POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Simulation de l'extrusion du celluloïd en filière plate

ASHER AMOS BENCHIMOL

Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

Génie chimique

Décembre 2019

© Asher Amos Benchimol, 2019.

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

Simulation de l'extrusion du celluloïd en filière plate

présenté par **Asher Amos BENCHIMOL**

en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Marie-Claude HEUZEY, présidente

Charles DUBOIS, membre et directeur de recherche

François BERTRAND, membre et codirecteur de recherche

Bruno BLAIS, membre

DÉDICACE

A la mémoire de mes grands-pères, Prosper et Maklouf, et ma grand-mère Raquel qui nous ont quittés.

REMERCIEMENTS

A la grâce de D'.

Un grand merci à David Vidal pour son implication et son soutien tout au long de mon cursus, ainsi qu'à mes professeurs Charles Dubois et François Bertrand sans qui ce projet n'aurait jamais pu voir le jour. Merci à mes collègues (Igor, Bastien, Christine et Jean-Michel) et à Bruno Blais qui m'ont épaulé. Je remercie mes parents Patrick et Thérèse qui m'ont toujours soutenu et accompagné. Je remercie mon frère Ruben et ma sœur Hannah qui par leur présence m'ont donné envie de me surpasser. Je remercie ma grand-mère Esther pour ses encouragements quotidiens.

RÉSUMÉ

L'étude de la simulation de l'écoulement du celluloïd en profilé est un domaine très peu étudié actuellement, car il implique de fortes compétences en rhéologie, mathématique et informatique. De fait, il fait partie de ces champs d'études nécessitant une formation éclectique. Cette étude présentera ainsi les outils propres à chacun des domaines précédemment évoqués afin de simuler ce genre d'écoulement. Ce mémoire aura donc pour but de mieux comprendre et prédire l'écoulement du celluloïd dans un profilé afin de limiter les essais en laboratoire qui sont à la fois risqués et coûteux.

A cette fin, compte tenu de l'impossibilité de résoudre analytiquement les équations du champ de contraintes couplées à celle de Cauchy dans le cas général, il a été nécessaire d'utiliser des méthodes numériques pour y parvenir. Dans ce but, il a été décidé d'utiliser les logiciels Comsol et Foam-Extend impliquant respectivement la méthode des éléments finis et celle des volumes finis, qui sont les deux méthodes les plus utilisées dans ce contexte.

Dans le cas de la méthode des éléments finis implantée dans Comsol Multiphysics 5.4, il n'existait aucun modèle viscoélastique disponible par défaut dans le logiciel et il a donc fallu les implantées. Cependant, après plusieurs essais, ce logiciel s'est avéré assez limité dans le domaine du viscoélastique et n'a permis de simuler que des écoulements en 2 dimensions. Ceci peut expliquer le nombre limité de publications utilisant le logiciel Comsol en 3 dimensions dans la littérature scientifique. Il a donc fallu se tourner vers un autre logiciel et une autre méthode plus utile pour pouvoir effectuer le passage de la 2D à la 3D.

Pour pouvoir réaliser une étude en 3 dimensions, les possibilités de la méthode des volumes finis ont été testées à l'aide du logiciel Foam-Extend (variante d'OpenFoam). Cet outil possède une large bibliothèque permettant la simulation d'écoulements viscoélastiques en 3 dimensions. Grâce à ce programme, il a été possible de simuler l'écoulement du celluloïd dans un profilé contenant une contraction 1:20. En outre, à l'aide de données rhéologiques expérimentales, les paramètres des modèles (PTT, Giesekus, White-Metzner) ont été étudiés pour prédire le comportement du celluloïd dans différentes géométries (p.ex. contraction 2D, contraction 3D, conduite rectangulaire, profilé réel). Selon une analyse de convergence sur le modèle de White-

Metzner, il apparaît que l’algorithme numérique implanté dans Foam-Extend converge à l’ordre 1.68, ce qui est consistant avec les schémas de discrétisation utilisés. Il a ainsi été possible de mettre en évidence le fait que la simulation était très impactée par le type de maillage (structuré ou non), et qu’il était toujours préférable d’utiliser un maillage structuré afin d’obtenir des résultats moins bruités. Ainsi, il est prédit qu'un excès de celluloïd sera généré au centre des feuilles mises en forme dans la configuration actuelle du profilé.

Pour finir, une analyse de l’impact de l’hypothèse d’un fluide isotherme a été effectuée. Il en ressort que cette hypothèse ne semble pas totalement adéquate étant donnée la forte dissipation visqueuse pouvant être générée par un polymère tel que le celluloïd. Cependant, les valeurs obtenues restent une première approximation utile des phénomènes observables à l'intérieur du profilé.

ABSTRACT

The study of the simulation of celluloid flow in die is a very rarely studied field at present because it involves strong skills in rheology, mathematics, and computer science. It is one of those fields of study that requires eclectic training. This study will present the tools specific to each of the areas mentioned above to simulate this type of flow. The aim of this thesis will therefore be to better understand and predict the flow of celluloid in a profile in order to limit laboratory tests, which are both risky and costly.

Given the impossibility of analytically solving the stress field equations coupled with Cauchy equations, it was necessary to use numerical methods to achieve this. It was therefore decided to use the Comsol and Foam-Extend software packages involving the finite element method and the finite volume method respectively, which are the two most commonly used methods in this context.

In the case of the finite element method implemented in Comsol Multiphysics 5.4, there was no viscoelastic model available by default in the software, so they had to be implemented. However, after several tests, this software proved to be quite limited in the field of viscoelastic and only allowed to simulate flows in 2 dimensions. This may explain the limited number of publications using the Comsol software in 3 dimensions in the scientific literature. It was therefore necessary to turn to another software and another more useful method to be able to make the transition from 2D to 3D.

In order to be able to carry out a 3-dimensional study, the possibilities of the finite volume method were tested using the Foam-Extend software (a variant of OpenFoam). This tool has an extensive library for the simulation of viscoelastic flows in 3 dimensions. With this program it was possible to simulate the celluloid flow in a profile containing a 1:20 contraction. In addition, using experimental rheological data, model parameters (PTT, Giesekus, White-Metzner) were studied to predict the celluloid behaviour in different geometries (e.g. 2D contraction, 3D contraction, rectangular pipe, real profile). According to a convergence analysis on the White-Metzner model, it appears that the numerical algorithm implemented in Foam-Extend converges to the order 1.68, which is consistent with the discretization schemes used. It was thus possible to highlight the fact that the simulation was highly impacted by the type of mesh (structured or unstructured), and that

it was always preferable to use a structured mesh in order to obtain less noisy results. Thus, it is predicted that an excess of celluloid will be generated in the center of the extruded sheets with the current profile configuration.

Finally, an impact analysis of the hypothesis of an isothermal fluid was carried out. It appears that this hypothesis does not seem to be totally adequate given the high viscous dissipation that can be generated by a polymer such as celluloid. However, the values obtained remain a useful first approximation of the phenomena observable inside the profile.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE III

REMERCIEMENTS IV

RÉSUMÉ V

ABSTRACT VII

TABLE DES MATIÈRES IX

LISTE DES TABLEAUX XII

LISTE DES FIGURES XIII

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS XVI

LISTE DES ANNEXES XVIII

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

1.2 Objectif général 4

CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE 6

2.1 Dynamique des écoulements viscoélastiques 6

2.1.1 Équation de la quantité de mouvement appliquée à un fluide viscoélastique 8

2.1.2 Modèles rhéologiques définissant le tenseur des extra-contraintes 9

2.1.3 Nombre adimensionnel et définition rhéologique 14

2.1.4 Équation de la chaleur appliquée à un fluide viscoélastique 17

2.2 Mise en forme du celluloïd et défaut d'extrusion 18

2.2.1 Technique de mise en forme des polymères 18

2.2.2 Défauts classiques d'extrusion 20

2.2.3 Contraintes de mise en forme dues à l'utilisation du mélange nitrocellulose/camphre 25

2.3 Simulation numérique des écoulements viscoélastiques 31

2.3.1 Méthode des éléments finis 33

2.3.2 Méthode des volumes finis 39

2.4 Logiciel de simulation 45

2.4.1 Polyflow (ANSYS) 45

2.4.2 Comsol multiphysics 47

2.4.3 OpenFoam/Foam-Extend 48

2.5 Objectifs spécifiques 50

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE 52

3.1 Hypothèses et cadre de la recherche 52

3.2 Construction de la simulation viscoélastique 54

3.2.1 Conditions frontières et conditions initiales 54

3.2.2 Implantation sous Comsol 57

3.2.3 Implantation sous Foam-Extend 58

3.3 Vérification des simulations numériques 59

3.4 Précision relative à la validation expérimentale du projet 61

CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET ANALYSE 62

4.1 Données rhéologiques et choix des paramètres des modèles 62

4.2 Implémentation sous Comsol 65

4.2.1 Test de la Méthode de Galerkin continue 65

4.2.2 Test de la stabilisation couplée SUPG/ DEVSS 68

4.2.3 Limite de l'implémentation sous Comsol 74

4.3 Implémentation sous Foam-Extend 75

4.3.1 Vérification sur une contraction en deux dimensions 76

4.3.2 Effet du maillage dans une conduite rectangulaire en trois dimensions 80

4.3.3 Convergence dans un canal de répartition simple en 3 dimensions 82

4.3.4 Simulations dans une filière simplifiée et la filière actuelle 85

CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE 92

5.1 Utilisation de Comsol et des éléments finis en viscoélastique.....92

5.2 Valorisation de la méthode des volumes finis en viscoélastique 94

5.3 Résultats expérimentaux et prédictions par simulation.....95

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS 98

RÉFÉRENCES..... 100

ANNEXES 110

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 Récapitulatif des variables et des conditions frontières qui leur sont associées.....56

Tableau 2 Viscosité en fonction du taux de cisaillement, pour un écoulement de celluloïd dans un profilé à 70 °C. 62

Tableau 3 Résumé des paramètres utilisés. 64

Tableau 4 Erreurs obtenues à faible nombre de Weissenberg (modèle non stabilisé). 68

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 Vue d'ensemble du procédé de mise en forme des thermoplastiques [96]. 1

Figure 1.2 Exemple de profilé non trivial pour de l'aluminium [97].....2

Figure 1.3 Exemple de défauts d'extrusion classés par ordre d'apparition en fonction du débit [108]. 3

Figure 2.1 Effets de la pression sur le volume spécifique en fonction de la température (d'après [7]).....7

Figure 2.2 Évolution de la viscosité caractéristique des fluides énergétiques [9].....10

Figure 2.3 Profil de vitesse dans un écoulement Couette-Poiseuille pour différentes valeurs du paramètre α [77].....12

Figure 2.4 Évolution de la viscosité adimensionnelle normalisé en fonction du taux de cisaillement adimensionnelle [81].....13

Figure 2.5 Schéma général d'une extrudeuse bi-vis [13].....19

Figure 2.6 Représentation d'un gonflement en sortie de filière [19]. 22

Figure 2.7 Évolution des défauts d'extrusion en fonction du taux de cisaillement (GMF signifie Gross Melt Fracture ou fracture de fusion en français) [20] 23

Figure 2.8 Schéma de nitration de la cellulose [28].....25

Figure 2.9 Test d'élongation du celluloïd [29].....28

Figure 2.10 Gonflement en sortie de filière pour un mélange NC/ NG [102]. 30

Figure 2.11 Évolution de la contrainte en cisaillement pour un mélange NC/NG [102].....30

Figure 2.12 Répartition des publications dans le domaine du viscoélastique pour différentes méthodes numériques (sur la base d'une revue de la littérature à partir de plusieurs bases de données). 32

Figure 2.13 Transformation d'un quadrilatère quelconque en un rectangle de référence [34].....35

Figure 2.14 Représentation des flux de transport pour la méthode des volumes finis [43]. 40

Figure 2.15 Algorithme *PISO* [44].....44

Figure 2.16 Publication en fonction du logiciel utilisé. 45

Figure 2.17 Gonflement en sortie de filière prédit par ANSYS [49]. 46

Figure 2.18 Gonflement en sortie de filière simulé sous Comsol [51].....48

Figure 2.19 Vortex de contraction prédit grâce à OpenFoam [55]. 49

Figure 3.1 Profil de vitesse dans une fente.....60

Figure 4.1 Loi de Carreau vs données expérimentales à 70 °C.....63

Figure 4.2 Profil de vitesse à faible nombre de Weissenberg. 66

Figure 4.3 Premier coefficient de contraintes simulé à faible nombre de Weissenberg (modèle non stabilisé). 67

Figure 4.4 Premier coefficient de contraintes normales prédit à l'aide d'un modéle oldroyd-B stabilisé [72]. 69

Figure 4.5 Simulation d'une contraction sous Comsol. 70

Figure 4.6 Évolution de la première différence de contrainte au centre d'une contraction. 71

Figure 4.7 Profil de vitesse d'un fluide rhéofluidifiant simulé sous Comsol.....72

Figure 4.8 Évolution de la viscosité pour un modèle PTT sous Comsol [72].....73

Figure 4.9 Contraction simple en 2 dimensions sous Foam-Extend. 77

Figure 4.10 Évolution de la viscosité pour différents modèles implantés sous Foam-Extend.....78

Figure 4.11 Évolution du résidu initial dans une contraction 2D en fonction du temps pour : la pression; la norme de la vitesse; la norme de Frobenius du tenseur des extra-contraintes. ...79

Figure 4.12 Présentation du champ de pression dans une conduite rectangulaire. 80

Figure 4.13 Évolution du résidu initial dans une conduite rectangulaire 3D en fonction du temps pour : la pression; la norme de la vitesse; la norme de Frobenius du tenseur des extra-contraintes. 81

Figure 4.14 Magnitude de la contrainte dans une conduite rectangulaire pour un maillage non structuré (à gauche) et un maillage structuré (à droite).....82

Figure 4.15 Géométrie d'un canal de répartition approximer par une succession de deux hexaèdres réguliers.....83

Figure 4.16 Profil de vitesse à y=0 et z=0.06 pour deux maillages non structurés de longueur caractéristique (LC) égale à 5.10^{-4} et 2.10^{-3} m, et un maillage structuré de longueur caractéristique égale à 5.10^{-4} m (NS=non structuré, S=structuré).....84

Figure 4.17 Erreur selon la norme L2 en fonction de la longueur caractéristique des éléments pour différente simulation. 85

Figure 4.18 Géométrie simplifiée de profilé existant.....86

Figure 4.19 Champs de vitesse en sortie de profilé pour un maillage non structuré.....87

Figure 4.20 Champ de pression le long de la filière.....88

Figure 4.21 Évolution de la première différence de contraintes (B) le long du plan de coupe du profilé (A).....89

Figure 4.22 Profil de vitesse en sortie pour la géométrie réelle. 91

Figure 5.1 Nombre de publications dans le domaine du viscoélastique par FEM sur compendex. 93

Figure A.1 Géométrie réelle de la filière.....110

Figure B.1 Évolution de la force normale au cours du temps dans une géométrie de fente avec un obstacle sphérique. 112

Figure C.1 Diagramme simplifié de l'algorithme *SIMPLE* [44]. 113

Figure G.1 Évolution de la pression dans une géométrie fidèle au profilé réel. 116

