement rapide et de grande amplitude, ce qui sollicite d'autant plus la partie de l'algorithme chargée du contact.

En utilisant un maillage adéquat, les calculs prennent plus de quinze jours de temps CPU pour arriver à terme. Nous avons choisi d'utiliser pour nos simulations une pièce de 5 cm de longueur qui permet d'observer les phénomènes décrits expérimentalement en nécessitant « seulement » cinq jours de temps CPU.

La température du polymère est initialement de  $244^{\circ}\text{C}$ , les faces gauche et droite du moules ont une température imposée de respectivement  $70^{\circ}\text{C}$  et  $60^{\circ}\text{C}$ .

Le remplissage du moule est simulé d'une manière simplifiée : la pression est supposée nulle pour  $t < 0,1$  seconde. Durant cette phase, le polymère est refroidi par conduction, ce qui permet au champ de température de correspondre à celui obtenu expérimentalement par méthode inverse à la fin du remplissage (cf. figure 5.46).

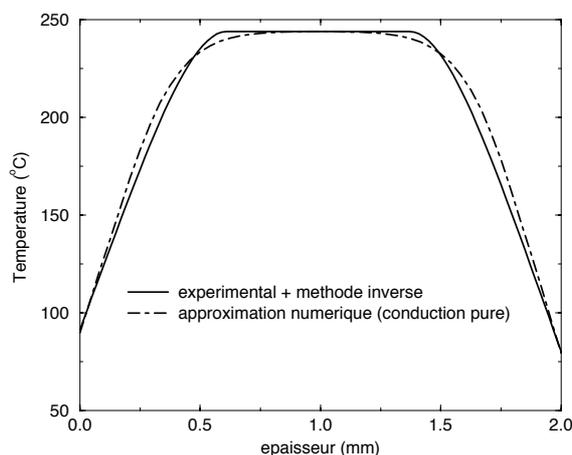


Figure 5.46 : *Profil de température initial*

Le compactage a lieu à  $t = 0,1$  s et permet d'atteindre la pression mesurée expérimentalement dans la cavité moulante. Une augmentation de la température du moule est

observée à cet instant, aussi bien sur les données expérimentales que par la simulation (figure 5.48).

Deux hypothèses peuvent expliquer cette augmentation de température :

1. L'injection de matière chaude fait augmenter brusquement la pression lors du compactage, ce qui provoque un accroissement de la température. Nous avons introduit le terme prenant en compte ce phénomène dans l'équation de l'énergie (2.72). Il en résulte une augmentation négligeable de la température. Ce phénomène ne semble donc pas être prépondérant.
2. L'augmentation rapide de pression entraîne une amélioration du contact polymère – moule et donc une baisse instantanée de la RTC comme on peut le voir sur la figure 3.10. La conséquence immédiate est une augmentation du flux de chaleur qui traverse l'interface. Cela conduit bien évidemment à une augmentation de la température.

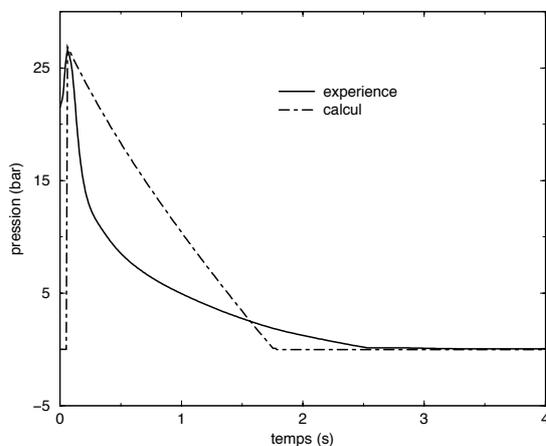


Figure 5.47 : *Évolution de la pression*

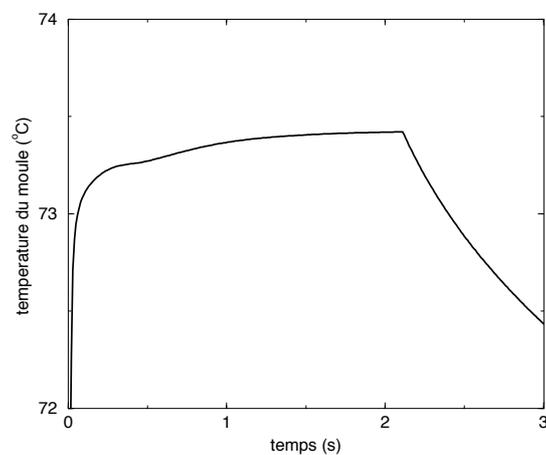


Figure 5.48 : *Température du moule – influence du compactage*

La comparaison entre les pressions calculée et mesurée est présentée sur la figure 5.47.

De  $t = 0,1$  à  $t = 1,8$  seconde, le refroidissement de la pièce provoque une diminution de la pression à volume et masse constants.

À partir de  $t = 1,8$  seconde, la pression dans la cavité moulante atteint zéro (c'est à dire la pression atmosphérique), le gradient de température est alors encore très fort et la pièce se décolle de la paroi du moule.

La figure 5.49 montre l'évolution des températures de surface (du moule et du polymère) en fonction du temps. On note l'effet thermique du décollement qui provoque une hausse de la température du polymère d'environ  $12^\circ\text{C}$ , ce qui correspond aux observations expérimentales (figure 5.50).

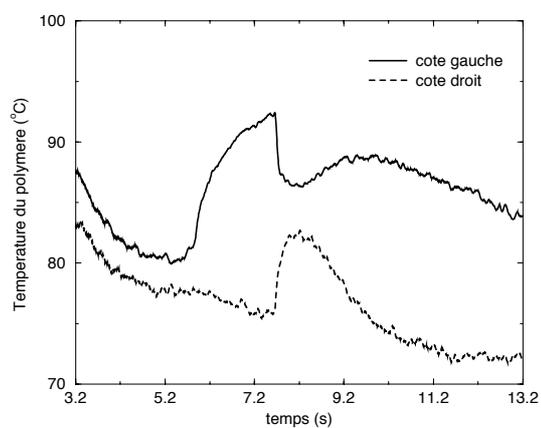
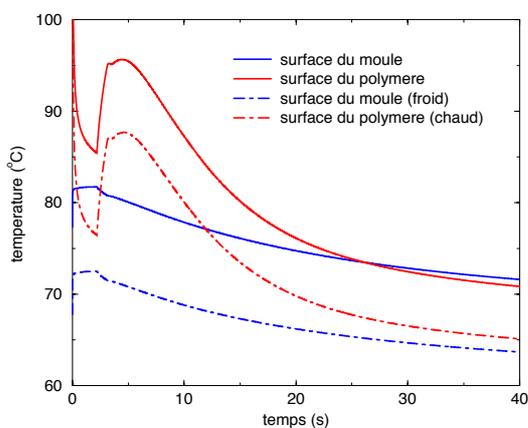


Figure 5.49 : *Évolution des températures surfaces du moule et du polymère*      Figure 5.50 : *Températures expérimentales de surface du polymère*

La figure 5.51 représente l'évolution de la résistance de contact en fonction du temps, les points de mesure étant pris sur la section médiane de la pièce. Avant le décollement, la RTC obéit à la loi définie dans la section 3.4.2. La pression étant uniformément répartie dans la pièce, la RTC est la même sur les deux faces. Après le décollement, la résistance thermique<sup>5</sup> est principalement due à l'épaisseur de la lame d'air qui s'intercale entre la pièce et le moule. La dissymétrie thermique entraîne alors une différence dans la valeur des résistances. Cependant, la somme de ces résistances thermiques de part et d'autre de la pièce (environ  $5.10^{-3} \text{ m}^2.\text{K}.\text{W}^{-1}$ ) est très proche de celle obtenue par la méthode globale utilisée par [Lebot 98, Quilliet 98].

L'évolution du profil des températures dans la section médiane de la pièce est présentée sur la figure 5.52. Le polymère est situé entre les abscisses 0 et 2 mm, ce qui permet de

5. Le terme RTC s'applique par définition uniquement lorsqu'il y a contact.

voir également la température dans le moule au voisinage de la pièce. On note le saut de température à l'interface dû à la présence des résistances thermiques.

