

Effets viscoélastiques 3D dans les contractions. Expérience et simulation.

Yvan Sirakov, Auder Ainsler, Mohamed Haouche, Jacques Guillet

► **To cite this version:**

Yvan Sirakov, Auder Ainsler, Mohamed Haouche, Jacques Guillet. Effets viscoélastiques 3D dans les contractions. Expérience et simulation.. Rhéologie et procédés de transformation (GFR 2005), Oct 2005, Nice, France. 337p + 1CD-Rom. ujm-00073873

HAL Id: ujm-00073873

<https://hal-ujm.archives-ouvertes.fr/ujm-00073873>

Submitted on 24 May 2006

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

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

Effets viscoélastiques 3D dans les contractions. Expérience et simulation.

Yvan Sirakov, Auder Ainsler, Mohamed Haouche, Jacques Guillet.

*Laboratoire de Rhéologie des Matières Plastiques-UMR CNRS 5156
Université Jean Monnet, Saint-Etienne
23 Rue Paul Michelon-42023-Saint-Etienne.*

Résumé

La simulation des écoulements de fluides viscoélastiques dans les contractions planaires 2D a fait l'objet de nombreux travaux aussi bien sur le plan numérique qu'expérimental. Nous avons nous-même récemment proposé une analyse basée sur l'écoulement du PEbd IUPAC A, modélisé par un modèle Pom Pom multimode. Nous proposons dans un premier temps de donner une interprétation de l'origine des franges de biréfringence en forme de W, généralement présentes en aval de la contraction. Il est notamment montré qu'il s'agit d'un effet dû à la nature tridimensionnelle de l'écoulement.

Dans un second temps nous présentons quelques résultats numériques et expérimentaux originaux dans des contractions 3D particulières, du type réservoir carré/canal de section circulaire et réservoir carré/canal de section carrée. Nous mettons en évidence des vortex dans les plans médians dans le cas newtonien (ou à bas gradient de vitesse) et un déplacement de ces vortex vers les plans diagonaux dans le cas viscoélastique. La simulation numérique avec un modèle Pom Pom est bien validée par les observations expérimentales.

Mot clés : Contraction 3D, écoulements viscoélastiques, modèle Pom Pom, biréfringence, visualisation

1. Introduction:

La description précise du comportement viscoélastique des polymères fondus dans les situations d'écoulement complexe est une thématique récurrente compte-tenu du secteur socio-économique concerné, communément appelé plasturgie.

L'optimisation des procédés de mise en forme et des propriétés finales des produits transformés nécessite la maîtrise de modèles de simulation performants et il faut pour cela être capable de décrire correctement le comportement rhéologique non-linéaire des polymères fondus par des équations constitutives adéquates et d'implémentation relativement aisées dans les codes de calcul. Au cours des vingt dernières années, des progrès sensibles ont été fait pour la caractérisation de la réponse des matériaux en cisaillement mais aussi en élongation. Parallèlement une nouvelle catégorie de modèles, basés sur la théorie de la reptation ont vu le jour. Parmi ceux-ci, le modèle intégral Pom-Pom, a été introduit par McLeish et Larson [1], grâce à la conception d'une molécule générique issue de la généralisation des structures en H, suffisamment élaborée pour être à même de mimer la topologie complexe des chaînes du PEbd.

Dans cet article, nous présentons quelques résultats numériques et expérimentaux originaux, obtenus lors d'une étude de l'écoulement d'un PEbd à travers des contractions 3D particulières, du type réservoir carré/canal de section circulaire et réservoir carré/canal de section carrée. Nous proposons également une interprétation de l'origine des franges de biréfringence en forme de W, généralement présentes en aval des contractions. Le comportement rhéologique du PEbd est décrit par un modèle Pom-Pom modifié.