Figure H.1 Schéma d'un profilé avec pince [66]. 117

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} \end{bmatrix}$: tenseur de conformation (adimensionnelle)

$\vec{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix}$: Champs de vitesse (m/s)

$\boldsymbol{\nabla} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix}$: Gradient (1/m)

$\boldsymbol{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$: Laplacien (1/m^2)

$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & \tau_{13} \\ \tau_{12} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{13} & \tau_{23} & \tau_{33} \end{bmatrix}$: Champs des extra-contraintes (Pa)

$\check{\boldsymbol{\tau}} = \left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}\right)$: Dérivée convecté

$\vec{g} = \begin{bmatrix} g_x \\ g_y \\ g_z \end{bmatrix}$: Champs gravitationnelle (N/kg)

$\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\tau}$: Dérivée particulaire

$A \cdot B$: Produit scalaire

$A : B$: Produit dyadique

Cp : Capacité thermique isobare (J/kg)

D : diamètre d'entrée de la filière

d : diamètre de sortie de la filière

De : nombre de Deborah

t : temps (s)

η : viscosité (Pa.s)

FV=FVM: méthode des volumes finis

GD : Galerkin discontinue

GMF : Facture de fusion

LB : méthode de Boltzmann sur réseaux

LBB : Ladyzhenskaya-Babuska-Brezzi

MEF=FEM : méthode des éléments finis

NC : nitrocellulose

N1 $=\tau_{11}-\tau_{22}$: première différence de contrainte

p : Pression(Pa)

T : Température (K)

Re : nombre de Reynolds

v_i : Composante i du champ de vitesse (m/s)

We : nombre de Weissenberg

ρ : Masse volumique (kg/m^3)

λ : Temps de relaxation (s)

$\dot{\boldsymbol{\gamma}}$: Taux de cisaillement (1/s)

ψ: Logarithme du tenseur de conformation (matrice non symétrique)

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A GÉOMÉTRIE RÉELLE DE LA FILIÈRE 110

ANNEXE B TABLEAU RÉCAPITULATIF DES AVANTAGES ET INCONVÉNIENTS DES DIFFÉRENTS OUTILS DE SIMULATION.....111

ANNEXE C RÉSULTAT DE SIMULATION POUR UN MODÈLE PTT GÉOMÉTRIE FENTE/ SPHÈRE POSITION APRÈS LA SPHÈRE 112

ANNEXE D ALGORITHME *SIMPLE* 113

ANNEXE E SCRIPT VISCOÉLASTIQUE FOAM-EXTEND/GMSH.....114

ANNEXE F SCRIPT POUR GÉNÉRER UNE GÉOMETRIE SIMPLIFIÉE À L'AIDE DE GMSH 115

ANNEXE G GÉOMÉTRIE OBTENUE SOUS GMSH FIDÈLE AU PROFILÉ RÉEL 116

ANNEXE H PROFILÉ AVEC PINCES.....117

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

Depuis plusieurs dizaines d'années, la production mondiale de matière plastique n'a cessé de croître à travers le monde. En 2011, par exemple, il avait été ainsi produit près de 280 Mt de matière plastique contre 1.5 t en 1950 [94]. Cette augmentation peut être expliquée, en partie, par le fait que les matières plastiques peuvent combiner un grand nombre de propriétés physico-chimiques les rendant très utiles et relativement faciles à mettre en forme [95]. Les thermoplastiques, par exemple, peuvent dans certains cas être refondus à plusieurs reprises ce qui facilite leur recyclage. De manière très générale, il est possible de résumer la plupart des étapes de mise en forme des thermoplastiques par la Figure 1.1.

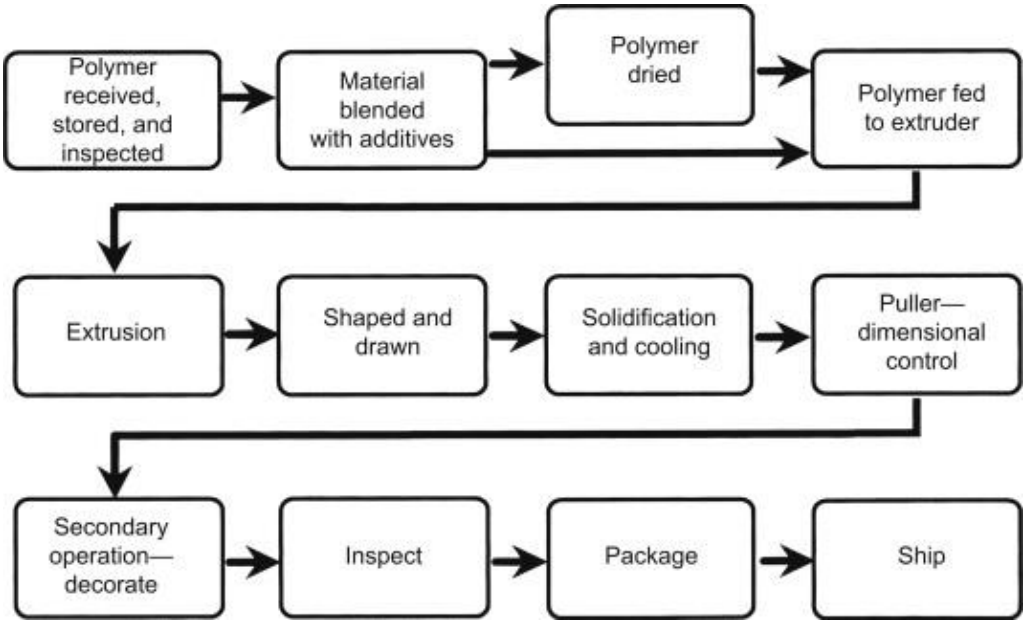

Figure 1.1 Vue d'ensemble du procédé de mise en forme des thermoplastiques [96].

L'étape majeure divergeant d'un procédé de mise en forme à l'autre se trouvera communément juste après l'extrusion. Cette étape peut être, entre autres, du moulage par injection, du moulage par soufflage, de l'extrusion-gonflage ou encore de l'extrusion en profilés. Tout dépendra du produit désiré et des contraintes imposées par le thermoplastique utilisé [96]. Toutefois, l'une des techniques les plus simples à mettre en œuvre reste l'extrusion en profilé.

Figure 1.2 Exemple de profilé non trivial pour de l'aluminium [97].

Ce procédé consiste comme cela est illustré à la Figure 1.2 à injecter directement dans un profilé le matériau fondu (polymère ou métal) puis de le laisser se refroidir à l'air libre. C'est un procédé continu qui ne nécessite pas de grosses infrastructures et qui permet d'obtenir, sous certaines conditions, des produits d'assez bonne qualité [96]. Il ne permet certes pas d'obtenir toutes les formes désirées, mais il peut s'avérer très intéressant d'un point de vue industriel s'il est appliqué à un polymère thermoplastique tel que le celluloïd.

Le celluloïd est un nom commun désignant un mélange de camphre et de nitrocellulose dont les propriétés varient en fonction de la proportion des deux constituants. Il a été utilisé dans diverses applications allant de la production de pellicules à la fabrication d'explosifs [1]. Son utilisation à causé de nombreux problèmes étant donné sa grande inflammabilité. Il est d'ailleurs intéressant de noter que son transport a été interdit dans les transports publics [2]. Sa production a, par conséquent, fortement diminué avec l'avènement de la photographie numérique et des polyoléfines. Il reste, tout de même, employé dans des domaines tels que l'industrie de l'armement ou celle de la fabrication des balles de tennis de table.

Ce polymère, à l'état fondu, a comme originalité d'appartenir à une classe bien particulière de fluide. Ainsi, il appartient à la famille des polymères viscoélastiques énergétiques. Ces matériaux, sous forme liquide, réagissent de la même manière que les autres polymères communs et peuvent montrer des effets viscoélastiques. Ces effets se caractérisent en extrusion par

l'apparition de défauts, débutant par le gonflement en sortie de filière (die swell) sous certaines conditions[1] et pouvant, dans le pire des cas, se manifester par un écoulement chaotique dû à une fracture de fusion (Gross Melt Fracture) [3].

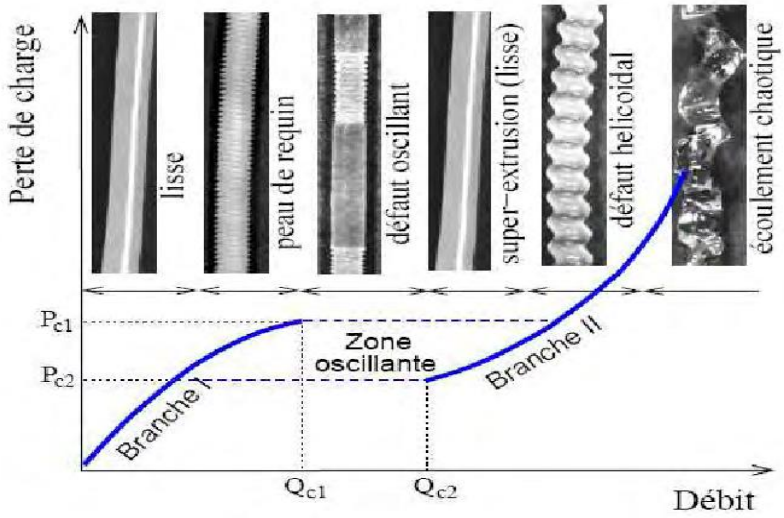

Figure 1.3 Exemple de défauts d'extrusion classés par ordre d'apparition en fonction du débit [108].

Dans tous les cas, le résultat est loin d'être satisfaisant et ne peut être utilisé pour une quelconque application. Ces problèmes sont étudiés depuis près de soixante ans et plusieurs solutions ont été mises en place afin d'éliminer ces différents défauts d'extrusion [4]. Par exemple, l'une d'entre elles, implique des pinces qui resserrent le profilé en sortie à certains endroits afin de minimiser la quantité de matière sortante dans ces zones (voir Annexe H). Cependant, la plupart du temps, ces solutions ont été découvertes de manière empirique puisque la complexité des équations à résoudre est telle qu'il est nécessaire d'utiliser un simulateur, ou de se placer dans des cas simplifiés pour obtenir une solution approchée. Dans des situations telles que les écoulements

[1] A partir d'une certaine valeur du nombre de Weissenberg qui sera défini un peu plus tard.

convergents (sortie de filière), il n'est pas possible de résoudre les équations régissant la mécanique des fluides (p.ex. Cauchy, Navier-Stokes, Euler-Lagrange,…) de manière analytique[2].

Dans le cas des fluides viscoélastiques, tels que certains polymères énergétiques, il est nécessaire de modifier la définition du tenseur des extra-contraintes[3], ce qui complexifie grandement le système pour plusieurs raisons :

- premièrement, cela augmente le nombre d'équations différentielles à résoudre passant de quatre (pour un fluide newtonien non isotherme en deux dimensions) à sept équations.
- deuxièmement, il n'existe pas de modèle universel qui conviendrait à n'importe quel fluide viscoélastique. Plusieurs modèles ont été ainsi développés au cours des décennies passées; chacun avec sa spécificité nécessite de réaliser de nombreux tests rhéologiques sur le polymère étudié de manière à vérifier quel modèle lui conviendrait.

Toutefois, ce problème d'équations aux dérivées partielles (EDP) peut être résolu à l'aide de méthodes d'approximation numériques telles que les éléments finis ou encore les volumes finis. Dans le cas des écoulements convergents, tels que les écoulements en profilé, ces méthodes numériques ont déjà été utilisées afin de prédire et d'optimiser la forme de profilés pour en réduire les défauts [98-100].En revanche, dans le cas des polymères énergétiques, peu d'études ont été réalisées à ce jour [98] et il n'en existe aucune concernant le matériel d'intérêt dans cette étude.

1.2 Objectif général

Étant donnée la nature complexe du domaine des écoulements viscoélastiques, et vu la complexité de la dynamique et des mécanismes impliqués dans des géométries non triviales telles que les profilés, il reste encore aujourd'hui très difficile de prévoir les écoulements de fluides viscoélastiques à travers un profilé. Ce mémoire aura donc pour objectif général de mieux comprendre et prédire l'écoulement du celluloïd dans une filière plate afin de limiter les essais en

---

[2] Il est d'ailleurs intéressant de noter que leur résolution, dans le cas d'un fluide newtonien, fait l'objet d'un des prix du millénaire rapportant un million de dollars pour quiconque prouvera l'unicité de la solution dans le cas général [5].

[3] Qui sera défini un peu plus tard.

laboratoire qui sont à la fois risqués et coûteux. Ce travail s’inscrit dans une optique d’optimisation future des filières d’extrusion du celluloïd.

CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE

Cette revue de la littérature commencera par un aperçu des équations et des modèles mathématiques permettant de prédire le comportement du fluide en écoulement. Ceci permettra d'introduire certains concepts fondamentaux utilisés dans le domaine de la rhéologie afin de mieux appréhender la manière dont apparaissent les défauts de mise en forme courants dans le domaine des écoulements viscoélastiques. Par la suite, suivra l'exposition des contraintes imposées par le celluloïd qui empêchent le recours à certaines méthodes pour éliminer les défauts de mise en forme. Ces contraintes seront un handicap limitant le nombre d'expérimentations réalisables. Pour contourner ce problème, il sera ainsi présenté des méthodes numériques permettant de simuler l'écoulement du celluloïd ainsi que certains logiciels existants pour arriver à ce but.

2.1 Dynamique des écoulements viscoélastiques

L'écoulement des polymères énergétiques de haute masse molaire en profilé est l'un des problèmes les plus complexes à étudier dans le domaine de la simulation numérique. Cela tient en partie au fait qu'il n'existe pas de modèle viscoélastique universel décrivant tous les comportements des écoulements de polymères. Afin d'être plus précis sur ce point, il semble important de commencer d'abord par poser le problème en partant d'un cas newtonien classique et, ensuite, de voir comment il serait possible d'atteindre le niveau de complexité qui sera étudié par la suite.

Pour ce faire, il est possible de commencer en introduisant l'équation de continuité permettant de formaliser mathématiquement la conservation de la masse [6] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\boldsymbol{\nabla} \cdot \rho \vec{v}) = 0 \tag{1}$$

dans laquelle t est le temps, ρ la masse volumique du fluide concerné et $\vec{v}$ le champ de vitesse vectoriel. D'un point de vue physique l'Éq. (1) signifie que, quel que soit l'élément de volume considéré, la totalité des flux massiques entrants est exactement égale aux flux massiques sortants plus un terme d'accumulation. Généralement, cette équation est utilisée en combinaison d'une équation d'état reliant la masse volumique à la pression. Cependant dans le cas du celluloïd, il est

envisageable, moyennant une hypothèse, d'obtenir une forme simplifiée de cette équation s'écrivant sous la forme [10] :

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \tag{2}$$

L'hypothèse à poser pour y arriver est que le celluloïd est un fluide incompressible. Pour le cas de ce fluide viscoélastique, cette affirmation restera valide, étant donné qu'il a déjà été démontré à plusieurs reprises que les polymères sont très peu compressibles [10]. Ce résultat est illustré à la Figure 2.1 pour un copolymère cyclique d'oléfines (TOPAS 5013L-10) avec des variations de masse volumique valant en moyenne 7% pour des variations de pression allant jusqu'à 200 MPa [7].