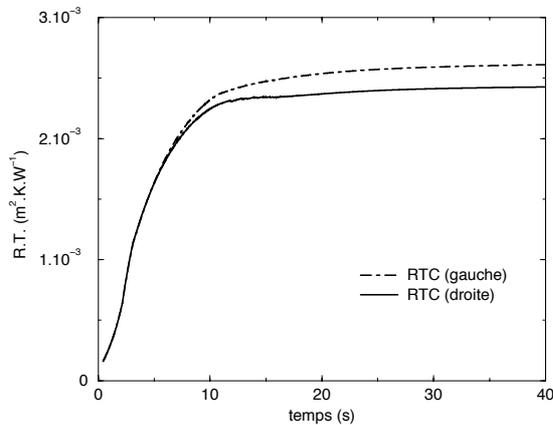


Figure 5.51 : *Évolution des résistances thermiques*

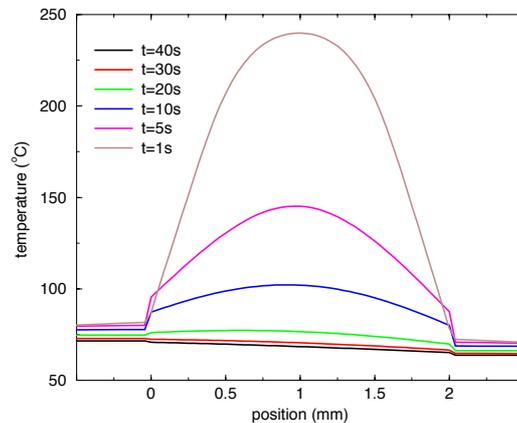


Figure 5.52 : *Évolution des températures dans le profil de la pièce*

Les figures 5.53 et 5.54 détaillent quant à elles l'évolution des lames d'air au cours du temps sur l'ensemble de la pièce. On remarque que la partie inférieure, entièrement refroidie au moment du compactage du fait de l'effet de coin, emplit toute la largeur de la cavité. La pièce se décolle du fond du moule d'environ  $10 \mu\text{m}$ .

La partie supérieure est bloquée dans son retrait par la présence du seuil d'injection qui maintient fermement la pièce. Seules les couches extérieures peuvent se contracter ; elles atteignent rapidement leur température froide et le retrait s'arrête.

Mis à part ces effets de bords, le retrait global est uniforme mais la pièce se déforme dans sa partie inférieure, prenant une forme en « S ».

Les figures 5.55 et 5.56 montrent la température d'interface du polymère correspondant à la distribution des lames d'air précédemment évoquées. On note sans surprise que la température du polymère est plus basse quand la résistance thermique est plus faible et le contact thermique meilleur.

La figure 5.57 montre l'évolution de la température au centre de la pièce par rapport aux températures de surface.

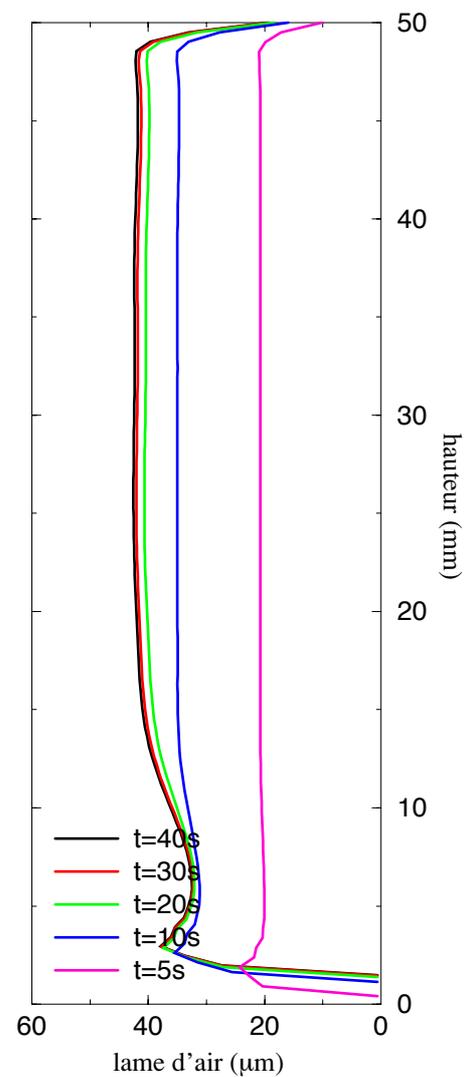
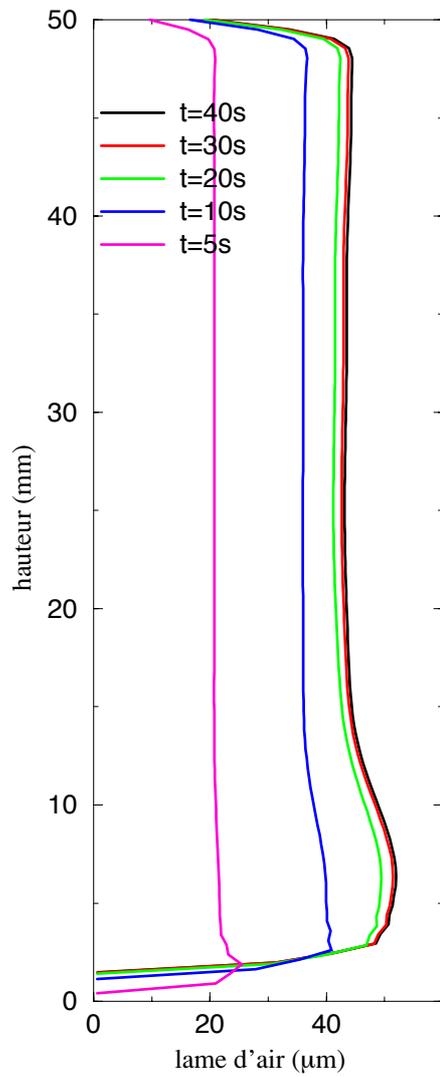


Figure 5.53 : Épaisseur des lames d'air –  
côté gauche

Figure 5.54 : Épaisseur des lames d'air –  
côté droit

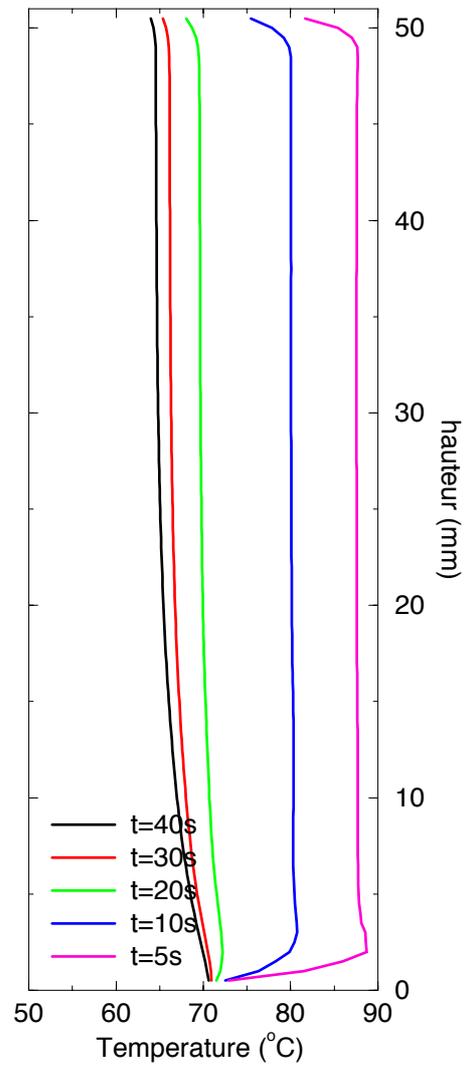
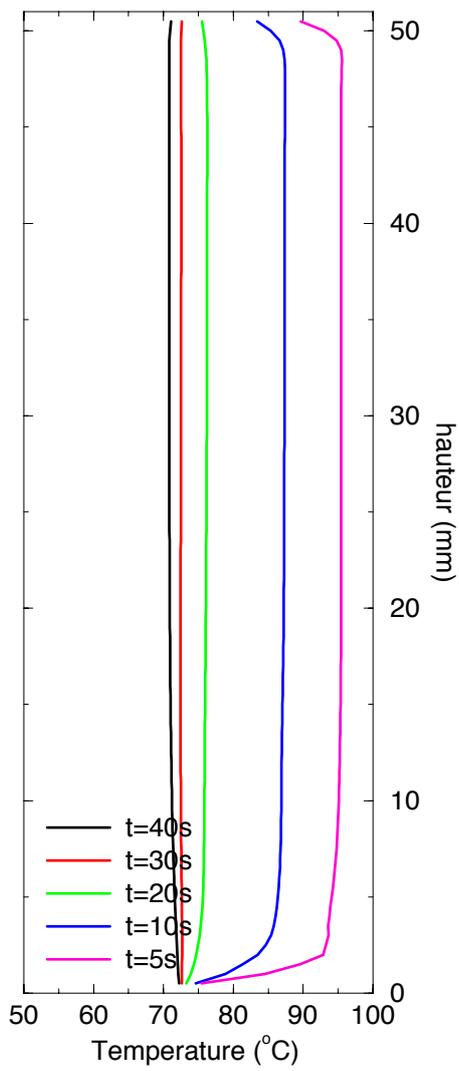


Figure 5.55 : *Évolution des températures – côté droit* – Figure 5.56 : *Évolution des températures – côté gauche*