2. Modèle Pom-Pom utilisé:

La version différentielle initiale de McLeish et Larson a d'abord été modifiée par Blackwell et al. [2], au niveau du temps de relaxation de l'étirement du squelette (équation 1b), afin d'introduire l'effet de pénétration du point de branchement dans le tube où est confiné le squelette :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left[\mathbf{A} + \frac{1}{\lambda_{ob}} \left[\mathbf{A} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right] \right] = 0, & i_A = \text{Tr}(\mathbf{A}), \\ \mathbf{S} = \frac{\mathbf{A}}{i_A} \end{cases} \quad (1a)$$

$$\begin{cases} \frac{D\Lambda}{Dt} = (\mathbf{D} : \mathbf{S})\Lambda - \frac{1}{\lambda_s}(\Lambda - 1), \\ \lambda_s = \lambda_{os} \exp\left(-\frac{2}{q}(\Lambda - 1)\right), \Lambda \leq q \end{cases} \quad (1b)$$

$$\boldsymbol{\tau} = G_0(3\Lambda^2\mathbf{S} - \mathbf{I}) \quad (1c)$$

$$\text{Avec } \overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \frac{D\mathbf{A}}{Dt} - \mathbf{A} \cdot (\overset{\nabla}{\mathbf{V}} \overset{\nabla}{\mathbf{V}}) - (\overset{\nabla}{\mathbf{V}} \overset{\nabla}{\mathbf{V}})^T \cdot \mathbf{A}.$$

Où \mathbf{A} est le tenseur de conformation (auxiliaire) utilisé pour exprimer le tenseur d'orientation \mathbf{S} , Λ représente l'étirement de tube, λ_{ob} est le temps de relaxation de l'orientation, λ_s est le temps de relaxation de l'étirement qui dépend de Λ et du nombre de branches q , \mathbf{D} est le tenseur des taux de déformation, et $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur des extra-contraintes exprimé en fonction de \mathbf{S} , Λ et du module élastique linéaire G_0 . \mathbf{I} est le tenseur identité de dimension (4×4) .

Ces équations modélisent l'évolution de l'orientation et de l'étirement du squelette avec chacune leur temps de relaxation propre. Les propriétés rhéologiques en cisaillement et en élongation uniaxiale des polymères branchés comme le PEbd sont correctement prédites [3], et des résultats encourageants ont été obtenus lors de la simulation des écoulements complexes, dans les contractions planaires **4:1** [4]. Habituellement l'optimisation des paramètres non-linéaires du modèle de Pom-Pom est effectuée à partir des réponses transitoires en élongation. En général, la description correcte des propriétés rhéologiques en cisaillement permanent est automatiquement récupérée, ce qui est un point fort du modèle, probablement grâce à son origine moléculaire [3].

Le traitement numérique de ces équations peut par contre être perturbé par la croissance et la propagation d'oscillations numériques à proximité des singularités géométriques [5]. Par exemple, l'équation d'évolution de l'orientation (1a) est de type Maxwell, ce qui peut être problématique en cas d'élongation forte. D'autre part, l'inégalité dans l'équation (1b) introduit des discontinuités dans la réponse du modèle qui sont difficiles à traiter numériquement. Enfin, il faut noter que l'approximation différentielle conduit à une seconde différence des contraintes normales nulle contrairement à la réalité physique ainsi qu'à la formulation intégrale originale.

Afin de surmonter ces inconvénients, Verbeeten [6] a proposé une nouvelle version appelée XPP

(eXtended Pom Pom), en deux formulations, avec un paramètre non-linéaire d'anisotropie α qui introduit une deuxième différence des contraintes normales non nulle en cisaillement. Nous avons choisi d'utiliser la formulation SXPP (Single XPP), représentée par le jeu d'équations ci-après:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \lambda(\boldsymbol{\tau})^{-1} \cdot \boldsymbol{\tau} = 2G_0\mathbf{D} \quad (2a)$$

$$\lambda(\boldsymbol{\tau})^{-1} = \frac{1}{\lambda_{ob}} \left[\frac{\alpha}{G_0} \boldsymbol{\tau} + f(\boldsymbol{\tau})^{-1} \mathbf{I} + \right. \quad (2b)$$