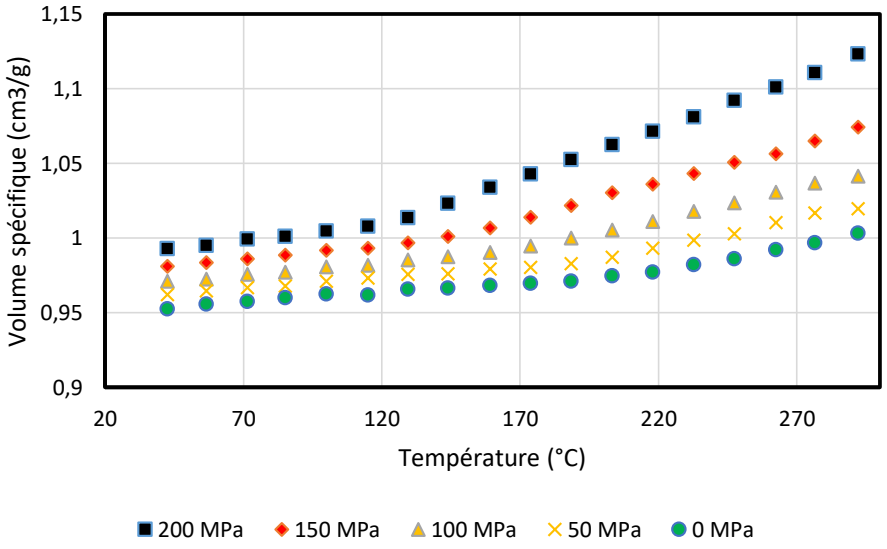

Figure 2.1 Effets de la pression sur le volume spécifique en fonction de la température (d'après [7]).

2.1.1 Équation de la quantité de mouvement appliquée à un fluide viscoélastique

Une fois l'équation de continuité posée, il est maintenant temps de décrire l'écoulement du fluide. Pour ce faire, il est nécessaire d'utiliser l'équation de Cauchy qui, dans un cas général, peut être écrite comme suit [6]:

$$\rho\left((\vec{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\vec{v}+\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}\right)=-\boldsymbol{\nabla}p-\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\tau}+\rho\vec{g} \tag{3}$$

où p représente la pression, $\boldsymbol{\tau}$ représente le tenseur des extra-contraintes et $\vec{g}$ le champs gravitationnelle. L'Éq. (3) permet de décrire à peu près tout type d'écoulement pour peu que le terme $\boldsymbol{\tau}$ soit correctement défini. Or, c'est à ce point que la difficulté apparaît pour les fluides viscoélastiques. Pour le comprendre, il faut prendre la définition de τ pour un cas newtonien :

$$\boldsymbol{\tau}_{newt}=-\mu(\boldsymbol{\nabla}\vec{v}+(\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T) \tag{4}$$

Avec μ représentant la viscosité newtonienne. Ici, la contrainte est proportionnelle au taux de cisaillement et les seules équations différentielles nécessaires dans le cas d'un fluide newtonien se ramènent donc aux équations de Navier-Stokes. Dans un cas plus général, il faudrait aussi y ajouter l'équation de la chaleur de façon à prendre en compte les variations des propriétés physiques avec la température. Ainsi, le problème en trois dimensions nécessiterait de résoudre 5 équations ce qui est impossible à réaliser analytiquement dans le cas général; mais relativement aisé à faire numériquement, pour peu que le problème soit correctement posé.

Toutefois, dans un cas non newtonien viscoélastique comme cela est le cas pour le celluloïd, le problème devient bien plus difficile à résoudre. La définition du tenseur des extra-contraintes doit pouvoir prendre en compte le caractère visqueux du polymère et l'élasticité de ce dernier. Cette élasticité engendre des effets mémoires qui se manifestent par l'apparition de contraintes normales en cisaillement n'existant pas dans un cas newtonien. Pour décrire ce phénomène, il n'y a pas de loi unique qui fonctionne quel que soit le polymère utilisé, ce qui augmente d'un cran la difficulté du problème.

2.1.2 Modèles rhéologiques définissant le tenseur des extra-contraintes

Le premier modèle a été proposé par James Clerk Maxwell. Il peut être représenté par un ressort couplé en série à un amortisseur afin que la contrainte qui en résulte soit à la fois visqueuse et élastique. Ce modèle, excessivement simple, a pour mérite de prédire certains phénomènes, dont l'effet mémoire. Cependant, il a comme inconvénient majeur d'être dépendant du référentiel dans lequel l'observateur se place, ce qui le rend inutile dans le cas d'un écoulement généralisé [8].

Fort heureusement, en modifiant le modèle de manière à le rendre indépendant du référentiel, il est possible de corriger tous ses défauts et d'obtenir le modèle dit de Maxwell convecté. Toutefois, même si ce dernier corrige certaines des limitations du modèle initial, il n'est pas encore suffisamment réaliste pour rendre compte de toute la complexité des écoulements viscoélastiques.

Par conséquent, il a fallu attendre 1950 pour que James Gardner Oldroyd introduise la notion de retard dans les modèles viscoélastiques afin d'obtenir des prédictions représentant fidèlement certains polymères. Ce modèle dit d'Oldroyd-B est toujours utilisé actuellement et peut s'écrire comme suit [8]:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau} \right) = \eta \left(A + \lambda_2 \left(\frac{DA}{Dt} - A \cdot (\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T \cdot A \right) \right) \qquad (5)$$

avec :

$$A = \boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T$$

où λ_1 représente le temps de relaxation, η la viscosité et λ_2 un temps de retard. En somme, l'Éq. (5) présente ainsi la forme générale de quasiment tous les modèles différentiels représentant des fluides viscoélastiques. Les termes de l'équation en λ représentent donc des temps de relaxation caractéristiques pouvant être assimilés à la partie élastique du polymère. Les termes en η sont la partie visqueuse du polymère. Dans le cas du modèle d'Oldroyd-B, ce sont des paramètres constants indépendants du taux de cisaillement. Cependant, il n'est pas toujours raisonnable de les

considérer comme constants; notamment, si le fluide est un polymère rhéofluidifiant subissant de forts taux de cisaillements.

En fait, c'est le cas d'un écoulement en profilé où les taux de cisaillements peuvent rapidement dépasser les 100 s^{-1}, ce qui est suffisant pour diviser la viscosité par 10 par rapport à sa viscosité plateaux pour certains fluides énergétiques comme le montre le Figure 2.2.

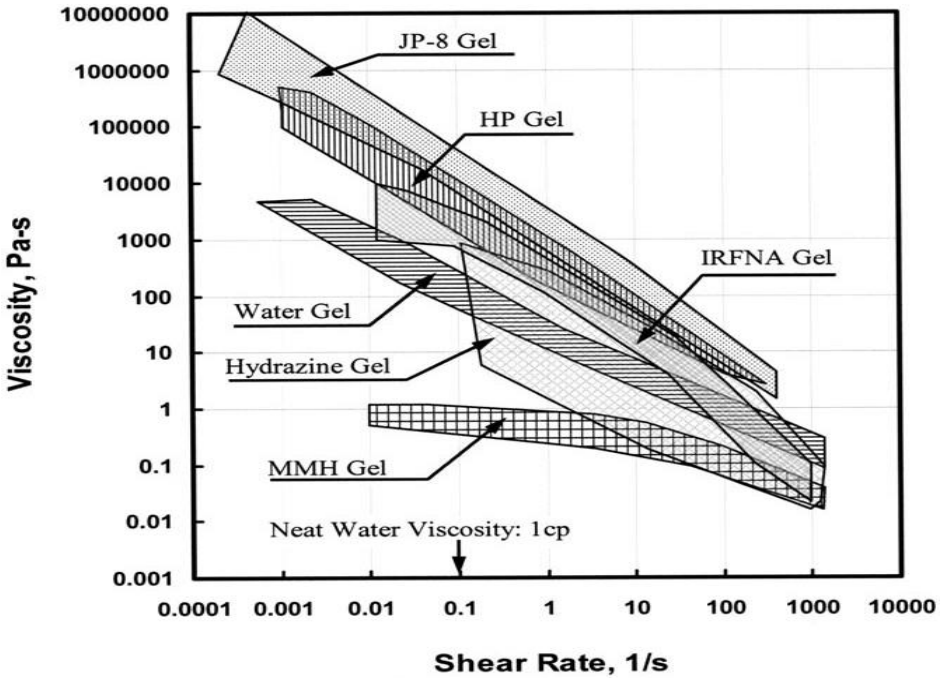

Figure 2.2 Évolution de la viscosité caractéristique des fluides énergétiques [9]

Dans le cas du celluloïd, la viscosité est, elle aussi, très fortement corrélée au taux de cisaillement ce qui implique que le modèle Oldroyd-B ne sera pas une bonne approximation de la réalité physique. Pour obtenir un modèle plus représentatif de ce polymère, il faut considérer des modèles pouvant tenir compte de ce comportement rhéofluidifiant.

Le modèle de White-Metzner est l'un des premiers qu'il est possible de trouver dans la littérature. Il reprend l'équation de Maxwell convecté en affectant le paramètre de viscosité de manière à ce qu'il soit une fonction du taux de cisaillement. Celle-ci peut correspondre, entre autres, à un modèle de Carreau ce qui donnerait l'équation suivante :

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda\left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T\cdot\boldsymbol{\tau}\right) = \eta(\dot{\gamma})(\boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T) \tag{6}$$

avec :

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_0(1 + (l|\dot{\gamma}|)^2)^{\frac{n-1}{2}} \tag{7}$$

où η_0 représente la viscosité à taux de cisaillement nul, l un temps caractéristique du polymère et n un indice de loi de puissance. Il est à remarquer que si le temps de relaxation est nul dans l'Eq. (6), la définition du tenseur $\boldsymbol{\tau}$ devient celle d'un fluide rhéofluidifiant si l'Eq. (7) est utilisée pour définir la viscosité. L'équation de White-Metzner a donc comme avantage d'introduire très simplement la dépendance à la rhéofluidité. Elle permet ainsi de prédire, dans une certaine limite, le comportement de polymère couramment utilisé dans l'industrie [74]. Cette limite vient du fait que le modèle peut dans le cas d'un écoulement élongationnelle prédire une viscosité élongationnelle infinie ce qui est physiquement impossible. Pour rappel, les viscosités élongationnelles sont définies ainsi [10] :

$$\eta_{el1} = \frac{\tau_{33} - \tau_{11}}{\dot{\epsilon}} \quad et\ \eta_{el2} = \frac{\tau_{22} - \tau_{11}}{\dot{\epsilon}} \tag{8}$$

Cela peut être très handicapant dans des procédés d'extrusion-gonflage où ce type d'écoulement est très important. Mais, dans le cas d'un écoulement convergent confiné comme celui d'un profilé, cet inconvénient reste mineur [4].Il est important de signaler que pour certains types d'écoulement (par exemple un écoulement de type Couette à taux de cisaillement constant), il est possible d'obtenir des solutions analytiques comme cela sera vu plus tard [10].

Un second modèle, couramment utilisé dans le domaine de la simulation des écoulements polymériques est le modèle de Giesekus. Ce modèle part encore une fois de l'équation de Maxwell convecté en considérant que les macromolécules orientées créent une force de trainée anisotropique [75]. L'équation incluant le terme de « trainée anisotropique » est définie comme suit [76] :

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda\frac{\alpha}{\eta}\,\boldsymbol{\tau}\cdot\boldsymbol{\tau} + \lambda\left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T\cdot\boldsymbol{\tau}\right) = \eta(\boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T) \tag{9}$$

dans laquelle le terme de « traînée anisotropique » est défini mathématiquement par tenseur des extra-contraintes au carré. Le caractère rhéofluidifiant du polymère est contrôlé par un nouveau

paramètre noté α qui peut varier entre 0 et 1 [76]. Plus la valeur de ce paramètre augmentera, plus le fluide sera rhéofluidifiant. Ce phénomène est illustré à la Figure 2.3.

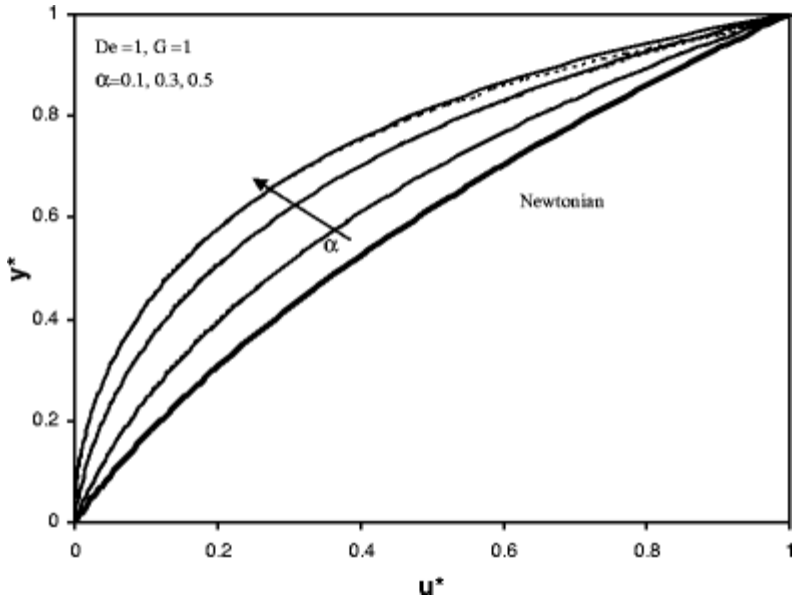

Figure 2.3 Profil de vitesse dans un écoulement Couette-Poiseuille pour différentes valeurs du paramètre α [77].

Il est à noter que, si le paramètre α est égal à 0, l'équation ne prédit plus de comportement rhéofluidifiant. Par ailleurs, l'ajout de ce terme de « traînée anisotropique » permet de régler plusieurs défauts du modèle de White-Metzner. L'un des plus flagrants étant que ce modèle ne prédit pas une viscosité élongationnelle infinie à partir d'un certain taux d'élongation. Cette valeur est, cependant, bornée lorsqu'un fort taux d'élongation est atteint. L'inconvénient majeur de ce modèle reste qu'il est moins précis en élongation que d'autres [78].Cependant, comme expliqué précédemment, cela n'est pas réellement impactant dans cette étude. Par ailleurs, le modèle possède des solutions analytiques permettant d'évaluer le paramètre α [79].

Le troisième et dernier modèle rhéofluidifiant qui sera utilisé dans cette étude est le modèle de Phan-Thien-Tanner. Créé en 1977, celui-ci se base sur la théorie des réseaux où les chaînes polymériques enchevêtrées sont considérées comme un réseau dans lequel les nœuds ne sont pas censés se déplacer par translation. Ils peuvent néanmoins glisser les uns sur les autres ou encore se disloquer en fonction de la contrainte subie [80]. Ce comportement peut être modélisé par l'équation suivante :

$$\boldsymbol{\tau} \cdot e^{\frac{\lambda\varepsilon}{\eta} tr(\boldsymbol{\tau})} + \lambda\left(\frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau} \cdot (\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T \cdot \boldsymbol{\tau}\right) = \eta(\boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T) \tag{10}$$

dans laquelle η représente la viscosité à cisaillement nul. L'Éq. (10) possède ainsi la même forme que les autres modèles à l'exception d'un terme. Ce dernier introduit l'exponentielle de la trace du tenseur des extra-contraintes ce qui donne un caractère non linéaire à cette équation. Le paramètre ε , quant à lui, viendra affecter l'exponentielle de manière à ce que le terme soit plus ou moins dominant, ce qui se caractérise par une variation des effets rhéofluidifiants. Tout cela est illustré sur la Figure 2.4.