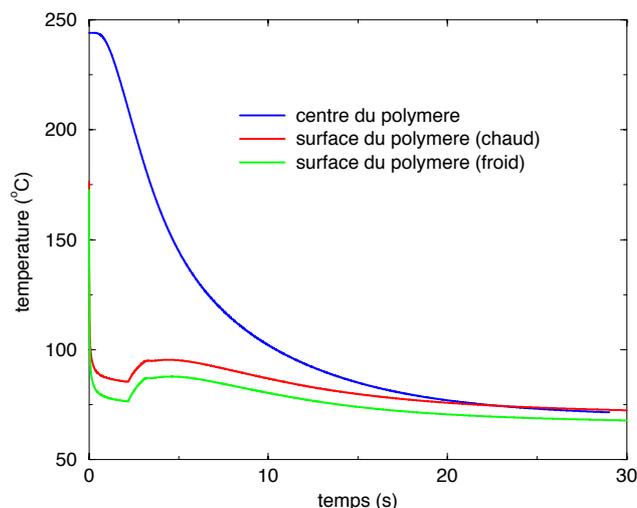


Figure 5.57 : *Évolution des températures*

## 5.5 Conservation de la masse

Le suivi de l'évolution de la masse dans le moule est un excellent moyen de vérifier la réalité physique des résultats obtenus. En effet, les déplacements calculés par le code nous donnent en fait le volume de la pièce. Si l'on obtient une masse correcte, dans un environnement où température et pression sont variables, cela signifie que les caractéristiques thermomécaniques sont correctement évaluées et que le diagramme PVT est bien résolu. Cette grandeur macroscopique permet donc de s'assurer que le volume de la pièce, et par conséquent l'épaisseur des lames d'air, est correctement évalué en moyenne sur l'ensemble du domaine de calcul.

Cependant, la nature de l'hypothèse des petites perturbations entraîne une erreur systématique dès lors que les mouvements ne s'effectuent pas autour de l'état initial. Il est alors nécessaire d'effectuer une correction des paramètres physiques en fonction des variations volumiques (cf. section 2.7.5).

Si cette correction n'est pas appliquée, cela conduit dans notre cas à une perte de masse de plus de 80 % ! Une telle erreur remettrait totalement en cause la validité de nos résultats.

Cependant, la méthode que nous utilisons ramène l'erreur sur la masse à moins de 5 %,

ce qui est très satisfaisant et montre que le couplage entre les équations et le diagramme PVT est bien pris en compte (cf. figure 5.58).

Le calcul numérique de la masse de la pièce est effectué à partir de celui du volume (cf. équation 2.103). Connaissant la masse volumique et le volume dans chaque maille, on calcule la masse de la pièce<sup>6</sup>.

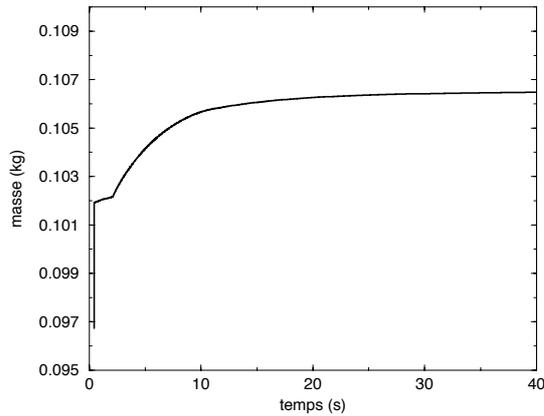


Figure 5.58 : Variations de la masse au cours du temps – empreinte de 2 mm

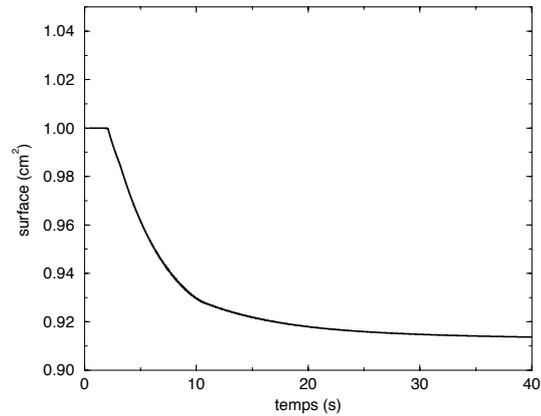


Figure 5.59 : Variations du « volume » au cours du temps – empreinte de 2 mm

On voit sur cette figure l'augmentation de masse initiale due au compactage. Il est intéressant d'observer que nous n'agissons pas directement sur la variation de masse. Il suffit en effet d'augmenter la pression à volume constant – celui de l'empreinte – et à température constante<sup>7</sup> pour que la résolution du diagramme PVT impose automatiquement une augmentation de masse dans la cavité. Il nous est ainsi possible d'évaluer la quantité de matière injectée dans le moule lors de la phase de compactage<sup>8</sup>.

Nous présentons par ailleurs sur la figure 5.59 l'évolution du volume de la pièce au cours du temps.

6. Le calcul étant bidimensionnel, le volume de la pièce est en fait une surface.

7. En réalité la température varie légèrement du fait du caractère piézodépendant de certaines caractéristiques.

8. La valeur expérimentale n'est malheureusement pas disponible.

## 5.6 Conclusion

Nous présentons dans ce chapitre les résultats obtenus par notre code de calcul et nous les comparons aux résultats expérimentaux. Cette partie expérimentale s'appuie sur des mesures précises recueillies par des capteurs de flux performants développés par l'équipe Nantaise. Une puissante analyse par méthode inverse permet de tirer des mesures de flux de nombreuses valeurs comme les températures de surface du polymère, les résistances thermiques ou le profil de température initial de la pièce.

Le calcul sur la pièce de 3 mm nous permet de comparer simulation numérique et expérience sur un cas sans décollement. L'estimation des résistances thermiques tenant compte du couplage thermomécanique, associée à une bonne modélisation du comportement élastique, ainsi que la prise en compte des conditions de régulation thermique appliquées au moule permettent d'obtenir de bons résultats.

Dans le cas de la pièce de 2 mm notre objectif était de comprendre ce qui se passait dans le moule et d'essayer de le reproduire numériquement. Nous avons pour cela effectué de nombreux calculs en variant les conditions thermiques sans obtenir le « battement » recherché. Nous avons cependant observé des déformations de la pièce dans le moule et obtenu un bon accord simulation – expérience sur plusieurs points. Citons parmi eux le saut de température au moment du décollement, le temps auquel il se produit ainsi l'épaisseur des lames d'air calculées (validées par la valeur des résistances thermiques).

Le battement est un phénomène complexe, qui semble faire intervenir d'autres phénomènes que ceux purement thermiques. Les enregistrements montrent en effet un mouvement extrêmement rapide qui peut difficilement être expliqué par les seules variations de température. Nous nous orientons actuellement vers un phénomène de ventouse provoqué par le refroidissement de l'air dans les porosités du moule qui collerait la pièce à la paroi lisse du moule. Au moment de la solidification, les contraintes internes pourraient supprimer cet effet et la pièce se déplacerait alors brusquement vers le centre du moule.

## Conclusion générale

Le procédé de moulage par injection a pris une importance considérable sur le marché de la mise en forme des polymères. Cependant, l'optimisation du fonctionnement des équipements se heurte actuellement à un manque de connaissance des phénomènes physiques qui interviennent dans ce procédé.

L'étude présentée dans ce mémoire a permis de mettre au point un outil numérique performant, capable de simuler les phénomènes complexes et fortement couplés qui sont mis en jeu. La méthodologie développée est basée sur la méthode des volumes finis, aussi bien pour la résolution des équations de la mécanique des fluides, que des solides ou des transferts thermiques. Cette approche homogène et originale nous permet un traitement aisé des nombreux phénomènes couplés.

En effet, si la méthode des volumes finis constitue une approche naturelle pour la discrétisation des équations de la mécanique des fluides ou de la thermique, son introduction dans le cadre de la mécanique des solides est récente. Nous avons ainsi pu obtenir un module de calcul de thermoélasticité, auquel sont venus s'ajouter des techniques que nous avons développées afin de conserver la masse ou gérer le contact moule-pièce par exemple.

La connaissance des contraintes thermomécaniques prenant naissance lors de la solidification est déterminante pour le contrôle du procédé et la maîtrise de la qualité du matériau formé. En effet, ces contraintes peuvent provoquer des déformations irréversibles au sein des pièces et compromettre la valeur des spécifications de fabrication. Il est donc intéressant de pouvoir les simuler numériquement afin d'agir sur leurs origines et ainsi limiter leurs conséquences.

Les résultats obtenus sur des études académiques ont confirmé la viabilité de cette approche thermoélastique couplée en volumes finis, qui constitue ainsi une alternative

aux techniques habituellement utilisées, telles que les éléments finis.

Notre approche s'est principalement axée sur le refroidissement d'un polymère amorphe. L'absence de rejet de chaleur latente lors de la solidification de ces matériaux rend la prise en compte d'un changement de phase inutile. Cependant, cette technique existe au laboratoire et peut être appliquée pour des polymères semi-cristallins par exemple.