$$\left. G_0(f(\boldsymbol{\tau})^{-1} - 1)\boldsymbol{\tau}^{-1} \right]$$

$$f(\boldsymbol{\tau})^{-1} = \frac{2\lambda_{ob}}{\lambda_{os}} \left(1 - \frac{1}{\Lambda} \right) \exp\left(\frac{2}{q}(\Lambda - 1)\right) + \frac{1}{\Lambda^2} \left(1 - \frac{\alpha \text{Tr}(\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau})}{3G_0^2} \right), \quad (2c)$$

$$\Lambda = \sqrt{1 + \frac{\text{Tr}(\boldsymbol{\tau})}{3G_0}}$$

Du point de vue numérique, cette formulation est relativement simple car elle est mathématiquement proche des lois différentielles viscoélastiques classiques. Néanmoins, l'argument de la racine dans l'équation (2c) doit être toujours positif, ce qui n'est pas garanti dans les calculs numériques par éléments finis, en particulier au voisinage des singularités géométriques. Afin de bénéficier de l'avantage de cette formulation, Sirakov [7] a introduit une approximation de la fonction \sqrt{x} par une fonction $g(x)$ strictement positive, ce qui permet de surmonter ce problème inhérent à la version SXPP. Par contre, il a été prouvé que la présence d'un comportement anisotropique ($\alpha \neq 0$) peut être problématique, car provoquant des effets non physiques même dans les réponses en cisaillement et en élongation uniaxiale [8].

Pour cette raison, la version utilisée dans notre calcul, baptisée SPP, est basée sur la formulation SXPP avec $\alpha = 0$ et l'utilisation d'une fonction de substitution de l'argument de la racine carrée de l'expression (2c) telle que (équation 3):

$$g(x) = \begin{cases} \sqrt{x} & x \geq \delta \\ \frac{A}{B-x}; A = 2\delta\sqrt{\delta}; B = 3\delta & x < \delta \end{cases} \quad (3)$$

Cette modification s'est révélée très efficace pour le traitement numérique des écoulements viscoélastiques dans les géométries 3D [7].

3. Définition du problème et discrétisation numérique :

Le polymère fondu est considéré comme un fluide incompressible dans un écoulement isotherme où les effets d'inertie sont complètement négligés. Dans ces conditions, le problème est gouverné par le système d'équations suivant :

- Conservation de la masse (condition d'incompressibilité) :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (4)$$

- Conservation de la quantité de mouvement (équilibre dynamique) :

$$\vec{\nabla} \cdot \sigma = 0, \quad \sigma = -p \mathbf{I} + 2\eta_s \mathbf{D} + \sum_{k=1}^N \tau_k \quad (5)$$

où σ est le tenseur de contrainte de Cauchy, p est la pression arbitraire, η_s est une viscosité solvant et τ_k représente le tenseur des extra-contraintes calculé à partir du modèle constitutif (2).

Afin de surmonter les problèmes classiques concernant la formulation mixte par éléments finis du problème [13], la formulation Discrete Elastic Viscous Stress Splitting / Discontinuous Galerkin (DEVSS/DG) a été retenue [9-10]. Un des principaux avantages est la possibilité d'éliminer au niveau de chaque élément les variables de contrainte et par conséquent de réduire considérablement les degrés de liberté du problème tout particulièrement pour les modèles viscoélastiques multi-mode.

4. Matériau utilisé et montage expérimental :

Le matériau étudié est un polymère branché commercial, le PEbd-IUPAC A (1840H de Basell polyolefins) fondu à 150°C. Ce matériau a fait l'objet de nombreuses études rhéologiques dans le monde académique et beaucoup de résultats sont disponibles. Les paramètres matériels du modèle Pom Pom utilisés sont présentés dans [7].