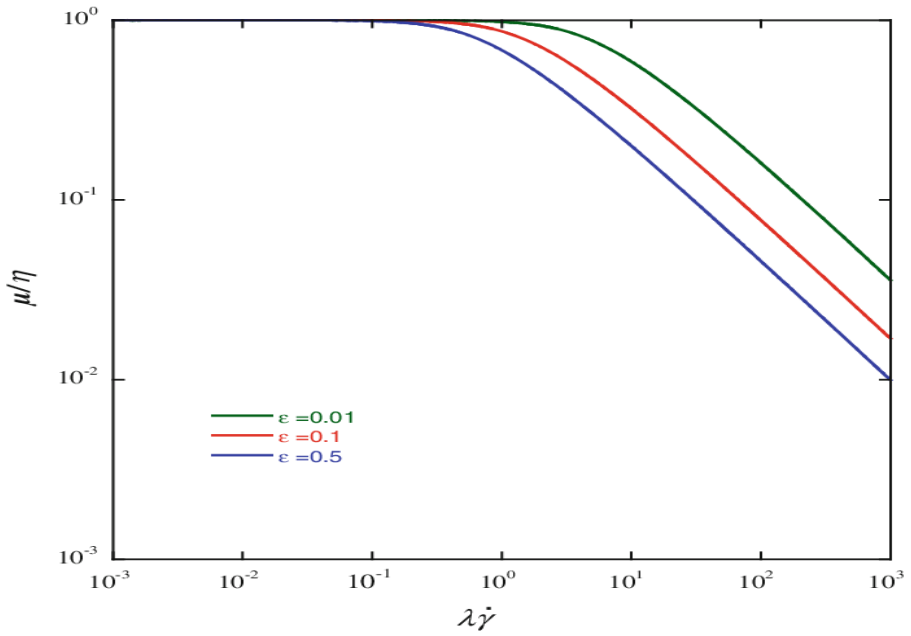

Figure 2.4 Évolution de la viscosité adimensionnelle normalisé en fonction du taux de cisaillement adimensionnelle [81].

Par conséquent, plus le paramètre ε sera proche de 1, plus l'effet rhéofluidifiant sera fort et apparaitra à faible taux de cisaillement [81]. Si jamais le paramètre ε est nul l'équation revient à celle d'un modèle de Maxwell convecté. Il s'avère que la courbe de viscosité en cisaillement obtenue grâce à l'Éq. (10) est très similaire à celle prédite par un modèle de Carreau. La valeur des paramètres de l'Éq. (10) est donc corrélée aux valeurs des paramètres du modèle de Carreau [82].

Ce modèle a l'avantage, comme pour le modèle de Giesekus, de ne pas prédire une viscosité élongationnelle infinie à partir d'un certain taux d'élongation. Cependant, sa non-linéarité est un

handicap qui empêche l'obtention de solutions analytiques même dans des cas très simples. Il est donc courant, dans la littérature, de linéariser le terme exponentiel afin d'obtenir un modèle plus simple pour lequel des solutions analytiques existent. Cette linéarisation se fait en général à l'aide d'une expansion de Taylor d'ordre 1 tel que [57]:

$$e^{\frac{\lambda\varepsilon}{\eta}tr(\boldsymbol{\tau})} \approx 1 + \frac{\lambda\varepsilon}{\eta}tr(\boldsymbol{\tau}) \tag{11}$$

Il existe encore beaucoup d'équations constitutives définissant le tenseur des extra-contraintes pour un fluide viscoélastique. Néanmoins, les trois modèles présentés précédemment sont suffisants pour prédire des écoulements viscoélastiques dans un profilé. Les autres modèles tels que PomPom et FENE étant plus utile pour des écoulements élongationnelles [83], ils ne seront donc pas utilisés dans cette étude qui se limitera aux trois modèles rhéologiques présentés précédemment.

2.1.3 Nombre adimensionnel et définition rhéologique

Avant de présenter les différents nombres adimensionnels et les fonctions rhéologiques, utilisées couramment dans les articles décrivant ce type d'écoulement, il est important d'introduire un certain formalisme permettant de s'affranchir des notions d'espaces tridimensionnelles cartésiens x, y et z. Dans le domaine rhéologique, la notation de ces dimensions est remplacée par les chiffres 1,2 et 3, représentant chacun une dimension avec une définition bien particulière [10]. Ici, la dimension 1 représente la dimension dans laquelle l'écoulement a lieu. Par exemple, dans le cas d'un écoulement dans un cylindre ouvert aux extrémités, cela représenterait la composante z en coordonnées cylindriques. La dimension 2 représente l'espace dans lequel s'établit le plus fort gradient de contrainte en cisaillement. Dans l'exemple du cylindre, cela reviendrait à considérer que 2 équivaut à la composante r en coordonnées cylindriques. La dimension 3, quant à elle, représente la dernière dimension caractérisant les contraintes secondaires ayant le moins d'effets sur l'écoulement. Pour le cas du cylindre, cela équivaut à la dimension thêta ou quasiment aucune contrainte n'est engendrée. Pour un écoulement quelconque (viscoélastique ou classique), il est possible de définir un nombre adimensionnel caractérisant les forces visqueuses et les forces d'inertie. Celui-ci est le nombre de Reynolds (Re) et il peut être écrit sous la forme suivante [6] :

$$Re = \frac{\rho v D_c}{\eta} \tag{12}$$

Ici, D_c représente une longueur caractéristique de l'écoulement qui peut être approximée par un rayon hydraulique. De fait, la valeur de ce nombre permet de dire si l'écoulement est en régime de laminaire, transitoire ou turbulent. Plus il sera grand, plus l'écoulement du fluide se rapprochera d'un écoulement turbulent. En revanche, plus il sera faible, plus le fluide aura tendance à s'écouler en régime laminaire. Dans la plupart des publications, il est admis que, si Re<<1, le fluide s'écoule en régime rampant (ou Stokes) [87]. La différence entre le régime laminaire et rampant est le terme d'inertie de l'Éq. (3) qui sera négligé pour un écoulement rampant [31]. Par ailleurs, étant donné les vitesses qu'il est possible d'atteindre lors de la mise en forme des polymères en fusion et le fait que leurs viscosités dépassent régulièrement le kPa.s, il est d'usage de considérer un écoulement rampant ou laminaire, dépendamment de l'importance à donner au terme d'inertie. Les deux autres régimes ne seront donc pas étudiés dans ce cette analyse puisqu'il est physiquement improbable d'atteindre un Reynolds suffisamment grand dans le cas de l'écoulement d'un celluloïd [11].

Les deux nombres adimensionnels qu'il est nécessaire de définir après le nombre de Reynolds sont le nombre de Deborah et le nombre de Weissenberg [10]. Le premier représente le temps de relaxation caractéristique d'un polymère par rapport au temps caractéristique d'un écoulement :

$$De = \frac{t_{polymère}}{t_{écoulement}} \tag{13}$$

Le second représente le rapport entre les forces élastiques et les forces visqueuses :

$$We = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\tau_{12}} \tag{14}$$

Il est à noter que, dès lors que le modèle utilisé est de forme Oldroyd_B, le nombre de Weissenberg est strictement égal au taux de cisaillement multiplié par le temps de relaxation λ du polymère. Dans la plupart des études réalisées, le temps caractéristique de l'écoulement est égal à l'inverse du taux de cisaillement multiplié par le temps de relaxation du polymère. Ce qui engendre une confusion entre ces deux nombres puisqu'ils ont la même expression. Il est donc assez commun

d'approximer le nombre de Deborah par celui de Weissenberg même si cela est au sens strict faux. Toutefois, il est excessivement difficile de définir les forces normales caractéristiques d'un écoulement quelconque. Cela étant grandement dû au fait que les forces normales sont des variables difficilement mesurables dans certaines géométries. C'est donc aussi pour cette raison que, dans la majorité des études, le nombre de Weissenberg et celui de Deborah seront considérés comme identiques.

Pour finir, il est nécessaire de définir deux fonctions rhéologiques indispensables à l'étude de l'écoulement d'un polymère. Celles-ci sont la viscosité et le premier coefficient de contrainte normal. La viscosité notée η représente la résistance à l'écoulement et est définie comme :

$$\eta = \frac{\tau_{12}}{\dot{\gamma}} \tag{15}$$

Dans le cas d'un écoulement à viscosité constante, cette valeur sera invariante puisque la contrainte en cisaillement est proportionnelle au taux de cisaillement. En revanche, dans le cas d'un écoulement polymérique, la viscosité dépend du taux de cisaillement. Cela s'explique par le fait que les macromolécules enchevêtrées auront tendance à se mouvoir les unes par rapport aux autres dès lors que le fluide se met en mouvement. Cette théorie est connue sous le nom de théorie de la reptation. Elle prévoit qu'un écoulement se produisant à haut taux de cisaillement verra ses macromolécules serpenter plus rapidement. Ceci engendrant une relaxation plus rapide des contraintes internes dans la macromolécule et conséquemment une diminution de la viscosité lors d'une augmentation du taux de cisaillement [12].

En ce qui concerne le premier coefficient de contraintes normales, il caractérise les forces normales que génère un fluide en écoulement. Il s'écrit comme suit:

$$\psi_1 = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\gamma}^2} \tag{16}$$

Il est à noter que ce coefficient est souvent utilisé pour vérifier la validité des résultats obtenus par une simulation numérique étant donné que, pour certains cas et modèles, il existe une solution analytique connue pour cette variable.

2.1.4 Équation de la chaleur appliquée à un fluide viscoélastique

Du point de vue de la thermodynamique certaines propriétés physiques décrivant un fluide quelconque devraient être fonction de la température [4]. Cela est le cas de la viscosité, du temps de relaxation et de la masse volumique qui sont inversement proportionnels à la température dans le cas d'un liquide [6]. Dans le cas des polymères en fusion il est possible d'établir un lien direct entre la viscosité et la température à l'aide de la relation suivante en considérant que la masse volumique du fluide est constante [10]:

$$a_T = \frac{\eta_T}{\eta_{T_{ref}}} \frac{T_{ref}}{T} \tag{17}$$

Cette relation fait intervenir un facteur de glissement noté a_T permettant de superposer les courbes de viscosité sur une courbe maîtresse de référence grâce au principe de superposition temps-température [84]. Il suffit donc de trouver une relation entre la température et le facteur de glissement et d'utiliser une viscosité de référence pour connaître la viscosité à une température donnée. Cette relation peut prendre plusieurs formes en fonction de la nature amorphe ou cristalline du polymère entre autres. Cependant, cette étude s'intéresse à la simulation numérique de l'écoulement du celluloïd en profilé et non à la caractérisation exacte de toutes les facettes de la rhéologie du celluloïd. Un modèle simple est donc ici présenté afin de faire le lien entre viscosité et température. Or, l'une des relations les plus simples (faisant intervenir le moins de paramètres) qu'il est possible de trouver est celle d'Arrhenius. Elle s'exprime mathématiquement comme suit [10]:

$$a_T = e^{\frac{E}{RT_0} - \frac{E}{RT}} \tag{18}$$

dans laquelle R et E représentent respectivement la constante des gaz parfaits et l'énergie d'activation apparente du processus de relaxation [85]. En replaçant a_T dans l'Éq. (17), le lien entre viscosité et température apparaît. Ce lien permet de dire que si l'écoulement n'est pas isotherme alors l'équation de la chaleur devrait être prise en compte étant donné que le terme de viscosité est prépondérant dans les équations de la quantité de mouvement et dans les modèles rhéologiques.

L'équation de la chaleur est une équation aux dérivées partielles initialement développée par Joseph Fourier en 1807 [6]. Elle permet de prédire, entre autres, comment évoluent les champs de température ainsi que les flux qui leur sont associés. En considérant que la conductivité thermique k est constante et que la masse volumique varie peu avec la température (ce qui est le cas pour la plupart des polymères) [86], elle s'écrie de la manière suivante [6] :

$$\rho Cp \frac{DT}{Dt} - k\boldsymbol{\nabla}^2 T = \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\nabla}\vec{v} \tag{19}$$

L'Éq. (19) peut être ainsi séparée en deux parties distinctes. Une partie à gauche du signe égal contenant (respectivement de gauche à droite) un terme de convection et un terme de conduction. Une partie à droite du signe égal symbolisant la dissipation visqueuse. Ce terme de dissipation visqueuse noté $\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\nabla}\vec{v}$ est induit par la résistance à l'écoulement du fluide et peut être vu comme une source de chaleur potentielle. Il n'est cependant pas rare de le négliger pour des fluides peu visqueux [6]. Dans le cas des polymères tels que le celluloïd, la viscosité à taux de cisaillement nul peut facilement dépasser 10 kPa·s [31]. Il n'est donc pas forcément raisonnable de négliger ce terme. Dans le cas de l'écoulement du HDPE dans une conduite cylindrique, par exemple, il est possible de démontrer que la dissipation visqueuse peut engendrer une augmentation de température de 50 K [88]. En somme, l'effet de la dissipation visqueuse devrait donc fortement impacter l'écoulement du fluide ce qui augmente d'un cran la complexité du problème à résoudre.

2.2 Mise en forme du celluloïd et défaut d'extrusion

Le celluloïd est un composé qu'il est possible de mettre en forme par des techniques utilisées couramment dans le domaine de la plasturgie sous certaines conditions [68]. L'application de ces techniques au celluloïd dépendra grandement du produit final souhaité. Dans cette section, l'accent sera mis sur les possibilités de mise en forme existantes ainsi que les problèmes qu'il est possible de rencontrer dans le cas d'un écoulement viscoélastique.

2.2.1 Technique de mise en forme des polymères

Le polymère sortant des unités de polymérisation courantes se présente souvent sous la forme d'un solide très peu malléable à température ambiante. Il est donc d'usage de le faire fondre

à l'intérieur d'une extrudeuse en augmentant progressivement la température du polymère. Dans le cas du celluloïd, un solvant est ajouté au mélange afin de diminuer la viscosité du composé.

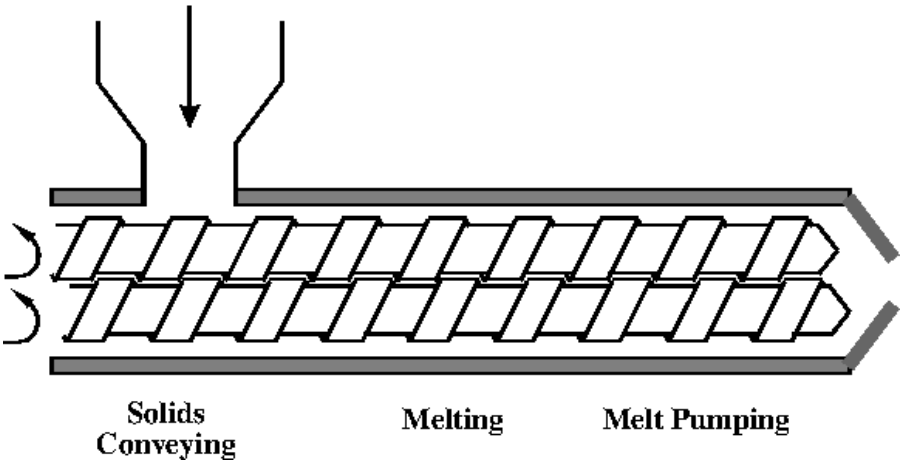

Figure 2.5 Schéma général d'une extrudeuse bi-vis [13].