La phase d'injection a également une grande importance dans la détermination des conditions initiales thermiques à prendre en compte au moment d'étudier le refroidissement. Comme nous l'avons vu, la méconnaissance de la température dans le moule à la fin de l'injection ne permet pas d'obtenir une évolution thermique satisfaisante.

Toutefois, les problèmes rencontrés sont complexes et nombreux ; il est donc nécessaire de permettre une évolution facile de notre code de calcul. Pour cela, nous avons choisi de mettre en place une architecture modulaire organisée autour d'une structure qui prend en compte toutes les phases du processus, de l'injection au démoulage. Cette technique devra favoriser le développement de modules spécifiques (modèles rhéologiques tant solides que fluides, géométries de moules, techniques de refroidissement,...) sans avoir à redévelopper le reste du code. Cette évolutivité est destinée à faciliter et harmoniser les développements ultérieurs.

La collaboration avec la laboratoire de thermocinétique de l'École Polytechnique Universitaire de Nantes dans le cadre du réseau de laboratoires « amélioration des échanges thermiques » (AmETh) a permis d'unir nos différentes compétences vers un but commun grâce aux nombreux échanges que nous avons eu au cours de ces trois années. Cette collaboration a été profitable aux deux laboratoires et nous a permis de répondre à certaines questions posées (peut on modéliser le refroidissement, le mouvement de la pièce, respecter le diagramme PVT?) et d'entrevoir des solutions à des problèmes précis (battement de la pièce, contraintes résiduelles...).

Les perspectives de cette étude sont nombreuses et touchent plusieurs domaines de compétences. Une étude comparative des différents modèles rhéologiques des fluides est actuellement à l'étude au laboratoire dans le cadre d'un DEA. Des évolutions au niveau du modèle de rhéologie des solides peuvent également être envisagées. Certains auteurs utilisent des lois viscoélastiques ou viscoplastiques qui permettent de modéliser plus finement le comportement des polymères solides. La transition rhéologique fondu – solide est

également une question qui reste ouverte.

L'étude de polymères semi-cristallins est certainement intéressante. Les phénomènes de croissance de sphérolites et la présence d'une « vraie » fusion posent des questions pointues au niveau thermique. De la même façon l'étude d'un polymère chargé de fibres peut être entreprise avec cette fois la présence de phénomènes d'orientations.

Le remplissage du moule peut maintenant être envisagé, et pourquoi pas couplé avec les déplacements dus aux phénomènes thermomécaniques. Cela permettrait d'obtenir un outil complet et homogène, bien que certainement fort complexe.

La physique du problème étant désormais mieux comprise, un passage aux cas tridimensionnel permettra d'aborder d'une manière plus complète le remplissage du moule et les phénomènes thermomécaniques complexes, afin d'aboutir à un code tridimensionnel capable de modéliser le moulage de pièces complexes. Cependant, sans aller jusqu'à un code industriel, les modèles que nous avons développés pourraient être intégrés dans les codes commerciaux déjà existants.



# Annexe A

## Thermodynamique

Pour définir les relations qui régissent les phénomènes thermiques et mécaniques, il est nécessaire d'introduire, au préalable, quelques notions essentielles de thermodynamique.

### A.1 Rappels et définitions

Un système thermodynamique  $\Sigma$  est, de façon générale, une portion de l'Univers parfaitement déterminée où se produisent les transformations à étudier. La frontière  $\Gamma$  sépare ce système du milieu extérieur (Figure A.1).

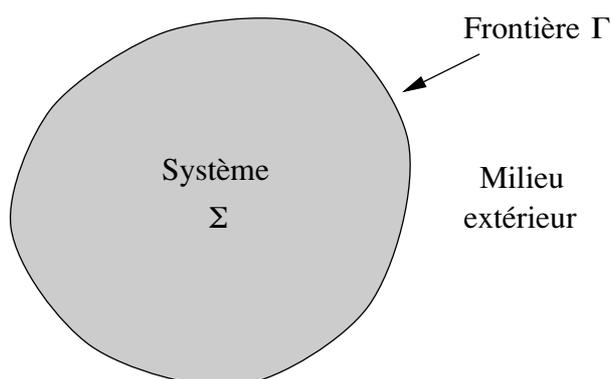


Figure A.1 : Représentation schématique d'un système thermodynamique.

La thermodynamique étudie les transformations qui ont lieu à l'intérieur de  $\Sigma$ , en dressant le bilan des échanges d'énergie et de matière entre le système et le milieu extérieur.

Ces échanges peuvent avoir une origine thermique, mécanique, électrique, chimique, etc. Quand il n'y a que des échanges d'énergie, le système est dit *fermé*. Quand il y a, de plus, des échanges de matière, il est dit *ouvert*. Quand il n'y a aucun échange, il est qualifié d'*isolé*.

L'état d'un système est défini par les valeurs d'un certain nombre de grandeurs macroscopiques mesurables dites *variables thermodynamiques* ou *variables d'état* (par exemple : température, pression, viscosité, densité, énergie interne, volume,...). Or, il existe des relations entre toutes ces grandeurs. Il apparaît alors la notion de *paramètres indépendants* qu'il nous faut choisir judicieusement.

Nous considérons donc un système homogène et déformable, assimilable à un milieu continu constitué d'éléments de matière infiniment petits et appelés particules. Un tel système est caractérisé par deux variables d'état indépendantes qui sont la température absolue  $T$  et la masse volumique  $\rho$ . Toutes les autres variables d'état seront obtenues à partir d'*équations d'état* (par exemple, la pression s'écrit  $p = p(\rho, T)$ ).

Dans le cas général, il n'y a que deux variables indépendantes mais il peut en exister davantage selon le type de problème.

La transformation réelle d'un système peut être considérée comme le passage d'un état d'équilibre  $e_1$  à un autre état d'équilibre  $e_2$  s'accompagnant d'un échange d'énergie avec le milieu extérieur. Généralement, ces états successifs par lesquels passe  $\Sigma$  ne sont pas des états d'équilibre. En thermodynamique, des transformations théoriques permettent de passer de l'état  $e_1$  à l'état  $e_2$  par une succession d'états d'équilibre. Une telle transformation est dite *transformation réversible*. D'une manière générale, les transformations réelles sont *irréversibles*. Cependant, le calcul de certaines fonctions relatives à des transformations irréversibles peut se faire à partir de transformations réversibles. Ceci constitue l'intérêt pratique des transformations réversibles pour résoudre un grand nombre de problèmes.

## A.2 Premier principe de la thermodynamique

Ce principe a été énoncé clairement en 1845 par le médecin allemand J. R. von Mayer (1814–1878). Il concerne les systèmes *fermés*, c'est-à-dire les systèmes qui ne peuvent échanger que de l'énergie avec le milieu extérieur. Ce premier principe, écrit sous forme

différentielle dans le cas des transformations infiniment petites, s'énonce, sous la forme d'un bilan énergétique, de la façon suivante : « la somme des énergies mécanique et thermique reçues du milieu extérieur par un système au cours d'une transformation quelconque (réversible ou irréversible) est égale à la variation de son énergie interne ». Nous avons donc la relation :

$$de = \delta W + \delta Q \quad (\text{A.1})$$

où  $de$  est la variation d'énergie interne massique de  $\Sigma$ . Les quantités  $\delta W$  et  $\delta Q$  désignent respectivement les énergies mécanique et thermique échangées entre  $\Sigma$  et le milieu extérieur entre l'état initial et l'état final de la transformation.

### A.3 Deuxième principe de la thermodynamique

Le travail et la chaleur sont des formes d'énergie dont les possibilités de transformation ne sont pas symétriques (irréversibilité). La particularité de l'énergie calorifique, par rapport aux autres formes d'énergie, fait l'objet du deuxième principe de la thermodynamique. Il postule l'existence d'une fonction d'état  $s$ , appelée *entropie*, qui vérifie la relation suivante [Germain 73] :

$$ds - \frac{\delta Q}{T} \geq 0 \quad (\text{A.2})$$

Il n'y a égalité, dans cette équation, que dans le cas d'un processus réversible.

L'entropie a un caractère abstrait car elle n'apparaît pas physiquement de façon évidente. Elle peut être créée tout en restant indestructible. Une création d'entropie correspond à un processus irréversible, une « non création » à une transformation réversible.

Les irréversibilités peuvent avoir une origine interne (frottements atomiques ou électroniques,...) ou externe (irréversibilité des échanges avec le milieu extérieur,...).

## A.4 Enthalpie

Outre l'énergie interne  $e$  et l'entropie  $s$ , la thermodynamique fait souvent intervenir une autre fonction d'état : l'*enthalpie massique*<sup>1</sup>, notée  $h$ . La fonction enthalpie d'un fluide homogène est définie par la relation :

$$h = e + pv \quad (\text{A.3})$$

où les termes  $p$  et  $v$  désignent respectivement la pression et le volume massique du système.