Nous avons conçu et réalisé des filières de la géométrie souhaitée, c'est-à-dire une contraction planaire de rapport 8:1 et de profondeur 25 mm, une contraction carré/tube et une contraction carré/carré **8 : 1** (sections du réservoir 12*12 mm²). Elles sont équipées de vitres latérales permettant la visualisation de l'écoulement dans la section de contraction, et de crayons chauffants pour imposer la température fixée. Ces filières sont montées sur une petite extrudeuse de laboratoire, équipée d'une monovis de diamètre 20 mm et de rapport L/D 20.

Le débit d'écoulement est contrôlé avec une précision de 1%. Pour l'observation des vortex, une fine couche de polymère coloré est introduite en amont de la contraction, sur les plans de symétrie, horizontal ou vertical.

5. Résultats et discussion:

La confrontation entre les résultats numériques et les expériences sont effectuées en terme de cinématique d'écoulement et de distribution de contraintes, caractérisés respectivement par des suivis de particules et des clichés de biréfringence.

5.1 Biréfringence d'écoulement : origine des franges « W »

Pour le PEbd, plusieurs études de littérature mentionnent l'apparition de franges en forme de « W » en aval des contractions planaires lorsque le débit augmente [11-12] et la question de leur origine se pose. S'agit-il d'un comportement atypique du polymère dont le comportement rhéologique en élongation est par nature rhéoépaississant ou s'agit-il d'effets viscoélastiques dus à un écoulement tridimensionnel ? L'examen attentif des géométries d'étude apporte des arguments pour la 2^{ème} solution. En effet, la contraction **4 : 1** utilisée par Coates est par exemple définitivement 3D ($H/W=0,4$) et le cliché de biréfringence du PEbd utilisé (figure 1) montre clairement les franges « W » dans la fente juste après la contraction. Dans le réservoir, les franges sont aplaties.

Avec le même polymère et avec une contraction planaire **3.3 : 1** plus profonde ($H/W=0.127$), c'est à dire des conditions d'écoulement pratiquement bidimensionnel, Verbeeten [6] n'observe pas de franges « W » et celles situées dans le réservoir ressemblent à une aile de papillon (figure 2)

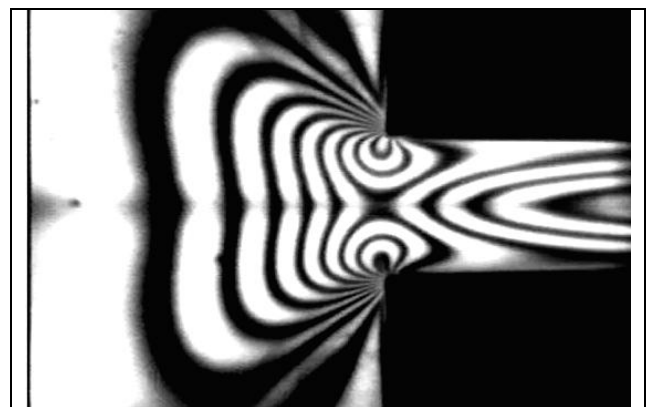


Figure 1: Franges « W » du PEbd à $\dot{\gamma} = 125 \text{ s}^{-1}$ dans une contraction **4 : 1 : 10** [Coates et al]

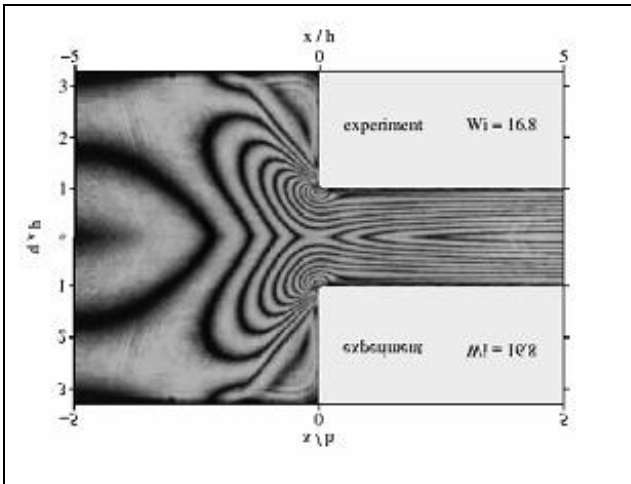


Figure 2 : Franges du Pebd IUPAC A dans une contraction **5,1 : 1,55 : 40** [Verbeeten et al]