Cette machine, utilisée pour la mise en forme des thermoplastiques, se compose de trois éléments majeurs :

- une trémie, qui recevra le polymère en petit morceau ayant souvent la forme de granulés, et qui permettra de convoyer ce polymère solide à la vis d'Archimède;
- une vis d'Archimède couplée à un élément chauffant permettant de faire fondre le polymère tout en l'acheminant vers l'alimentation;
- une alimentation qui recevra le polymère fondu et l'enverra vers le procédé de mise en forme.

Le choix des deux premières parties est d'ordinaire très important, car ce sont celles-ci qui permettront de transformer le polymère solide en un fluide malléable qui pourra être structuré à l'aide d'un procédé mis en forme. Toutefois, dans cette étude, ce sujet ne sera pas abordé étant donné que le domaine d'intérêt présenté concerne la mise en forme dans un profilé.

De manière générale, cette technique consiste à connecter la sortie de l'extrudeuse à une géométrie ouverte à ces extrémités, permettant ainsi l'écoulement continue d'un flux de matière

ayant la forme de la sortie de cette géométrie. Cette technique est la plus simple à mettre en place puisqu'elle consiste à simplement connecter le profilé et à laisser la matière s'écouler continuellement vers la sortie. Elle offre, comme avantages majeurs, de pouvoir fonctionner en régime permanent avec une simplicité de mise en œuvre inégalée dans ce domaine. Toutefois, elle n'est pas exempte d'inconvénients, le plus contraignant étant celui des formes usinables [14].

En effet, certaines formes, trop complexes, ne peuvent tout simplement pas être générées par cette méthode. Les briques de Lego, par exemple, avec une forme alternant plusieurs aspérités ne peuvent être obtenues grâce à cette technique, puisqu'il est impossible de générer un profilé pouvant expulser le fluide de manière ponctuellement discontinue [14]. Il sera donc préférable, dans ces cas particuliers, d'utiliser une technique appelée moulage par injection. Celle-ci fait intervenir un moule préalablement usiné. La mise en forme en profilé sera donc plus indiquée dans le cas où les géométries des produits finis sont simples, notamment pour une feuille.

La contraction est d'ailleurs un des cas les plus couramment étudiés à l'aide des simulations numériques lorsque ces dernières ont besoin d'un cas test pour vérifier leur résultat. Ceci est majoritairement dû au fait que cette géométrie possède des solutions analytiques validées expérimentalement dans certains cas [15]. Pour finir, cette forme est la géométrie la plus simple qui permet de générer un gonflement en sortie de filière. Ce gonflement est le premier défaut de mise en forme qu'il est possible d'observer à faible nombre de Weissenberg. Il est à noter que, dans ce cas précis, les nombres de Deborah et de Weissenberg ont strictement la même définition que celle présentée précédemment c'est-à-dire :

$$We = De = \dot{\gamma}\lambda \tag{20}$$

2.2.2 Défauts classiques d'extrusion

Les défauts d'extrusion apparaissent très régulièrement lors de la mise en forme des polymères en profilé. Il se manifeste généralement à faible Weissenberg par un gonflement en sortie de géométrie et s'aggrave jusqu'à générer ce qui est communément appelé en anglais un Gross Melt Fracture (fracture de fusion) [16]. Cette aggravation est due jusqu'à un certain point, à l'augmentation de la vitesse du fluide qui accroit les forces de contraintes normales générées par la partie élastique du fluide. Puisque de très faibles vitesses sont suffisantes pour générer des

défauts, il est important de signaler que ces phénomènes sont complètement déconnectés du nombre de Reynolds, car ils se produisent, la plupart du temps, à des Reynolds très faibles [10]. Par conséquent, il est difficile d'imputer ces phénomènes à une turbulence quelconque. Ce point étant clarifié, il est maintenant temps d'étudier chacun de ces défauts par ordre croissant de Weissenberg.

2.2.2.1 Gonflement en sortie de filière

Le gonflement en sortie de filière est le premier défaut qu'il est possible de rencontrer lors de la mise en forme en profilé. Il n'est pas entièrement dû aux contraintes normales, mais celles-ci contribuent significativement à son ampleur. En effet, le gonflement s'observe même dans le cas d'un fluide newtonien comme l'eau. Il s'explique d'abord par le fait que dans la filière l'écoulement est contraint aux parois ce qui engendre le profil parabolique caractéristique d'un écoulement laminaire. Lors de sa sortie, aux frontières du fluide, l'air n'exerce pas de contraintes sur le fluide. Ceci engendre un réarrangement du profil de vitesse de sorte que l'écoulement passe d'un profil parabolique à plat, ce qui explique pourquoi tout fluide newtonien ou non newtonien, en régime laminaire, sortant d'une filière, aura toujours tendance à gonfler en sortie [18].

Cependant, tel que cité précédemment, cela ne suffit pas à expliquer l'ampleur du phénomène dans le cas d'un fluide viscoélastique. Par conséquent, il est impératif de reprendre l'analogie du ressort pour illustrer la deuxième partie du phénomène. Dans un écoulement contraint quelconque, le fluide en écoulement subit un cisaillement se caractérisant par une contrainte sur deux plans orthogonaux. Si le polymère est représenté par une bande élastique, cela revient à considérer que ce dernier est étiré dans le sens de l'écoulement et comprimé dans la direction orthogonale à l'écoulement. Dès lors qu'il est exposé à l'air libre, il ne subit plus aucune contrainte puisque l'air ambiant ne le permet pas. Il apparaît donc clairement que le ressort reprendra sa forme initiale ce qui forcera le fluide à gonfler dans le sens transverse de l'écoulement [17]. La Figure 2.6 permet de l'illustrer.

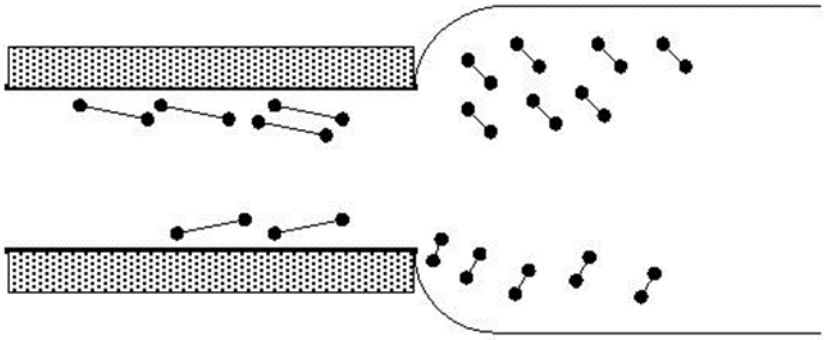

Figure 2.6 Représentation d'un gonflement en sortie de filière [19].

D'un point de vue analytique, il n'existe qu'une manière de prévoir le gonflement en sortie de filière. Il s'agit de l'utilisation de la formule analytique suivante démontrée par Tanner en 1970 [17]:

$$\frac{D_{gonflement}}{d_{sortie}} = \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{N1}{2\tau_{12}}\right)^2\right]^{\frac{1}{6}} + 0.13 \tag{21}$$

dans laquelle $D_{gonflement}$est le diamètre du gonflement, d_{sortie} est le diamètre de sortie de la filière, $N1$ représente la différence de contraintes normales et τ_{12} représente la contrainte en cisaillement.

L'Eq. (21) (nommée loi de Tanner) implique que le ratio de gonflement (D/d) entre l'entrée et la sortie est une fonction des forces de cisaillement ainsi que des forces normales. Il est possible de remarquer que le gonflement en sortie de filière sera d'autant plus grand que la différence de contraintes normales sera supérieure aux contraintes en cisaillement. Conséquemment, cette formule a pour avantage de donner un lien direct, entre le gonflement et les contraintes, qu'il est possible d'obtenir analytiquement ou par simulation numérique. Cependant, tel qu'il est précisé dans l'article de Tanner, cette approximation est limitée par plusieurs hypothèses permettant de simplifier suffisamment l'équation afin d'obtenir une solution analytique. Si jamais une des hypothèses était fausse, il serait nécessaire d'utiliser la forme non simplifiée des équations viscoélastiques. Celle-ci implique l'utilisation d'une technique de simulation numérique dans le

but de résoudre les équations de manière approchée. Par contre, elle reste beaucoup plus complexe à mettre en place et implique de grandes connaissances tant dans le domaine de la rhéologie que dans celui de la simulation numérique. Ce point sera, d'ailleurs, développé dans la section dédiée à la simulation numérique.

2.2.2.2 Défauts « peau de requin » et « adhérence-glissement »

Les deux prochains défauts présentés se produisent juste après le gonflement en sortie de filière. Ce sont tous deux des défauts de surface induits par une augmentation ponctuelle significative de la contrainte normale en sortie de l'écoulement. Ils sont donc illustrés dans la Figure 2.7 en fonction du taux de cisaillement auquel ils se produisent.

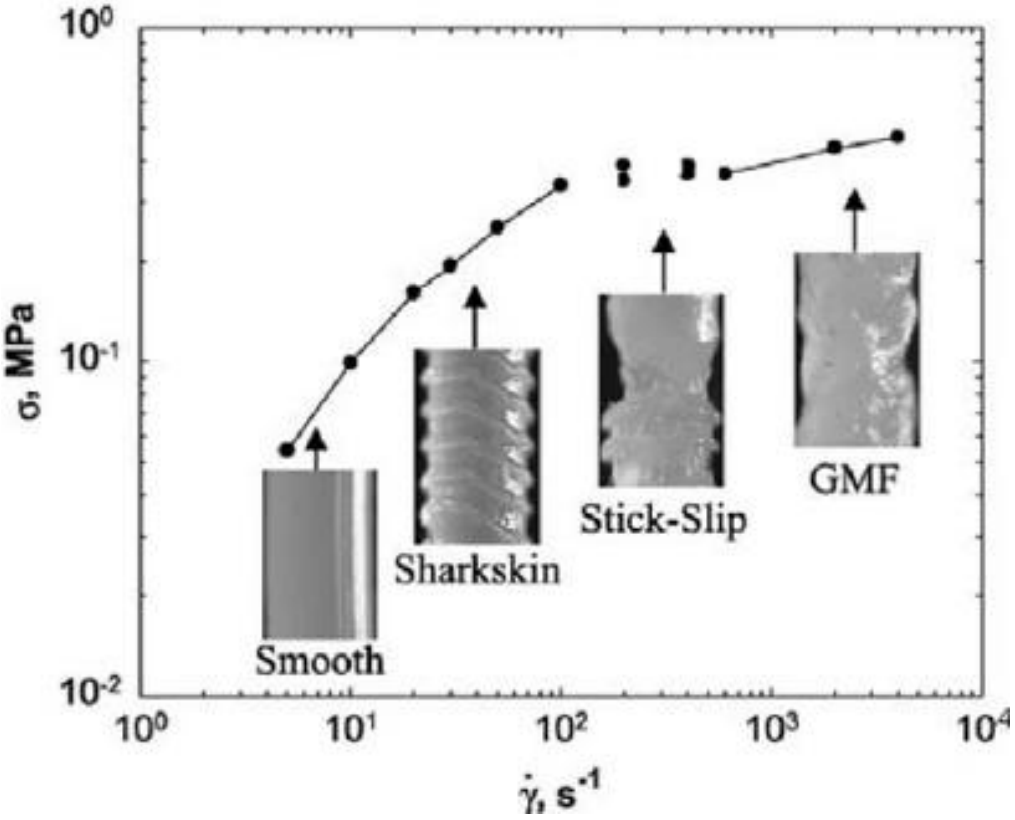

Figure 2.7 Évolution des défauts d'extrusion en fonction du taux de cisaillement (GMF signifie Gross Melt Fracture ou fracture de fusion en français) [20]

Il est possible de remarquer que le défaut « peau de requin » apparaît juste avant le défaut « adhérence-glissement ». Le défaut « peau de requin » tire son nom de sa forme très similaire à celle de la peau des requins. Cet effet est, en partie, dû au bord de sortie très écharpée des profilés qui engendre une augmentation ponctuelle de la contrainte normale en sortie. Cette augmentation très soudaine est accompagnée d'une diminution périodique de la contrainte normale due, en majeure partie, à la nature élastique du fluide [20]. Cette variation de contrainte normale se traduit par des augmentations et diminutions de gonflement très régulières. Il est d'ailleurs possible de le constater grâce à la formule de Tanner. Si la contrainte normale est une fonction périodique, alors le gonflement devient lui aussi une fonction périodique.

En ce qui concerne le défaut « adhérence-glissement », cela devient un peu plus complexe, car ce phénomène est à mi-chemin entre les défauts GMF et « peau de requin ». En effet, ce phénomène apparaît dès lors que les contraintes normales sont suffisamment fortes pour faire basculer le fluide d'un écoulement en régime permanent à un écoulement transitoire systématique. Pour reprendre l'analogie du ressort, cela reviendrait à mêler plusieurs milliers de ressorts entre eux de manière à ce que certains comprimés forcent les autres ressorts à être tendus. Cette configuration engendre une situation telle qu'à partir d'un certain taux de cisaillement, le fluide redevient périodiquement stable sans le moindre défaut en surface [21].

Ceci est un paradoxe puisqu'une augmentation du taux de cisaillement devrait normalement entraîner plus de contraintes normales et donc plus de défauts. Toutefois, cette situation étrange ne se produit que sous certaines conditions bien précises pouvant ne jamais apparaître; ce qui explique la zone de transition discontinue du diagramme précédent.

2.2.2.3 Fracture de fusion (Gross Melt Fracture)

Le dernier défaut qu'il est possible de croiser dans le cas d'un écoulement en profilé est la fracture de fusion plus communément appelée GMF (Gross Melt Fracture). Ce défaut apparaît pour de très hauts nombres de Weissenberg (>1000) et se caractérise par un écoulement complètement erratique. Ce comportement s'explique par le fait que les contraintes normales deviennent si grandes que l'écoulement passe d'un régime permanent à un régime pulsé. Les forces viscoélastiques faisant que les contraintes normales s'accumulent à l'intérieur du fluide (et non plus en surface comme c'est le cas pour le défaut « peau de requin »), cela entraîne une déformation

volumique du fluide dès qu'il se retrouve en surface libre [22]. Ce défaut ne sera pas étudié ici parce que la très grande viscosité du celluloïd et sa sensibilité aux variations de température, due à la friction, rendent la génération d'un GMF hautement improbable.