L'enthalpie a la dimension d'une énergie. Comme l'énergie interne, elle n'est définie qu'à une constante près, ce qui ne pose guère de problème dans la mesure où seule sa variation entre l'état initial et l'état final nous intéresse.

L'énergie calorifique échangée par  $\Sigma$  avec le milieu extérieur lors d'une transformation isobare est égale à la variation d'enthalpie au cours de cette transformation.

## A.5 Coefficients calorimétriques

Les fonctions thermodynamiques sont des fonctions énergétiques associées à des ensembles déterminés de variables. Lorsque l'état d'un système est caractérisé par deux variables, par exemple, l'entropie  $s$  et le volume massique  $v$ , le système est dit divariant :  $e = e(s, v)$ . Nous en déduisons l'expression de la différentielle  $de$  :

$$de = Tds - pdv \quad (\text{A.4})$$

avec

$$T = \left( \frac{\partial e}{\partial s} \right)_v, \quad p = - \left( \frac{\partial e}{\partial v} \right)_s \quad \text{et} \quad \left( \frac{\partial T}{\partial v} \right)_s = - \left( \frac{\partial p}{\partial s} \right)_v \quad (\text{A.5})$$

Comme toutes les fonctions d'état, l'entropie dépend de deux variables indépendantes. Dans le cas d'un corps pur homogène, nous pouvons écrire successivement, en utilisant respectivement les couples de variables  $(T, v)$  et  $(T, p)$  :

$$s = s(T, v) = s(T, p) \quad (\text{A.6})$$

---

1. Ce nom, introduit vers les années 1930 par le physicien des basses températures K. Onnes, vient du grec « thalpein » qui signifie chauffer.

La dérivation de  $s$  par rapport aux variables choisies donne successivement :

$$ds = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_p dT + \left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T dp \quad \text{et} \quad ds = \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_v dT + \left( \frac{\partial s}{\partial v} \right)_T dv \quad (\text{A.7})$$

Dans le cas d'un processus réversible, l'échange de chaleur entre le système  $\Sigma$  et le milieu extérieur s'écrit :

$$\delta Q = T ds \quad (\text{A.8})$$

Nous pouvons donc écrire  $\delta Q$  sous les formes suivantes, faisant ainsi apparaître quatre coefficients appelés *coefficients calorimétriques* [Rhyming 85] :

$$\delta Q = T ds = C_v dT + l dv \quad \text{où} \quad C_v = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_v \quad \text{et} \quad l = T \left( \frac{\partial s}{\partial v} \right)_T \quad (\text{A.9})$$

$$\delta Q = T ds = C_p dT + \bar{h} dp \quad \text{où} \quad C_p = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_p \quad \text{et} \quad \bar{h} = T \left( \frac{\partial s}{\partial p} \right)_T \quad (\text{A.10})$$

Les coefficients  $C_v$  et  $C_p$  désignent respectivement la capacité calorifique à volume constant et à pression constante. Ils représentent la chaleur nécessaire pour faire varier d'une quantité  $dT$  la température du système, de façon réversible, les variables  $v$  et  $p$  étant maintenues constantes. Pour mémoire,  $\bar{h}$  est la chaleur latente massique de compression et  $l$  la chaleur latente massique de dilatation.



## Annexe B

# Écoulement de Poiseuille pseudoplastique (loi puissance)

Le cas considéré ici est l'écoulement bidimensionnel d'un fluide pseudoplastique (en loi puissance) entre deux plans parallèles infinis. Le mouvement est généré par un gradient de pression  $\Delta p$ .

On peut formuler l'hypothèse d'écoulement unidirectionnel, ce qui permet d'écrire la vitesse sous la forme  $u = u(y)$ ; le tenseur des vitesses de déformation est alors :

$$\left(\overline{\overline{D}}\right) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \frac{du}{dy} \\ \frac{1}{2} \frac{du}{dy} & 0 \end{pmatrix}$$

La loi rhéologique d'Ostwald, également appelée loi puissance s'écrit :

$$\left(\overline{\overline{\sigma}}\right) = -p\overline{\overline{1}} + 2K\dot{\gamma}^{n-1} \left(\overline{\overline{D}}\right)$$

En développant l'expression précédente à l'aide du tenseur des vitesses de déformations, on obtient :

$$(\bar{\sigma}) = \begin{pmatrix} -p & K \left( \frac{du}{dy} \right)^n \\ K \left( \frac{du}{dy} \right)^n & -p \end{pmatrix}$$

Par ailleurs, l'équation d'équilibre s'écrit classiquement sous la forme :

$$\nabla \cdot \bar{\sigma} = 0$$

Ce qui conduit aux deux équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial x} &= K \frac{d}{dy} \left[ \left( \frac{du}{dy} \right)^n \right] \\ \frac{\partial p}{\partial y} &= 0 \rightarrow p = p(x) \end{aligned}$$

Or le gradient de pression suivant l'axe  $x$  est constant. On peut donc écrire la relation précédente sous la forme :

$$\frac{dp}{dx} = K \frac{d}{dy} \left[ \left( \frac{du}{dy} \right)^n \right] = Cte = \frac{\Delta p}{L}$$

avec  $\Delta p < 0$

En intégrant cette relation par rapport à la variable  $y$ , on obtient :

$$\frac{du}{dy} = \left( \frac{\Delta p}{KL} |y| + A \right)^{\frac{1}{n}}$$

Par ailleurs, l'hypothèse de symétrie axiale du profil entraîne :

$$\left. \frac{du}{dy} \right|_{y=0} = 0 \Rightarrow A = 0$$

En intégrant à nouveau par rapport à  $y$ , on trouve :

$$u(y) = \frac{n}{n+1} \frac{KL}{\Delta p} \left( \frac{\Delta p}{KL} |y| \right)^{\frac{n+1}{n}} + B$$

L'hypothèse d'adhérence du fluide à la paroi se traduit par une vitesse nulle, ce qui s'écrit :

$$u\left(\frac{h}{2}\right) = 0$$

Ce qui permet de déterminer  $B$  :

$$B = -\frac{n}{n+1} \frac{KL}{\Delta p} \left( \frac{\Delta p h}{2KL} \right)^{\frac{n+1}{n}}$$

Nous obtenons finalement l'expression du profil de vitesse en fonction de l'indice de pseudoplasticité  $n$  et du gradient de pression  $\Delta p$  :

$$u(y) = \frac{n}{n+1} \frac{KL}{\Delta p} \left[ \left( \frac{h}{2} \right)^{\frac{n+1}{n}} - |y|^{\frac{n+1}{n}} \right]$$



## Annexe C

# Équation aux déplacements

Nous présentons dans cette annexe le développement de l'écriture de l'équation aux déplacements que nous utilisons :

$$\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U}) + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] - \nabla (\beta \tau) = \mathbf{0}$$

### C.1 Écriture bidimensionnelle

#### C.1.1 Terme $\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)]$

$$\nabla \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\nabla \mathbf{U}^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\nabla \cdot a_{ij} = \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_j}$$

$$\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] = \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} + \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{pmatrix}$$

### C.1.2 Terme $\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U})$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right) \end{pmatrix}$$

### C.1.3 Équation finale

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left( (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \Phi_1 \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \Phi_2 \end{cases}$$

## C.2 Écriture tridimensionnelle

### C.2.1 Terme $\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)]$

$$\nabla \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\nabla \mathbf{U}^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial z} & \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{a}_{ij} = \frac{\partial a_{ij}}{\partial x_j}$$

$$\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] = \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} + \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} + \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial x} + \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial y} + \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{pmatrix}$$

### C.2.2 Terme $\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U})$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$\nabla (\lambda \nabla \cdot \mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{pmatrix}$$

### C.2.3 Équation finale

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} ((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \Phi_1 \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) = \Phi_2 \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( (\lambda + 2\mu) \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) = \Phi_3 \end{cases}$$



## Annexe D

# Algorithme de résolution : gradient conjugué

Considérons le système linéaire  $Ax = b$  de rang  $N$  quelconque. Partant d'un  $x_0$  initial, les itérations de gradient conjugué sont répétées jusqu'à ce que le résidu (noté  $r_k$ ) soit inférieur à une valeur donnée. Une description de cet algorithme est présentée ci-dessous.

Cette méthode itérative, basée essentiellement sur des produits matrice-vecteur, est particulièrement bien vectorisable. Il semble par ailleurs judicieux de stocker les diagonales non nulles ainsi que les seconds membres sous la forme de vecteurs colonnes avant d'effectuer la résolution. Cela permet en effet d'économiser une partie conséquente de la mémoire compte tenu de la structure creuse de nos systèmes et d'améliorer la vitesse des calculs en évitant des opérations faisant intervenir des termes nuls.