Afin de comprendre l'origine de cette différence, nous avons calculé la distribution de la différence des contraintes principales (DCP) du Pebd dans une contraction **8 :1** avec $H/W = 1.25$. On observe un pic de contrainte en aval de la contraction à proximité des parois (Figure 3 a). Il est de ce fait évident que les lignes d'iso DCP sont différentes selon que l'on est au plan de symétrie à $Z/W = 0$ ou à proximité de la paroi à $Z/W = 0.4$ (figures 3 b et 3 c). Dans le premier cas, les iso DCP sont semblables au cliché obtenu par Verbeeten et dans l'autre cas, elles sont semblables au cliché obtenu par Coates. La biréfringence observée expérimentalement représentant l'ensemble de ces effets, la présence ou l'absence de franges « W » dépend donc principalement de la nature de la géométrie d'écoulement. Si le rapport H/W est de l'ordre de 0.1, la situation 3 b est prédominante ; si H/W est de l'ordre de 1, c'est la situation 3 a qui l'emporte.

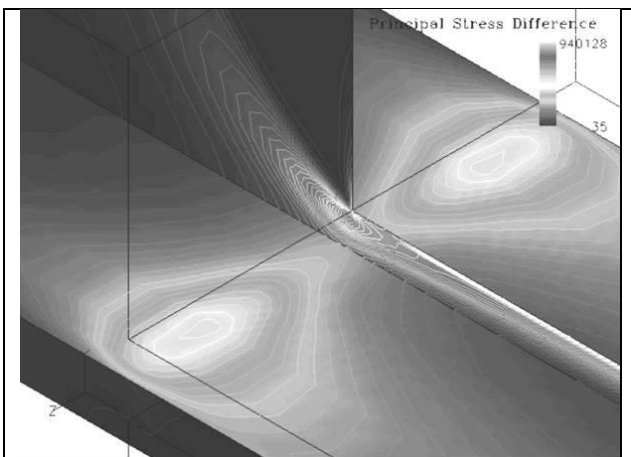


Figure 3 a : Distribution de la DCP pour le Pebd IUPAC A à $\dot{\gamma}_a = 25 \text{ s}^{-1}$ - Contraction **20 : 2,5 : 16**