2.2.3 Contraintes de mise en forme dues à l'utilisation du mélange nitrocellulose/camphre

Au vu des défauts et modèles exposés précédemment, il sera présenté dans cette section le comportement du celluloïd lors de sa mise en forme. Or, les matériaux énergétiques tels que le celluloïd sont des composés thermosensibles difficiles à mettre en forme. Cette difficulté vient du fait que les polymères en fusion ont tendance à générer de la dissipation visqueuse qui engendre une élévation de la température au fur et à mesure que le fluide s'écoule le long du profilé. Dans le cas d'un polymère énergétique, cette génération peut s'avérer critique puisque la température de thermoplasticité peut même dépasser celle de décomposition thermique [23]. Ce phénomène s'applique parfaitement au mélange nitrocellulose/camphre plus communément appelé celluloïd.

La nitrocellulose est un polymère énergétique fibreux de la famille des thermoplastiques. Découvert par le Docteur Friedrich Schönbein en 1846, elle est produite par immersion de cellulose (coton, bois,…) dans un bain composé d'acide nitrique et sulfurique. Cette cellulose est un polymère composé de cycle glucose contenant chacun trois groupements OH. Ces groupements OH réagiront avec l'acide nitrique par estérification pour former des groupements NO_2 qui viendront remplacer les groupements OH de la cellulose [1]. Cette réaction produisant de la nitrocellulose et de l'eau est illustrée sur la Figure 2.8.

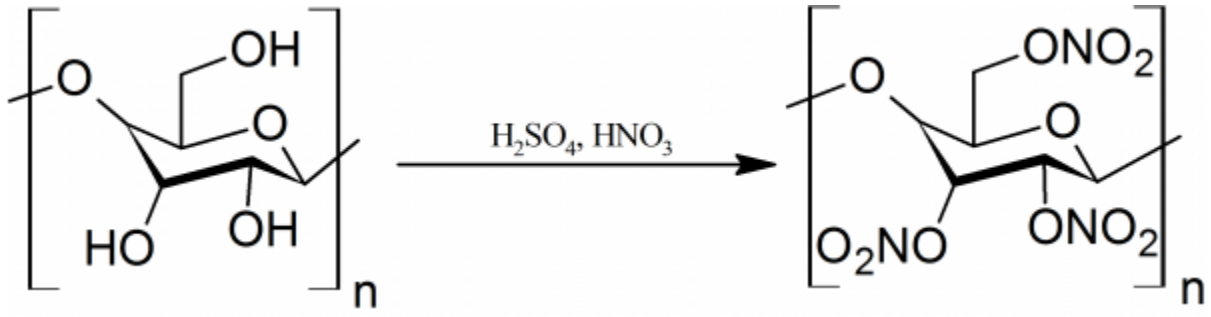

Figure 2.8 Schéma de nitration de la cellulose [28].

À première vue, l'utilisation d'une solution composée essentiellement d'acide nitrique semble plus intéressante étant donné que cela permettrait d'avoir un réactif en excès qui engendrerait la réaction de tous les groupements OH. Néanmoins, il apparaît qu'à forte concentration d'acide nitrique (>90%), la nitrocellulose se dilue localement avec l'eau formée lors de la réaction et se répand dans le reste des fibres non nitrées, engendrant ainsi une dissolution qui conduit à une gélatinisation des fibres empêchant donc toute nitration de cette zone. Le mélange durcit, par endroits, de manière à ce que les zones touchées deviennent complètement insolubles. Pour contrer ce problème, la solution qui a été trouvée consiste à ajouter de l'acide sulfurique. De fait, cet ajout permettra une réaction avec les molécules d'eau formées lors de la nitration de la cellulose. Ceci empêche les molécules d'acides nitriques de former les zones de durcissement insoluble et permet d'atteindre un taux d'azote théorique maximal de 14.1%. Celui-ci correspond à une cellulose dont tous les groupements OH ont été remplacés par des groupements NO_2. Dans la réalité, le taux d'azote maximal atteint est de 13.9%, car plusieurs facteurs rendent certains groupements OH plus difficiles d'accès. Ce taux d'azote sera ainsi la principale caractéristique différenciant les nitrocelluloses les unes des autres [1].

Il existe différentes classifications de la nitrocellulose dépendamment de son taux de nitration. Cette classification se fait comme suit :

- mono-nitratée (si le taux d'azote est inférieur à 6.76%) où statistiquement la majorité des cycles glucoses ne contiennent que 1 groupement NO_2;
- bi nitratée (si le taux d'azote est proche de 11.12%) où statistiquement la majorité des cycles glucoses contiennent 2 groupements NO_2;
- tri nitratée (si le taux d'azote est de 14.12%) où la quasi-totalité des cycles glucoses contiennent 3 groupements NO_2.

En conséquence, cette catégorisation de la nitrocellulose permet ainsi de déterminer le niveau de réactivité de la nitrocellulose. Une nitrocellulose, avec un taux de nitration supérieur à 12%, sera classée CP (CP = coton poudre), ce qui correspond à un grade militaire et servira d'explosif. En revanche, une nitrocellulose avec un taux de nitration inférieur à 12% sera classée CA2 ou CA4 (CA= coton azoté), ce qui est un grade dit « industriel » et elle sera utilisée dans la production de laques, produits cosmétiques, balles de ping-pong, etc.

Une fois fabriquée, séchée et stabilisée, la nitrocellulose se présente comme un solide qui peut être amorphe ou semi cristallin dépendamment de plusieurs facteurs dont le taux d'azote. Cependant, cette structure semi cristalline ne commence à apparaitre sur un cliché de diffraction qu'à partir de 10% d'azote. Une étude de l'Université Cranfield a d'ailleurs montré que pour de la nitrocellulose fabriquée récemment et possédant un taux d'azote de 13,55%, son niveau cristallinité peut alors atteindre 29 [25]. La nitrocellulose ainsi formée, si elle n'est pas plastifiée, donnera un solide très rigide. Cette rigidité n'est pas pratique lors de la mise en forme de cette dernière. Il faudra donc la mélanger à un plastifiant afin de l'assouplir et de la rendre ainsi plus malléable. Pour ce faire, il est nécessaire de la solvater dans un mélange qui peut être constitué d'un alcool, d'une cétone ou d'éther. Dans le cas du celluloïd, il est possible d'utiliser un mélange composé d'alcool éthylique et d'acétone dans un ratio 1:2, ce qui forme un gel auquel on incorpore le camphre qui est le plastifiant utilisé dans la composition du celluloïd [26] :

Au vue de la très grande viscosité du mélange, il est d'usage d'utiliser un malaxeur sigma afin d'obtenir une pâte malléable contenant la nitrocellulose et le plastifiant. Toutefois, cette opération n'est pas sans risque puisque le mélange alcool/acétone est assez volatile : il se peut que la pâte s'échauffe par friction et qu'il y ait une grande perte de solvant. Cette dernière engendrerait une augmentation de la température du mélange et causerait son ignition. Il faut donc être particulièrement précautionneux lors de ce mélange et toujours s'assurer qu'il y ait suffisamment de solvant [27]. La concentration de plastifiant, ainsi utilisée, affectera les propriétés mécaniques pour rendre le solide plus ou moins malléable dépendamment des propriétés souhaitées.

Dans le cas du celluloïd, la concentration de camphre souhaitable pour cette étude serait située à environ 20 % puisqu'à ce pourcentage, la contrainte à la rupture est maximale comme le montre la Figure 2.9 [29].

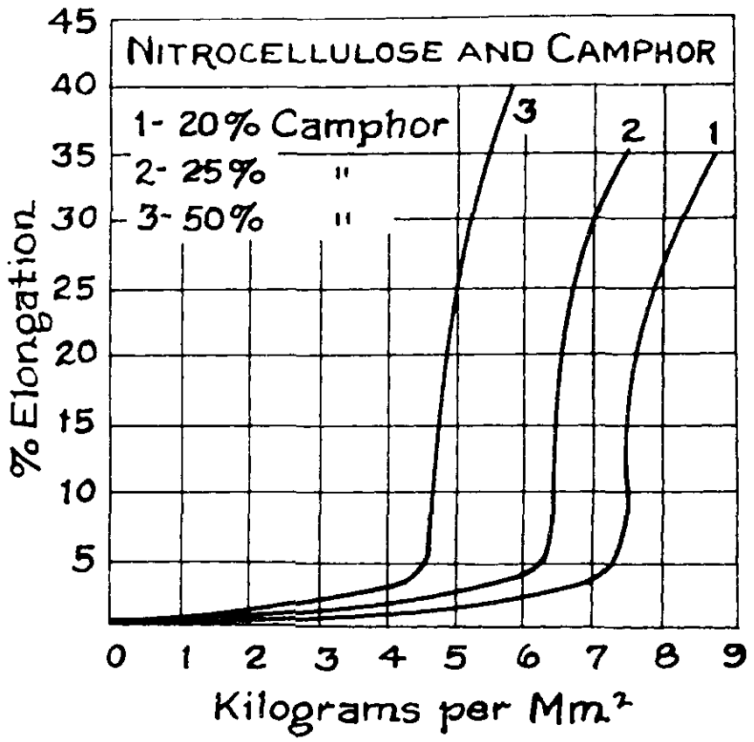

Figure 2.9 Test d'élongation du celluloïd [29].

Pour finir, il faut noter qu'il est nécessaire d'utiliser un stabilisant à cause de la tendance qu'a la nitrocellulose à se dégrader au cours du temps. Cette dégradation est auto catalytique, car la nitrocellulose produit un acide qui catalysera sa réaction et engendrera une réaction exothermique en chaîne. Pour éviter cela, de la centralite sera ajoutée au mélange afin de neutraliser l'acide produit lors de la dégradation du composé ce qui permettra d'augmenter la durée de vie de notre polymère.

L'étude de ce celluloïd sera donc complexe parcequ'elle nécessitera de manipuler un mélange sensible à la chaleur. Or, cela nécessiterait également de coupler les équations précédentes à l'équation de la chaleur, car un fluide en mouvement génère de l'énergie par dissipation visqueuse. Une étude de 1987, de Carter et Warren, présente d'ailleurs des résultats montrant la manière dont la température impacte la rhéologie du fluide. Il est ainsi possible de voir qu'un mélange double base nitrocellulose/nitroglycérine, utilisant de l'acétone comme solvant, possède une contrainte et des paramètres seuils d'Herschel -Bulkley diminuant avec la température. Pour rappel, la contrainte τ issue de l'équation d'Herschel- Bulkley s'écrit sous la forme suivante [10] :

$$\tau = \tau_0 + k(\dot{\gamma})^n \tag{22}$$

où τ_0 représente la contrainte seuil alors que k et n représentent des paramètres du modèle. Il est toutefois important de noter que si n<1 l'écoulement est rhéofluidifiant, ce qui est toujours le cas pour tous les mélanges utilisés par Warren et Carter [30]. L'article de ces chercheurs étudie l'effet d'une contraction instantanée sur l'écoulement du polymère énergétique. Ainsi, ils versent dans une extrudeuse le mélange NC/NG afin de voir comment un angle d'entrée de 90° peut affecter le gonflement en sortie de filière. Ils montrent ainsi que celui-ci, pour ce genre de mélange, peut atteindre jusqu'à 1.5 fois la taille de sortie de la filière.

Toutefois, ces résultats ne sont que des tests rhéologiques utilisant, certes le modèle Herschel-Bukley, mais ne permettant pas vraiment de prédire avec exactitude le gonflement en sortie de filière ou tout autre problème courant dans l'industrie polymérique. Pour cela, il faudra attendre 1992 pour que Tanner et Beverly reprennent les travaux de Warren et Carter afin de simuler l'écoulement avec des modèles plus riches et plus complexes [102]. Dans cette étude, les auteurs confrontent les résultats obtenus via la simulation par des modèles HB (Herschel-Bukley) et MPTT (Modified Phan Thien Tanner) afin de voir comment cela affecterait le résultat.

À ce niveau, le modèle HB est incapable de prédire un gonflement en sortie de filière quelconque puisqu'en cisaillement, pour ce modèle, les contraintes normales sont nulles en tout temps. Or, le gonflement en sortie de filière est en grande partie dû aux contraintes normales non nulles en cisaillement. Le seul modèle pouvant donc prédire l'évolution du gonflement en sortie de filière dans cette étude sera donc le modèle MPTT.

En effet, le modèle MPTT utilisé dans cet article est une version améliorée du modèle PTT présenté par Phan Thien et Tanner et a deux avantages majeurs. D'une part, il permet de prédire avec une certaine exactitude la contrainte normale; d'autre part, il fait intervenir la trace du tenseur des extra-contraintes, ce qui permet de prédire un écoulement rhéofluidifiant. Warren et Carter ayant déjà démontré que le fluide est un rhéofluidifiant, toutes ces preuves tendent à dire que le modèle MPTT est une alternative qui permet de prédire l'écoulement du celluloïd. Cela est appuyé par les résultats à la Figure 2.10, qui montre que le modèle MPTT prédit assez précisément le gonflement en sortie filière pour différents taux de cisaillement .

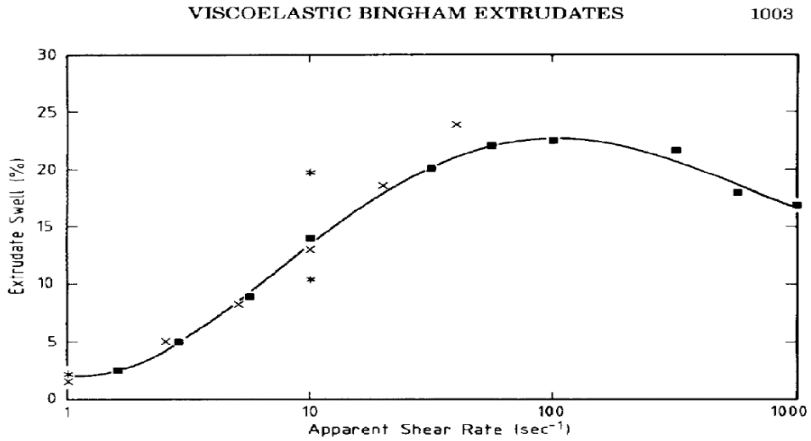

Fig. 9. Computed values of the swelling ratio for the MPTT model as a function of apparent shear rate for a propellant dough extruded through a 100 mm long axisymmetric die of radius 1 mm maintained at a reference temperature of 20°C. —■— Experimental curve; × numerical solution λ = 0.264; * (upper) numerical solution λ = 0.35; * (lower) numerical solution λ = 0.15.

Figure 2.10 Gonflement en sortie de filière pour un mélange NC/NG [102].

Ces résultats sont obtenus à faible temps de relaxation : ils ne représentent pas toute la complexité du système. Par ailleurs, il est possible de voir sur la Figure 2.10 que le modèle MPTT, tout comme le modèle HB, diverge clairement des résultats expérimentaux à haut taux de cisaillement apparent.