Initialisation	$r_0 = b - x_0$ $q_0 = r_0$ $r_0 = r_0$
Pour $k \leq 1$	$\omega_k = \frac{(p_0, r_k)}{(p_0, Aq_k)}$ $s_k = r_k - \omega_k Aq_k$ $\alpha_k = \frac{(As_0, s_k)}{(As_k, As_k)}$ $x_{k+1} = x_k + \omega_k q_k + \alpha_k s_k$ $r_{k+1} = s_k - \alpha_k As_k$ $\beta_{k+1} = \frac{(p_0, r_{k+1})}{(p_0, r_k)}$ $\omega_{k+1} = \frac{\beta_{k+1} \omega_k}{\alpha_k}$ $q_{k+1} = r_{k+1} + \omega_{k+1} (q_k - \alpha_k Aq_k)$

## Annexe E

# Thermique et contact imparfait

Le résultat de ce problème de conduction est présenté dans la thèse de Ph. Le Bot. Cependant, une erreur typographique nous a conduit à recalculer cette solution, que nous présentons ici *in extenso*.

L'équation de l'énergie monodimensionnelle dans deux domaines semi-infinis s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{E.1})$$

où  $a$  est la diffusivité thermique.

En appliquant la transformation de Laplace à (E.1) et en tenant compte du fait que la température initiale est constante dans chaque domaine :

$$\frac{\partial^2 T_{d,g}^*}{\partial x^2} - \frac{p}{a_{d,g}} T_{d,g}^* = -\frac{T_{d,g}^0}{a_{d,g}} \quad (\text{E.2})$$

où  $T_{d,g}^0$  et  $T_{d,g}^*$  sont respectivement la température initiale et la transformée de Laplace de la température dans chaque milieu (*droite* et *gauche*).

La solution de (E.2) s'écrit de façon classique après intégration :

$$T_{d,g}^*(x, p) = Ae^{-\sqrt{\frac{p}{a_{d,g}}}x} + Be^{\sqrt{\frac{p}{a_{d,g}}}x} + \frac{T_{d,g}^0}{p} \quad (\text{E.3})$$

Or, quelque soit  $t$  la température pour  $x = \pm\infty$  reste bornée ce qui permet d'écrire :

$$\begin{cases} T_g^*(x, p) = Be^{\sqrt{\frac{p}{a_g}}x} + \frac{T_g^0}{p} \\ T_d^*(x, p) = Ae^{-\sqrt{\frac{p}{a_d}}x} + \frac{T_d^0}{p} \end{cases} \quad (\text{E.4})$$

Il est également possible d'écrire l'égalité des flux à l'interface en terme de différences de température et de résistance thermique :

$$-\lambda_d \frac{\partial T_d}{\partial x} \Big|_{x=0} = -\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{T_g(x=0, t) - T_d(x=0, t)}{R} \quad (\text{E.5})$$

Le passage dans l'espace de Laplace de cette expression, et en utilisant (E.4) permet d'obtenir :

$$-\lambda_g \sqrt{\frac{p}{a_g}} B = \lambda_d \sqrt{\frac{p}{a_d}} A = \frac{1}{R} \left( B + \frac{T_g^0}{p} - A - \frac{T_d^0}{p} \right) \quad (\text{E.6})$$

Ce qui peut également s'écrire de la façon suivante :

$$-b_g \sqrt{p} B = b_d \sqrt{p} A = \frac{1}{R} \left( -\frac{b_d}{b_g} A - A + \frac{T_g^0 - T_d^0}{p} \right) = \frac{1}{R} \left( B + \frac{b_g}{b_d} B + \frac{T_g^0 - T_d^0}{p} \right) \quad (\text{E.7})$$

avec  $b_i = \sqrt{\rho_i C_{p_i} \lambda_i}$  : effusivité du milieu  $i$ .

La résolution de cette équation permet d'obtenir le système suivant :

$$\begin{cases} A \left( R b_d \sqrt{p} + \left( 1 + \frac{b_d}{b_g} \right) \right) = \frac{T_g^0 - T_d^0}{p} \\ B \left( -R b_g \sqrt{p} - \left( 1 + \frac{b_g}{b_d} \right) \right) = \frac{T_g^0 - T_d^0}{p} \end{cases} \quad (\text{E.8})$$

On obtient finalement les distributions de températures dans l'espace de Laplace grâce à (E.4) :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_g^*(x, p) = \frac{T_d^0 - T_g^0}{Rb_g p \left( \sqrt{p} + \frac{1}{Rb_g} + \frac{1}{Rb_d} \right)} e^{\sqrt{\frac{p}{a_g}} x} + \frac{T_g^0}{p} \\ T_d^*(x, p) = \frac{T_g^0 - T_d^0}{Rb_d p \left( \sqrt{p} + \frac{1}{Rb_g} + \frac{1}{Rb_d} \right)} e^{-\sqrt{\frac{p}{a_d}} x} + \frac{T_d^0}{p} \end{array} \right. \quad (\text{E.9})$$

En appliquant la transformation de Laplace inverse (E.10) à (E.9), on aboutit à la distribution de températures dans l'espace réel (E.11).

$$L^{-1} \left[ \frac{a}{p(\sqrt{p} + a)} e^{(-k\sqrt{p})} \right] = -e^{ak} e^{a^2 t} \operatorname{erfc} \left( a\sqrt{t} + \frac{k}{2\sqrt{t}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{k}{2\sqrt{t}} \right) \quad (\text{E.10})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T_g(x, t) = T_g^0 + \frac{(T_d^0 - T_g^0)b_d}{b_d + b_g} \left[ -e^{\left( \frac{-hx}{\sqrt{a_g}} + h^2 t \right)} \operatorname{erfc} \left( h\sqrt{t} - \frac{x}{2\sqrt{a_g t}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{-x}{2\sqrt{a_g t}} \right) \right] \\ T_d(x, t) = T_d^0 + \frac{(T_g^0 - T_d^0)b_g}{b_d + b_g} \left[ -e^{\left( \frac{hx}{\sqrt{a_d}} + h^2 t \right)} \operatorname{erfc} \left( h\sqrt{t} + \frac{x}{2\sqrt{a_d t}} \right) + \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{a_d t}} \right) \right] \end{array} \right. \quad (\text{E.11})$$

$$\text{avec } h = \frac{b_d + b_g}{R(b_d + b_g)}.$$



# Bibliographie

- [Abadie 98] S. ABADIE. *Modélisation numérique du déferlement plongeant par méthode VOF*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1998.
- [Agassant 97] J. F. AGASSANT, P. AVENAS, J. P. SERGENT, B. VERGNES & M. VINCENT. *La mise en forme des matières plastiques*. Lavoisier, 1997.
- [Aggarwala 61] B. D. AGGARWALA & E. SAIBEL. *Tempering stresses in an infinite glass plate*. *Phys. Chem. Glasses*, vol. 2, n° 5, p. 137–140, octobre 1961.
- [Angot 89] PH. ANGOT. *Contribution à l'étude des transferts thermiques dans les systèmes complexes. Application aux composants électroniques*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1989.
- [Ashgriz 91] N. ASHGRIZ & J.Y. POO. *FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction*. *J. Comput. Phys.*, vol. 93, p. 449–468, 1991.
- [Baaijens 91] F. P. T. BAAIJENS. *Calculation of residual stresses in injection molded products*. *Rheol. Acta.*, vol. 30, p. 284–299, 1991.
- [Beck 85] J. V. BECK, B. BLACKWELL & C. A. ST CLAIR. *Inverse heat conduction - III - Posed problem*. Wiley & Sons, New York, 1985.
- [Bertrand 99] O. BERTRAND. *Phénomènes de ségrégation et contraintes thermomécaniques associées au processus de changement de phase solide-liquide*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1999.
- [Bidart 96] A. BIDART. *Compréhension et prédiction de l'aérodynamique interne d'un carter de moteur à essence*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1996.

- [Boitout 95] F. BOITOUT, J. F. AGASSANT & M. VINCENT. *Elastic calculation of residual stresses in injection molding*. Intern. Polym. Proc., vol. 10, p. 237–242, 1995.
- [Boley 60] B. A. BOLEY & J. H. WIENER. *Theory of thermal stresses*. Wiley, 1960.
- [Brackbill 92] J. U. BRACKBILL, D. B. KOTHE & C. ZEMACH. *A continuum method for modeling surface tension*. J. Comput. Phys., vol. 100, p. 335–354, 1992.
- [Caltagirone 99] J. P. CALTAGIRONE & J. BREIL. *Sur une méthode de projection vectorielle pour la résolution des équations de Navier–Stokes*. C. R. Acad. Sci. Paris, vol. 327, p. 1179–1184, 1999.
- [Carathéodory 09] C. CARATHÉODORY. *Untersuchungen über die Grundlagen der Thermodynamik*. Math. Annalen, vol. 67, p. 355–386, 1909.
- [Carslaw 56] H. S. CARSLAW & J. C. JAEGER. *Conduction of heat in solids*. Clarendon Press - Oxford, 1956.
- [Chiang 91a] H. H. CHIANG, C. A. HIEBER & K. K. WANG. *A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part. I: Formulation*. Polym. Eng. Sci., vol. 31, n° 2, p. 116–124, janvier 1991.
- [Chiang 91b] H. H. CHIANG, C. A. HIEBER & K. K. WANG. *A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part. II: Experimental verification*. Polym. Eng. Sci., vol. 31, n° 2, p. 125–139, janvier 1991.
- [Chiang 93] H. H. CHIANG, K. HIMASEKHAR, N. SANTHANAM & K. K. WANG. *Integrated simulation of fluid flow and heat transfer in injection molding for the prediction of shrinkage and warpage*. J. Eng. Mat. Tech., vol. 115, p. 37–47, janvier 1993.
- [Chorin 80] A.J. CHORIN. *Flame advection and propagation algorithms*. J. Comput. Phys., vol. 35, p. 1–11, 1980.