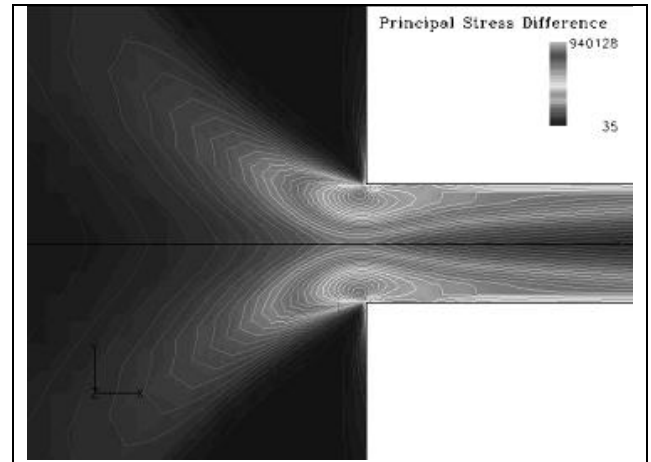


Figure 3 b : Iso DCP du Pebd à $Z/W = 0$ et $\dot{\gamma}_a = 25 \text{ s}^{-1}$

Contraction **20 : 2,5 : 16**

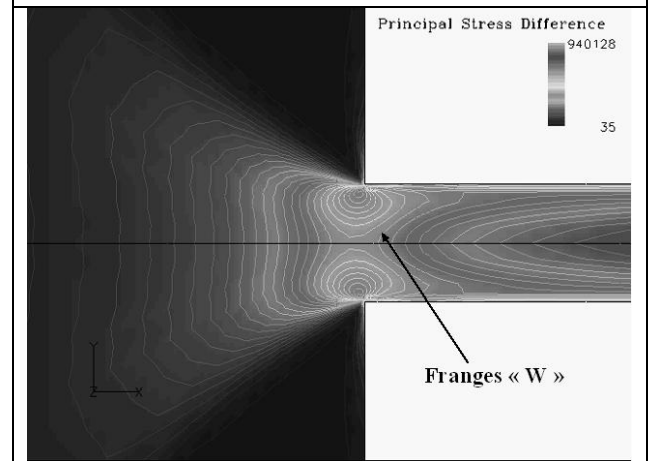


Figure 3 c : Iso DCP du Pebd à $Z/W = 0.4$ et $\dot{\gamma}_a = 25 \text{ s}^{-1}$ - Contraction **20 : 2,5 : 16**

5.1 Contraction carré/carré et contraction carré/tube.

Sur le plan général, l'étude de ce type de contraction est intéressant car il est intermédiaire entre les contractions axisymétriques 2D et les contractions planaires 3D. L'idée est qu'une compétition doit exister entre les vortex des plans médians et les vortex des plans diagonaux. Il n'y a aucune raison pour qu'ils soient séparés de l'écoulement principal et la cinématique doit être complexe. La question est de savoir dans quelle direction les particules des vortex se déplacent.

Dans le cas newtonien (débit faible), on met en évidence que le mouvement des particules se fait du plan diagonal vers le plan médian avant qu'elles passent dans la contraction. Compte-tenu des faibles débits mis en œuvre, nous n'avons pas la confirmation expérimentale de ce point particulier.

Inversement, dans le cas viscoélastique (débit élevé), la simulation numérique montre que dans tous les cas, les particules initialement situées dans les plans médians du réservoir se déplacent vers les plans diagonaux avant de passer dans la contraction. Un exemple est donné pour la contraction carré/carré sur les figures 4 a et 4 b)

Ces calculs sont confirmés par l'expérience. En particulier, la figure 5 montre les vortex à l'équilibre dans les plans diagonaux, dans le cas de la contraction carré/carré, alors que la couche colorée a été initialement introduite sur le plan de symétrie vertical.

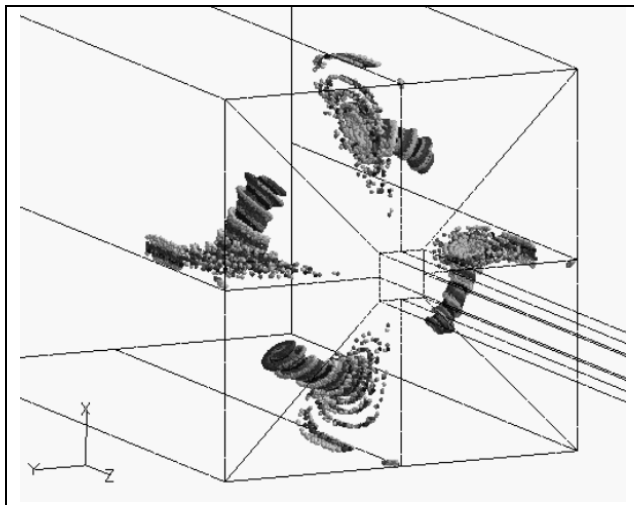


Figure 4 a : Déplacement des particules du plan médian vers le plan diagonal.