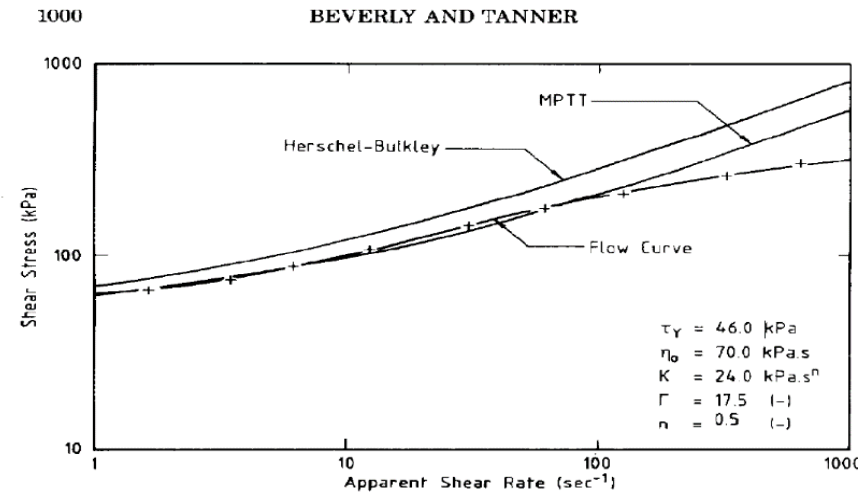

Fig. 6. Computed values of yield stress, reference viscosity, fluid consistency, dimensionless Γ, and the power law index chosen to give a line of best fit when compared to the experimental flow curve of a propellant dough. — + — Experimental flow curve; —— (upper) Herschel–Bulkley scheme; —— (lower) MPTT model.

Figure 2.11 Évolution de la contrainte en cisaillement pour un mélange NC/NG [102].

Les contraintes imposées par l'écoulement dans une filière d'un celluloïd composé de nitrocellulose sont donc :

- la stabilité thermique, qui rend complexe la manipulation du fluide et nécessite l'ajout de stabilisant et de solvant afin de minimiser les risques d'inflammation voire d'explosion;
- la dissipation visqueuse due au fait que le fluide est extrêmement visqueux (5 kPa.s à 60°C [102]) ce qui pourrait engendrer une grande libération de chaleur. Tel qu'expliqué précédemment, le fluide est sensible à la chaleur. Il faudrait donc ajouter l'équation de la chaleur aux équations déjà définies afin de tenir compte de cette génération thermique et donc de contrôler la température du fluide;
- les contraintes seuils dues à la NC nécessiteront donc de déterminer le moment critique en dessous duquel le fluide n'est pas en mouvement. Ceci complexifie la simulation, car, en dessous de cette contrainte seuil, la viscosité est supposée tendre vers l'infini ce que les simulations par ordinateur ne sont pas réellement capables de représenter;
- la rhéofluidité du composé, provenant de la nature polymérique de la nitrocellulose qui engendre un profil très différent d'un écoulement en cisaillement pour un régime laminaire classique, nécessite donc d'utiliser un modèle tenant compte de la dépendance au cisaillement de la viscosité;
- les contraintes normales, étant dues encore une fois à la nature polymérique de la NC et engendrant les phénomènes gonflement en sortie de filière, « peau de requin », « adhérence-glissement », imposent l'utilisation d'un modèle viscoélastique tenant compte du taux de cisaillement et du temps de relaxation pour obtenir des résultats de simulations proches de ce qui peut être obtenu expérimentalement.

Maintenant que nous avons abordé toutes les contraintes…. , il convient donc maintenant d'examiner la question de la simulation.

2.3 Simulation numérique des écoulements viscoélastiques

Tel que souligné précédemment, il peut s'avérer particulièrement dangereux de manipuler du celluloïd lors de sa mise en forme. Pour limiter ce risque ainsi que les coûts liés à

l'expérimentation du procédé, il semble intéressant de simuler numériquement l'écoulement du fluide dans une filière à l'aide d'une méthode d'approximation numérique. Au vu de toutes les techniques présentes dans la littérature, il est possible de construire un graphe de répartition des techniques utilisées couramment dans le domaine des écoulements viscoélastiques.

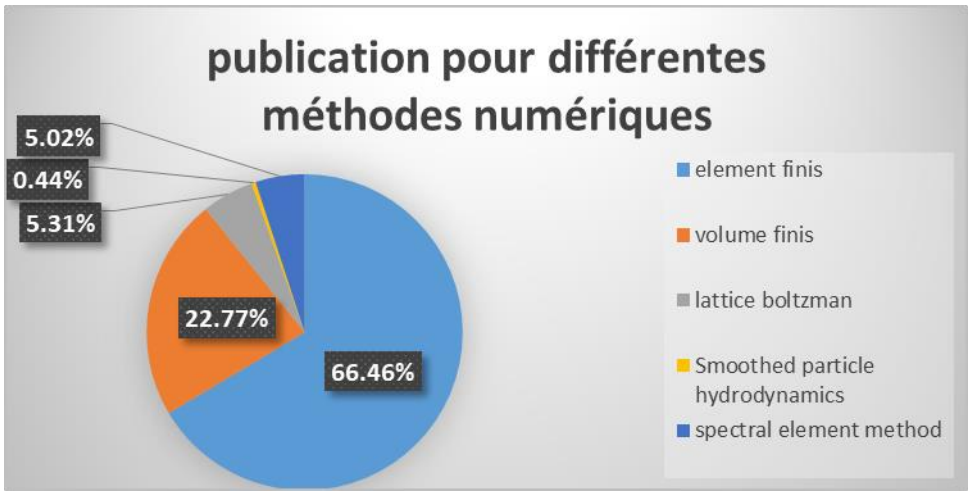

Figure 2.12 Répartition des publications dans le domaine du viscoélastique pour différentes méthodes numériques (sur la base d'une revue de la littérature à partir de plusieurs bases de données).

Tel que montré à la Figure 2.12, il ressort que les méthodes numériques les plus employées sont les éléments finis (FEM), les volumes finis (FVM), la méthode de Boltzmann sur réseau, et celle des éléments spectraux. En ce qui concerne la SPH, bien qu'elle soit présente sur le graphique, vu le nombre limité de références dans le domaine, elle ne sera pas présentée dans cette étude.

Par ailleurs, la technique des différences finies ne sera pas abordée ici, car il est précisé dans le livre « Computation Rheology » que, pour des géométries complexes à plus d'une dimension, cette technique présente des lacunes dues en partie à la discrétisation du maillage. Il lui sera préféré la méthode des éléments finis qui est moins rigide dans le domaine du viscoélastique [31]. Il est, cependant, possible de noter des évolutions de cette technique grâce à la méthode MAC (Marker and Cell) et FVM qui utilise, dans une certaine mesure, quelques-unes de ces approximations [31].

En ce qui concerne la méthode de Boltzmann sur réseau, bien que Malaspinas ait démontré qu'il est possible de simuler des écoulements complexes tels que l'écoulement convergent d'un

fluide viscoélastique obéissant à un modèle FENE-P [70], aucun code commercial ou en libre accès simulant ce type d'écoulement n'a été trouvé. Il aurait donc fallu partir d'une page blanche et coder toute la méthode ce qui aurait fait complètement dévier la recherche de son but initial. Par conséquent, il a été décidé d'écarter cette méthode de celles qui seront utilisées dans ce projet de maîtrise. Pour ce qui est de la méthode des éléments spectraux, elle ne sera pas non plus étudiée dans ce document. La raison est qu'elle est très similaire, sur le principe, à la méthode des éléments finis. En somme, il a donc été décidé de se cantonner dans cette étude aux méthodes les plus couramment utilisées dans la littérature scientifique, c'est-à-dire les méthodes FEM et FVM.

2.3.1 Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est une méthode de résolution numérique datant du début du XXe siècle. Elle a pour but de résoudre les équations différentielles de manière numérique. Cette approche nécessite, comme la plupart des méhodes de CFD, de mailler le domaine étudié de manière à calculer en chaque nœud du maillage les valeurs que peuvent prendre les variables du système.

Dans le cas des éléments finis, le problème est considéré comme une résolution d'un système variationnel s'écrivant sous la forme [32] :

$$a(u, w) = l(w) \; \forall \; w \in V \; et \; u \in V \tag{23}$$

où V représente un sous espace vectoriel de Sobolev, où évoluent les fonctions u et les fonctions test w, a représente une forme bilinéaire continue sur $V \times V$ et enfin l représente une application linéaire continue sur V [32].

Le passage de la forme forte à la formulation variationnelle se fait à l'aide des fonctions tests. Cet « affaiblissement » de la forme forte permet, entre autres, d'utiliser des espaces fonctionnels généralisés afin de résoudre les EDP de manière à ce que la solution appartienne au même espace que les approximations [32]. Le théorème de Lax-Milgram dit ainsi que si a de l'Éq. (23) est coercive ou elliptique, alors il existe une unique solution u pour l'Éq. (23) [32].

La première étape de la résolution d'un problème par la méthode des éléments finit sera donc d'écrire le système d'équations différentiels en y incorporant les fonctions tests [89]. Cela

permettra notamment d'affaiblir la forme forte et de générer le système d'équation à résoudre lors de la discrétisation du problème. Une des techniques employées à cet effet a été mise au point par Boris Galerkin et consiste à multiplier chaque EDP par une fonction test différente, ce qui crée autant de fonctions tests que d'équations différentielles. Cette formulation dite de Galerkin sera dans le cas d'un fluide viscoélastique type Oldroyd-B [31]:

$$\int_{\Omega} (\beta \boldsymbol{\nabla} \vec{v} : \vec{u} \ - p \cdot \boldsymbol{\nabla} \vec{u} + \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\nabla} \vec{u} \ ) d\Omega = 0 \tag{24}$$

$$\int_{\Omega} ((\boldsymbol{\nabla} \cdot \vec{v}) : q \ ) d\Omega = 0 \tag{25}$$

$$\int_{\Omega} (\boldsymbol{\tau} + We * \ \check{\boldsymbol{\tau}}) : \boldsymbol{S} \ d\Omega = \int_{\Omega} (1 - \beta)(\boldsymbol{\nabla} \vec{v} + (\boldsymbol{\nabla} \vec{v})^{\boldsymbol{T}}) : \boldsymbol{S} \ d\Omega \tag{26}$$

À noter que les fonctions **S**, $\vec{u}$ et q représentent ici les fonctions tests de la méthode Galerkin continue. Une fois le domaine discrétiser, dans un cas en une dimension, la fonction test peut prendre la forme d'un polynôme, interpolant les valeurs entre les différents nœuds, et s'écrivant dans le cas d'un polynôme linéaire sous la forme [31] :

$$\varphi_{1,j} = \frac{x_j - x}{x_j - x_{j-1}} \ et \ \varphi_{2,j} = \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \tag{27}$$

Avec pour chaque nœud intérieur du domaine [31]:

$$\varphi_j = \begin{cases} \varphi_{2,j}, & x_{j-1} < x < x_j \\ \varphi_{1,j}, & x_j < x < x_{j+1} \\ 0, & autrement, \end{cases} \tag{28}$$

En ce qui concerne les fonctions solutions u à déterminer, il est possible de les approximer en chaque nœud du domaine par [31]:

$$\vec{v}^h = \sum_{j=0}^{N} \vec{v}_j \varphi_j \tag{29}$$

Grâce à cela, le problème devient un système matriciel linéaire sous la forme AX=B. Il suffira dès lors de le résoudre pour obtenir la solution en chaque nœud du domaine.

En deux dimensions, il suffit de transformer les éléments du domaine discrétiser en un élément de référence à l'aide de la matrice Jacobienne tel qu'illustré à la Figure 2.13 [31].

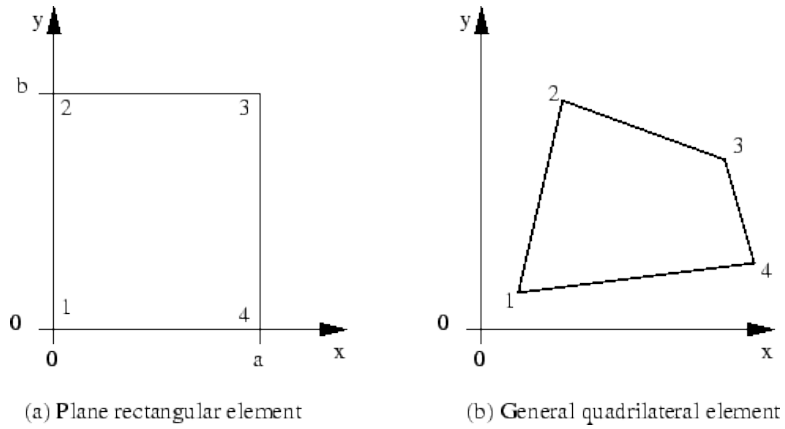

Figure 2.13 Transformation d'un quadrilatère quelconque en un rectangle de référence [34].

Ceci permet ainsi d'éviter de stocker en mémoire chaque élément et de pouvoir faire les opérations nécessaires sans trop de difficultés [89].

Avant d'aller plus loin, il est important de signaler que les points présentés précédemment ne sont qu'un rapide survol de certains principes de la méthode des éléments finis. Plusieurs détails ont été ainsi passés sous silence pour simplifier le propos et aller directement vers la simulation des écoulements viscoélastiques. Pour plus de détails le lecteur est encouragé à consulter l'ouvrage « Numerical solution of partial differential equations by the finite element method » de Clae Johnson [106].

Ainsi, dans le cas des systèmes viscoélastiques, la méthode Galerkin continue, présentée précédemment, ne fonctionne que pour des nombres de Weissenberg très faibles (de l'ordre de 0.01). Ceci s'explique, en partie, par le fait que les équations différentielles décrivant le tenseur des extra-contraintes sont à dominance convective, ce qui rend le problème très hyperbolique [31]. Cette particularité crée ainsi une grande instabilité de la méthode de Galerkin qui se traduit par des problèmes de convergence au-delà d'un nombre de Weissenberg critique [31]. Pour résoudre ce problème, différentes approches ont été développées au cours des 50 dernières années. Celle qui est la plus couramment rencontrée dans la littérature est la technique Discrete Elastic Viscous Split

Stress (DEVSS). Cette technique crée par Rajagopalan consiste à ajouter une équation différentielle ainsi qu'une fonction test aux autres équations différentielles afin de redéfinir le tenseur de taux de déformation noté D [11]. De cette manière, le tenseur des extra-contraintes sera redéfini et il sera ainsi possible d'aller vers de plus hauts nombres de Weissenberg sans trop de difficultés. Guenette et Fortin ont par ailleurs démontré que l'utilisation de cette technique permettait de retrouver la condition Ladyzhenskaya–Babuška–Brezzi (LBB) d'unicité qui était perdue sans cela [35]. Le seul bémol à cette technique est qu'elle impose de choisir des conditions frontières sur le taux de déformation. Ceci est très complexe, car la variable en question fait intervenir le gradient de la vitesse et sa transposée. Or, si dans la situation d'un *no slip* classique les conditions frontières sont telles que toutes les composantes de la vitesse sont nulles aux parois, ce n'est absolument pas le cas pour le taux de déformation. Il est, toutefois, possible de contourner ce problème en utilisant une condition de Neumann aux frontières. Ce qui revient à dire qu'il n'y a pas de transfert d'informations aux frontières. Une autre possibilité très présente, elle aussi, dans la littérature, est la technique *Streamline Upwind Petrov Galerkin* ou SUPG [36]. Elle consiste à modifier la fonction test des équations différentielles de manière à ce qu'il n'y ait plus un seul et unique terme par équation; mais plutôt une expression qui permettra de créer un terme de diffusion artificielle. Cela permettra d'éviter les problèmes de divergence inhérents à la méthode de Galerkin résultante du terme convectif. Cette nouvelle fonction test prendra la forme [31] :

$$\boldsymbol{S}_{supg} = \boldsymbol{S}_{galerkin} + \frac{\mathrm{h}}{\mathrm{U}}\vec{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{S}_{galerkin} \tag{30}$$

où h est un facteur de transport relié à la taille de l'élément, U est une vitesse caractéristique et $\boldsymbol{S}_{galerkin}$ représente la fonction test d'une méthode de galerkin. Le terme gradient de $\boldsymbol{S}_{galerkin}$ multiplié par les champs de vitesse permet de limiter l'impact des termes convectés en créant une diffusion artificielle additionnelle qui tient compte du champ de vitesse local. En contrepartie l'ordre de convergence ne sera que de premier ordre [31]. Ceci signifie qu'il faudrait raffiner le maillage en augmentant le nombre de nœuds aux carrés pour obtenir une erreur similaire au cas précédent. De plus, cette technique ne permet pas d'assurer que l'unicité de la solution existe bien. Pour assurer l'unicité, cette technique devrait être couplée à la méthode DEVSS [35].