- [Chrysochoos 97] A. CHRYSOCHOOS & R. PEYROUX. *Couplages thermomécaniques dans les matériaux solides. Partie I: cadre thermodynamique, outils expérimentaux, essais et résultats*. Couplages thermomécaniques. S.F.T., juin 1997.
- [Crank 84] J. CRANK. *Free and moving boundary problems*. Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [Curnier 93] A. CURNIER. *Méthodes numériques en mécanique des solides*. Presses polytechniques et universitaires Romandes, 1993.
- [Daly 69] B.J. DALY. *A technique for including surface tension effects in hydrodynamic calculations*. J. Comput. Phys., vol. 4, p. 97–117, 1969.
- [Danilovskaya 52] V. I. DANILOVSKAYA. *Thermal stresses in an elastic half-space arising after a sudden heating of its boundary*. Prikl. Mat. Mekh., vol. 13, n° 3, p. 341–344, 1952.
- [DeBar 74] R. DEBAR. *Fundamentals of the KRAKEN code*. Technical report, 1974.
- [Delaunay 00] D. DELAUNAY. *Heat transfer in polymer processing: a difficult but necessary mastery*. Third European thermal-science conference, september 2000.
- [Demirdžić 93] I. DEMIRDŽIĆ & D. MARTINOVIĆ. *Finite volume method for thermo-elasto-plastic stress analysis*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol. 109, p. 331–349, 1993.
- [Demirdžić 94] I. DEMIRDŽIĆ & S. MUZAFERIJA. *Finite volume method for stress analysis in complex domains*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol. 37, p. 3751–3766, 1994.
- [Demirdžić 97] I. DEMIRDŽIĆ, S. MUZAFERIJA & M. PERIĆ. *Benchmark solutions of some structural analysis problems using finite – volume method and multigrid acceleration*. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., vol. 40, p. 1893–1908, 1997.

- [Denizart 90] O. DENIZART. *Contraintes résiduelles dans les pièces injectées en thermoplastique: approche expérimentale et modélisation*. Thèse de doctorat, E.N.S. des Mines de Paris, 1990.
- [Duhamel 37] J. M. C. DUHAMEL. *Second mémoire sur les problèmes thermo-mécaniques*. Journal de l' école polytechnique, vol. 15, n° 25, p. 1–57, 1837.
- [Eduljee 89] R. F. EDULJEE, J. W. GILLESPIE & R. L MCCULLOUGH. *Prediction of process induced thermal residual stresses in injection molded composites*. J. Thermoplast. Compos. Mater., vol. 2, p. 319–333, octobre 1989.
- [Eduljee 94] R. F. EDULJEE, J. W. GILLESPIE & R. L MCCULLOUGH. *Residual stress development in neat poly(etheretherketone)*. Polym. Eng. Sci., vol. 34, n° 6, p. 500–506, mars 1994.
- [Fortin 82] M. FORTIN & R. GLOWINSKI. Méthode de lagrangien augmenté. Application à la résolution numérique des problèmes aux limites. Collection méthodes mathématiques de l'informatique. Dunod, Paris, 1982.
- [Fukai 95] J. FUKAI, D. DHIIBA, T. YAMAMOTO, O. MIYATABE, D. POULIKAKOS, C. M. MEGARIDIS & Z. ZHAO. *Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a free surface: experiment and modeling*. Phys. Fluid., vol. 7, n° 2, p. 236–247, 1995.
- [Germain 73] P. GERMAIN. Cours de mécanique des milieux continus. Masson, 1973.
- [Guyon 91] E. GUYON, J. P. HULIN & L. PETIT. Hydrodynamique physique. Interéditions/éditions du CNRS, 1991.
- [Harlow 65] F.H. HARLOW & J.E. WELCH. *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*. Phys. Fluids, vol. 8, n° 12, p. 2182–2189, 1965.
- [Hastenberg 92] C. H. V. HASTENBERG, P. C. WILDERVANCK & G. G. J. SCHENKINCK. *The measurement of thermal stresses distributions along the flow path in injection – molded flat plates*. Polym. Eng. Sci., vol. 32, n° 7, p. 506–515, avril 1992.

- [Hattel 95] J. H. HATTEL. *A control volume-based finite difference method for solving the equilibrium equations in terms of displacements*. Appl. Math. Modelling, vol. 19, p. 210–243, 1995.
- [Hirsch 90a] C. HIRSCH. *Computational for inviscid and viscous flows*. John Wiley and sons, 1990.
- [Hirsch 90b] C. HIRSCH. *Numerical computation of internal and external flows*. John Wiley and sons, 1990.
- [Hirt 81] C.W. HIRT & B.D. NICHOLS. *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*. J. Comput. Phys., vol. 39, p. 201–225, 1981.
- [Isayev 87] A. ISAYEV. *Injection and compression molding fundamentals*. Marcel Dekker, Inc, 1987.
- [Jacqmin 97] D. JACQMIN. *An energy approach to the continuum surface tension method*. AIAA paper 96-08058, 1997.
- [Khadra 90] K. KHADRA. *Méthodes de gradient conjugué préconditionné pour les grands systèmes linéaires non symétriques et méthodes de raffinement local*. Mémoire de DEA de mathématiques appliquées, 1990.
- [Krevelen 90] D. W. VAN KREVELEN. *Properties of polymers*. Elsevier, 1990.
- [Kwok 96] C. S. KWOK, LI TONG & J. R. WHITE. *Generation of large residual stresses in injection moldings*. Polym. Eng. Sci., vol. 36, n° 5, p. 651–657, mars 1996.
- [Lafranche 97] E. LAFRANCHE & J. PABIOT. *Tensions internes et orientations moléculaires générées lors du moulage par injection des thermoplastiques et leur incidence sur la déformation des pièces*. Thermique et élaboration des matériaux. S.F.T., juin 1997.
- [Lalaouna 92] S. LALAOUNA. *Étude du couplage entre les transferts thermiques et la cinétique de cristallisation d'un thermoplastique injecté*. Thèse de doctorat, Université de Nantes – ECN, 1992.

- [Lebaigue 99] O. LEBAIGUE, D. JAMET & B. MATHIEU. *Méthode du second gradient pour les interfaces liquide - vapeur*. Cours de l'école CEA-EDF-INRIA sur les problèmes de suivi d'interfaces, 1999.
- [Lebot 97] PH. LEBOT, H. MASSÉ, S. QUILLIET, O. BERTRAND, D. DELAUNAY & É. ARQUIS. *Analyses expérimentale et numérique des résistances thermiques de contact polymère - moule se développant lors de la solidification*. Activités du réseau de laboratoires AmETh. S.F.T., novembre 1997.
- [Lebot 98] PH. LEBOT. *Comportement thermique des semi-cristallins injectés. Application à la prédiction des retraits*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1998.
- [Leveque 90] R. J. LEVEQUE. Numerical methods for conservative laws. Lecture in mathematics, ETH Zurich, Birkhauser, 1990.
- [Li 95] J. LI. *Calcul d'interface par morceaux (piecewise linear interface calculation)*. C. R. Acad. Sci. Paris, vol. 320, p. 391–396, 1995.
- [Liu 96] S.-J. LIU. *Modeling and simulation of thermally induced stress and warpage in injection molded thermoplastics*. Polym. Eng. Sci., vol. 36, n° 6, p. 807–818, mars 1996.
- [Lötstedt 82] P. LÖTSTEDT. *A front tracking method applied to Burger's equation and two-phase porous flow*. J. Comput. Phys., vol. 47, p. 211–228, 1982.
- [Marchand 98] A. S. MARCHAND. *Étude de la résistance thermique de contact à l'interface de solides déformables en frottement : application aux procédés de forgeage*. Thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Lyon, 1998.
- [Massé 98] H. MASSÉ, PH. LE BOT, É. ARQUIS, D. DELAUNAY & S. QUILLIET. *Calcul des résistances de lame d'air à l'interface polymère-moule et des contraintes résiduelles apparaissant lors de la solidification et du refroidissement de pièces*. Thermique et environnement. Congrès annuel de la S.F.T., mai 1998.