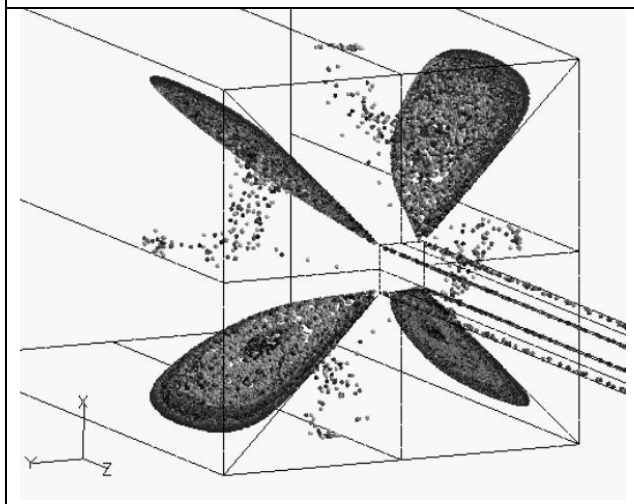


Figure 4 b : Position diagonale des vortex à l'équilibre.



Figure 5 : Position diagonale des vortex à l'équilibre (contraction carré/carré) à $\dot{\gamma}_a = 60 \text{ s}^{-1}$

Conclusion

Les écoulements de fluides viscoélastiques dans les contractions se traduisent par des trajectoires complexes, à l'origine d'observations telles que les franges « W » ou de mouvements dans les vortex. Les méthodes numériques actuelles, associées à des équations constitutives pertinentes permettent de rendre compte de la plupart des phénomènes observés par l'expérience. Le modèle Pom Pom version SPP utilisé semble être un bon candidat pour la prédiction du comportement rhéologique du Pebd, même dans des situations d'écoulement mixte 3D.

Références bibliographiques

- [01]- McLeish T.C.B., Larson R.G., *Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: the pom-pom polymer*, J.Rheol., 42(1):81-110, 1998.
- [02]- Blackwell R.L., McLeish T.C.B., Harlen O.G., "Molecular drag-strain coupling in branched polymer melts, J. Rheol., 44(1): 121-136,2000.
- [3]- Inkson N.J., McLeish T.C.B., " Predicting low density polyethylene melt rheology in elongational and shear flows with pom-pom constitutive equations, J.Rheol., 43(4):873-896, 1999.
- [04]- Bishko G.B., Harlen O.G., McLeish T.C.B., Nicholson T.M., *Numerical simulation of the transient flow of branched polymer melts through a planar contraction using the Pom-Pom model*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 82, 255 – 273 1999.
- [5]- Clemeur N., Rutegers R.P.G., Debbaut B., *On the evaluation of some differential formulation for the pom-pom constitutive model*, Rheol. Acta. 42: 217-231, 2003.

- [6]- Verbeeten W.M.H., Peters G.W.M., Baaijens F.P.T., *Viscoelastic analysis of complex polymer melt flows using the eXtended Pom-Pom model*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 108, 301-326, 2003.
- [7]- Sirakov I., Ainsier A., Haouche M., Guillet* J., *Three-dimensional numerical simulation of viscoelastic planar contraction flow using the pom-pom differential constitutive model*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 126, 163-173, 2005.
- [8]- Clemeur N., Rutgers R.P.G., Debbaut B., *Numerical simulation of abrupt contraction flows using the double convected Pom-Pom model*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 177, 193 – 209, 2004.
- [9]- Baaijens F.P.T., *An iterative solver for the DEVSS/DG method with application to smooth and non-smooth flows of the upper convected Maxwell fluid*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 75, 119-138, 1998
- [10]- Guénette R., Fortin M., *A new mixed finite element method for computing viscoelastic flow*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 60, 27-52, 1995.
- [11]- Béraudo C., Fortin A., Coupez T., Demay Y., Vergnes B., Agassant J.F.; *A finite element method for computing the flow of multi-mode viscoelastic fluids: comparison with experiments*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. 75, 1-23, 1995.
- [12]- Martyn M.T., Nakason C., Coates P.D., *Measurement of apparent extensional viscosities of polyolefin melts from process contraction flows* J. Non-Newtonian Fluid Mech. 92, 203–226, 2000.