- [Massé 99] H. MASSÉ, PH. LE BOT, É. ARQUIS & D. DELAUNAY. *Étude des évolutions de la température et des contraintes au sein d'une pièce en solidification*. Thermique et matériaux. Congrès annuel de la S.F.T., mai 1999.
- [Massé 00a] H. MASSÉ, D. DELAUNAY É. ARQUIS & G. POUTOT. *Coupling between thermal transfer and mechanical effects during the cooling of a polymer part in a moulding cavity*. Third European thermal-science conference, september 2000.
- [Massé 00b] H. MASSÉ, É. ARQUIS & G. POUTOT D. DELAUNAY. *Étude des effets thermomécaniques présents lors du refroidissement d'une pièce moulée*. Thermique et agroalimentaire. Congrès annuel de la S.F.T., mai 2000.
- [Mercier 00] M. MERCIER. *Étude de la modélisation de la phase de refroidissement en moulage par injection*. Rapport de DEA « polymères », 2000.
- [Meylheuc 89] L. MEYLHEUC. *Modélisation d'écoulements de fluides viscoélastiques par la méthode des volumes finis*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1989.
- [Millischer 00] A. MILLISCHER. *Transferts thermiques dans le procédé d'injection BMC (Bulk Moulding Compound)*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 2000.
- [Ni 93] S. J. NI & K. K. WANG. *An analytical and experimental study of warpage and shrinkage of an injection - molded part*. ANTEC Technical Papers, vol. 39, p. 1612–1617, 1993.
- [Nichols 73] B.D. NICHOLS & C.W. HIRT. *Calculating three-dimensionnal free surface flows in the vicinity of submerged and exposed structures*. J. Comput. Phys., vol. 12, p. 234–246, 1973.
- [Noh 76] W.F. NOH & P. WOODWARD. *SLIC (Simple Line Interface Calculations)*. Lecture Notes in Physics, vol. 59, p. 330–340, 1976.
- [Osher 88] S. OSHER & J.A. SETHIAN. *Fronts propagating with curvature-dependant speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*. J. Comput. Phys., vol. 79, p. 12–49, 1988.

- [Patankar 90] S. V. PATANKAR. Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere, 1990.
- [Peyret 83] R. PEYRET & T. D. TAYLOR. Computational methods for fluid flow. Springer Verlag, 1983.
- [Peyroux 97] R. PEYROUX & A. CHRYSOCHOOS. *Couplages thermomécaniques dans les matériaux solides. Partie II: couplages thermomécaniques et homogénéisation, quelques applications*. Couplages thermomécaniques. S.F.T., juin 1997.
- [Prigogine 99] I. PRIGOGINE & D. KONDEPUDI. Thermodynamique. éditions Odile Jacob, 1999.
- [Quilliet 98] S. QUILLIET. *Transferts thermiques à l'interface polymère-métal dans le procédé d'injection des thermoplastiques*. Thèse de doctorat, Université de Nantes, 1998.
- [Ramaswamy 87] B. RAMASWAMY & M. KAWAHARA. *Lagrangian finite element analysis applied to viscous free surface fluid flow*. Int. J. Numer. Methods Fluids, vol. 7, p. 953–984, 1987.
- [Rhyming 85] I. L. RHYMING. Dynamique des fluides. Presses polytechniques romandes, 1985.
- [Roux 94] P. ROUX. *Méthode des volumes finis en thermoélasticité. Application à l'homogénéisation des milieux composites*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1994.
- [Salençon 88] J. SALENÇON. Mécanique des milieux continus T.II. Ellipses, 1988.
- [Santhanam 92] N. SANTHANAM, H. H. CHIANG, K. HIMASEKHAR, P. TUSCHAK & K. K. WANG. *Postmolding and load-induced deformation analysis of plastic parts in the injection molding process*. Adv. Polym. Tech., vol. 11, n° 2, p. 77–89, 1991-92.
- [Shamsundar 88] N. SHAMSUNDAR & E. ROOZ. *Numerical methods for moving boundary problems*. In Handbook of numerical heat transfer, pages 747–786. Wiley-Interscience, 1988.

- [Simha 73] R. SIMHA, P. S. WILSON & O. OLABISI. . Kolloid-Z, vol. 2, page 402, 1973.
- [Struik 78] L. C. E. STRUIK. *Orientation effects and cooling stresses in amorphous polymers*. Polym. Eng. Sci., vol. 18, n° 10, p. 799–811, aout 1978.
- [Tait 88] P. G. TAIT. . Phys. Chem., vol. 2, n° 1, 1888.
- [Tamma 89] K. K. TAMMA & S. B. RAILKAR. *Evaluation of residual thermally induced stresses in the cooling of polymer melt via transfinite element computations*. Polym. Eng. Sci., vol. 29, n° 2, p. 100–106, janvier 1989.
- [Thebault 95] J. F. THEBAULT. *Modélisation des transports de constituants intervenant dans les écoulements diphasiques gaz - eau en milieu poreux*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1995.
- [Théodor 83] R. THÉODOR & P. LASCAUX. *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur*. T.1 et 2. Masson, 1983.
- [Vandervorst 92] H. A. VANDERVORST. *A fast and smoothly converging variant of the BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems*. SIAM J. Sci. Stat. Comp., vol. 13, n° 2, p. 631–644, 1992.
- [Vincent 99] S. VINCENT. *Modélisation d'écoulements incompressibles de fluides non-miscibles*. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 1999.
- [Vincent 00] S. VINCENT & É. ARQUIS. *Numerical modelling of cooling and solidification of molten particles impacting a solid substrate*. Eurotherm, septembre 2000.
- [Voller 90] V. R. VOLLER. *Fast implicit-difference method for the analysis of phase change problems*. Numerica Heat Transfer, vol. 17, p. 155–169, 1990.
- [Weiner 57] J. H. WEINER. *A uniqueness theorem for the coupled thermoelastic problem*. Quart. of Appl. Math., vol. 15, n° 1, p. 102–105, 1957.
- [Yee 87] H. C. YEE. *Upwind and symmetric shock-capturing schemes*. NASA, 1987.

- [Youngs 82] D.L. YOUNGS. Time-dependent multi-material flow with large fluid distorsion. In: K.M. Morton and J. Baines, numerical methods for fluid dynamics, london: academic press edition, 1982.
- [Yu 90] C. J. YU, J. E. SUNDERLAND & C. POLI. *Thermal contact resistance in injection molding*. Polym. Eng. Sci., vol. 30, n° 24, p. 1599–1606, decembre 1990.
- [Zaleski 95] S. ZALESKI. *Méthodes de simulation d'interfaces libres entre fluides*. École de printemps de mécanique des fluides numériques, juin 1995.
- [Zaleski 99] S. ZALESKI. *Computation of multiphase flow by volume of fluid and high-order front tracking method*. Cours de l'école CEA-EDF-INRIA sur les problèmes de suivi d'interfaces, 1999.



## **Couplages thermomécaniques lors de la solidification de matériaux polymères**

### **Résumé**

Les matières plastiques sont des matériaux qui montrent une variation de volume importante sous l'effet de variations de température, comme le montrent leurs diagrammes PVT. Lors de leur mise en forme par moulage, les pièces polymères peuvent se contracter au point de décoller des parois du moule. Il en résulte l'apparition d'une résistance thermique à l'interface moule-polymère qui peut modifier notablement à la fois la forme de la pièce et la cinétique de refroidissement. Par ailleurs, le piégeage de contraintes résiduelles lors du refroidissement joue un rôle important quant au respect des spécifications mécaniques de la pièce. Nous résolvons de façon couplée les équations de la mécanique des solides, de la thermique ainsi que l'équation d'État du polymère afin d'appréhender les phénomènes thermomécaniques se développant dans le procédé et de les comparer aux expériences menées en parallèle. L'écoulement du polymère est également modélisé par les équations de Navier-Stokes en utilisant une loi rhéologique d'Ostwald.

### **Mots clefs :**

Couplages thermomécaniques, contraintes résiduelles, moulage par injection, diagramme PVT, résistances thermiques de contact

## **Thermomechanical coupling during solidification of polymer materials**

### **Abstract**

Plastics are materials which show important volume variations when they undergo temperature changes. During the injection moulding process, polymer parts may shrink and so become unstuck from the mould wall. It drives then to the apparition of an air gap which may modify both the shape of the part and its cooling time. Besides, the creation of residual stresses is a key phenomenon which plays an important role towards the shape of the part. We solve the equations of energy, solid mechanics, and PVT diagram in a coupled way. This allows us to show the thermomechanical phenomena that occur during the process, and to compare results to the experiments we lead in parallel. The polymer flow during the filling of the mould is also modeled and solved using the Navier-Stokes equations with an Ostwald rheological law.

### **Keywords:**

Thermomechanical coupling, residual stresses, injection moulding, PVT diagram, thermal contact resistance