Il existe encore beaucoup de techniques de stabilisation telles que la méthode *Galerkin Least Square* (GLS) où l'ajout de termes artificiels, fonctions du résidu des équations d'Euler – Lagrange, permet d'augmenter la stabilité du problème [90]. Cependant, ces méthodes doivent être couplées au minimum à une technique telle que DEVSS pour permettre de s'assurer de l'unicité de la solution et éprouver la précision [90]. Fan, Tanner et Phan-Thien ont d'ailleurs prouvé qu'il était possible de venir modifier la formulation DEVSS classique en la reformulant de manière à y inclure le terme de la méthode GLS afin d'atteindre de plus haut nombre de Weissenberg avec une bonne précision [90]. Cependant, en Galerkin continu cette technique à ses limites en fonction du modèle utilisé et il n'est pas possible de simuler à n'importe quelle nombre de Weissenberg. Ce nombre de Weissenberg critique dépend de la géométrie, du modèle et de la technique de stabilisation utilisée pour simuler l'écoulement [31].

Durant le courant des années 80, les évolutions dans le domaine ont stagné et l'engouement pour la méthode DEVSS, dans ce domaine de recherche, a diminué. Fort heureusement, deux techniques développées dans des champs n'ayant a priori aucun rapport avec les écoulements viscoélastiques ont relancé la recherche dans ce domaine. Ces deux techniques sont la méthode de Galerkin discontinue et la méthode du logarithme de tenseur de conformation.

Développée initialement pour résoudre l'équation du transport de neutron [91], la méthode Galerkin discontinue s'avère particulièrement puissante dès lors qu'il s'agit d'étudier des équations fortement hyperboliques. En ce qui concerne la méthode du logarithme de tenseur de conformation, il s'agit d'approcher le problème en utilisant le tenseur de conformation à la place du tenseur de contrainte. Il faut, par conséquent, résoudre une forme alternative de l'équation d'état du tenseur de contrainte, faisant intervenir le logarithme du tenseur de conformation [38]. Le problème devient ainsi :

$$\left((\boldsymbol{\nabla} \cdot \vec{v}), q\right) = 0 \tag{31}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta}{\lambda}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \tag{32}$$

$$(\mathbf{E}, (\boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^{\boldsymbol{T}}) - \overline{\mathbf{D}}) = 0 \tag{33}$$

$$\left((\boldsymbol{\nabla}\vec{u})^T, \left(2\eta\left((\boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^{\boldsymbol{T}}) - \bar{\mathbf{D}}\right) + \tau\right) - (\boldsymbol{\nabla}\vec{u}, p)\right) = 0 \tag{34}$$

$$\left(\left(\mathbf{S} + \frac{h}{U}\vec{v} \cdot \boldsymbol{\nabla}\mathbf{S}\right), \frac{1}{\lambda}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) + \frac{D\mathbf{C}}{Dt} - [\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\nabla}\vec{v} + (\boldsymbol{\nabla}\vec{v})^T \cdot \mathbf{C}]\right) = 0 \tag{35}$$

Il est à noter que (.,.) correspond au produit intérieur défini dans l'espace L^2 et que le tenseur de conformation sera remplacé par :

$$\mathbf{C} = \exp(\boldsymbol{\psi}) \tag{36}$$

où $\mathbf{C}$ repesent le tenseur de conformation et $\boldsymbol{\psi}$ le logarithme du tenseur de confromation. L'avantage de cette technique est qu'il est possible de démontrer qu'en deux dimensions, les deux valeurs propres du système sont strictement positives, ce qui engendre une matrice définie positive. Cette propriété fait que la technique devient donc particulièrement intéressante en 2D [38]. Cependant, en 3D, cette propriété n'est pas vérifiée en tout temps. Cette dernière rend la technique complexe pour une application 3D. Heureusement, la méthode GD (Galerkin discontinue) n'a pas ce problème et permet de réaliser ce genre de simulation en 3D. Elle consiste à considérer des termes de flux aux bornes des éléments, brisant ainsi la continuité qu'il est nécessaire d'avoir pour Galerkin discontinue [39]. Cette technique ne sera pas plus développée, car son principe ressemble grandement à la méthode des volumes finis qui sera présentée à la prochaine section. Les techniques DEVSS, SUPG et logarithme du tenseur de conformation sont les plus répandues. Elles seront donc utilisées pour résoudre les équations différentielles afin de simuler l'écoulement du celluloïd en profilé.

Pour conclure cette partie, il est à noter que certaines études concernant l'optimisation du gonflement en sortie de filière dans un profilé ont déjà été réalisées, à l'aide de la méthode des éléments finis, pour des polymères tels que le polypropylène [4]. En plus de prédire l'écoulement dans une filière, il a été ainsi démontré qu'en utilisant un algorithme d'optimisation topologique tel

que l'algorithme BOBYQA[4], il est possible d'optimiser la géométrie du profilé pour diminuer le gonflement en sortie de profilé [105].

2.3.2 Méthode des volumes finis

Cette méthode est sur le principe plus simple à comprendre que la méthode des éléments finis. Tout comme cette dernière, elle nécessite de mailler le domaine afin d'obtenir une forme discrète de la géométrie. Par contre, contrairement à la MEF, il n'est plus question d'affaiblir la forme forte via une fonction test quelconque. Le problème sera plutôt de convertir les équations en un problème de flux autour des éléments du maillage et de modifier la valeur des variables calculée aux centroïdes via le transfert d'informations induit par ces flux. Cette technique repose majoritairement sur le théorème de Gauss-Ostrogradski qui stipule que la somme des flux surfaciques d'un élément donné est égale au gradient du flux à l'intérieur de cet élément. Cela peut s'interpréter d'un point de vue purement mathématique ainsi [42]:

$$\iiint_{\Omega_\mathrm{e}} \boldsymbol{\nabla} \cdot \vec{F} d\Omega_\mathrm{e} = \iint_{\Gamma_e} \vec{F} \cdot \vec{n} d\Gamma_\mathrm{e} \tag{37}$$

où $\vec{F}$ est un vecteur quelconque, Ω_e est le volume de l'élément, $\vec{n}$ est le vecteur normal aux faces de l'élément et Γ_e représente la surface de l'élément.

Grâce à ce théorème, il est maintenant possible de transformer les termes volumiques des équations définissant le gradient de contrainte en flux de surface ce qui simplifie grandement le système de PDE et permet une résolution plus facile des équations.

---

[4] L'algorithme BOBYQA est un algorithme d'optimisation à régions de confiance.

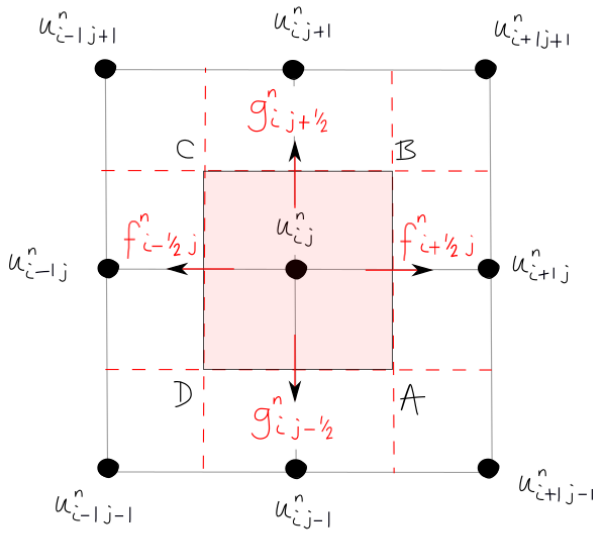

Figure 2.14 Représentation des flux de transport pour la méthode des volumes finis [43].

Toutefois, ceci n'est que la première étape permettant l'implémentation d'une technique de volume fini. Pour continuer, il faudra trouver une définition à chaque nouveau terme en prenant en compte plusieurs subtilités qui pourraient engendrer des problèmes de convergence.

Premièrement, les termes de diffusion (tel que les laplaciens) qui sont d'ordre 2 peuvent être approximés à l'aide d'une différence finie qui dépendra de l'ordre de convergence souhaité. Pour comprendre cela, il suffit de partir, par exemple, de l'équation de la chaleur purement diffusive sur un élément. En utilisant le théorème de Gauss-Ostrogradski cette équation devient [44]:

$$\int_{\Omega_e} k\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T})\right)\mathrm{d}\Omega_e = \int_{\Gamma_e} k\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T}\cdot\vec{n}\,\mathrm{d}\Gamma_e \tag{38}$$

En intégrant autour des surfaces, à l'aide d'une méthode d'intégration numérique (trapèze, Gauss,Simpson,…), il est possible de transformer l'intégrale en somme. Dans le cas l'Éq. (38), si la règle du point milieu est appliquée (pour l'intégration), cela donne [92] :

$$\int_{\Gamma_e} k\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T}\cdot\vec{n}\,\mathrm{d}\Gamma_e = k\sum_{j}\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T}_{\mathrm{i-j}}\cdot\vec{s}_{\mathrm{i-j}} \tag{39}$$

avec $\vec{s}_{\mathrm{i-j}}$ représentant le vecteur normal entre les surfaces des éléments i et j et $\mathrm{T}_{\mathrm{i-j}}$ représentant la température à l'interface entre les élément i et j.

Il ne reste plus qu'à définir le terme $\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T}_{\mathrm{i-j}}$. C'est à ce moment qu'interviennent les différences finies étant donné qu'il est possible de définir cet opérateur par une différence finie centrée. Ce qui donnerait pour une différence finie linéaire en une dimension :

$$\boldsymbol{\nabla}\mathrm{T}_{\mathrm{i-j}} = \frac{T_j - T_i}{x_j - x_i} \tag{39}$$

Cette façon de procéder permet de converger à l'ordre 2. Ce qui peut être modifié en utilisant d'autres différences finies possédant un plus grand ordre de convergence.

Deuxièmement, tous les termes convectifs devraient être traitées différemment des termes diffusifs et ce afin de prendre en considération leur caractère dépendant du champ de vitesse. Cela se traduit mathématiquement par de nouveaux schémas d'interpolation qui tiennent compte du champ de vitesse. Pour reprendre l'exemple de l'équation de la chaleur, il suffit de considérer un problème sans diffusion ce qui donnerait (si la partie temporelle de l'équation n'est pas considérée) [44]:

$$\int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \boldsymbol{\nabla} \cdot (\mathrm{T}\vec{v})\mathrm{d}\Omega_{\mathrm{e}} = \int_{\Gamma_{\mathrm{e}}} (\mathrm{T}\vec{v}) \cdot \vec{n}\, \mathrm{d}\Gamma_{\mathrm{e}} \tag{40}$$

Ce qui donne après l'application de la règle du point milieu :

$$\int_{\Gamma_{\mathrm{e}}} (\mathrm{T}\vec{v}) \cdot \vec{n}\, \mathrm{d}\Gamma_{\mathrm{e}} = \sum_{j} \left(\mathrm{T}_{\mathrm{i-j}}\vec{v}_{i-j}\right) \cdot \vec{s}_{\mathrm{i-j}} \tag{41}$$

avec $\vec{v}_{i-j}$ représentant le vecteur vitesse à l'interface des élément i et j. Si jamais un schéma d'interpolation linéaire centré était appliqué au terme T, comme précédemment, des oscillations commenceront à apparaitre. Cela étant dû au fait que le schéma linéaire centré n'est pas borné et ne respecte pas le sens de propagation. Ceci est critique pour des problèmes hyperboliques tels que celui de la simulation du celluloïd. Pour corriger cela, il est possible d'utiliser un schéma upwind

qui s'écrit de la manière suivante, en une dimension, considérant une propagation de i vers j [92] :

$$T_{i-j} = \begin{cases} T_i \; si \; v > 0 \\ T_j \; si \; v < 0 \end{cases} \tag{42}$$

Ici l'information aux faces provient intégralement du centroïde se trouvant dans le sens du champ de vitesse. Cela crée des sortes de fonctions escalier ou la valeur de la fonction d'intérêt saute d'un coup [44]. Ce schéma est, par conséquent, borné et prend en compte le sens de propagation. Il ne converge, cependant, qu'à l'ordre 1 mais il corrige les défauts du schéma linéaire centré [92]. Il est possible de trouver d'autres schémas plus performants tels que les schémas QUICK (Quadratic upwind interpolation) qui peuvent converger à de plus grands ordres de grandeur [92]. Cependant, ils ne seront pas utilisés dans cette étude, leur fonctionnement ne sera donc pas détaillé. Pour approfondir ce sujet, le lecteur est encouragé à consulter l'ouvrage « An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method » de H. Versteeg [107]. Dans le cas des écoulements viscoélastiques, il est nécessaire d'incorporer aux techniques vues précédemment, la méthode DEVSS pour s'assurer de l'unicité de la solution [45].

Une fois les schémas d'interpolations des termes de convection et de diffusion établis, il ne restera plus qu'à choisir (dans le cas d'un problème instationnaire) entre un schéma explicite ou implicite en temps.

Si le schéma est explicite en temps, la stabilité dépendra majoritairement du pas de temps choisi et ne nécessitera pas de résolution d'un système matriciel supplémentaire [46]. En reprenant le cas de l'équation de la chaleur, et en utilisant un schéma d'Euler « avant » cela donnerait pour le terme temporel [92] :

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{T_i^{t+\Delta t} - T_i^t}{\Delta \mathrm{t}} \tag{43}$$

En revanche si la résolution est implicite en temps, le problème impliquera de résoudre un système sous la forme AX=b. Cela engendre un coût de calcul supplémentaire non négligeable, qui peut être contrebalancé par le fait que les schémas d'Euler implicites sont inconditionnellement stables.

Dans le cas du terme temporel de l'équation de la chaleur, cela reviendrait à utiliser, par exemple, le schéma d'Euler « arrière », ce qui donnerait [92]:

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{T_i^t - T_i^{t-\Delta t}}{\Delta \mathrm{t}} \tag{44}$$

Il est par ailleurs important de noter que, dans le cas d'une simulation d'un système en régime permanent, il faudra aussi résoudre un problème d'équation linéaire de la forme AX=b[44].

L'avantage majeur de la méthode des volumes finis est que, contrairement à la formulation classique des éléments finis, elle est complètement discontinue. Il n'y a théoriquement rien qui implique une quelconque continuité entre les éléments. Si les données brutes sont représentées sans lissage, il apparaîtra que les valeurs du champ sautent d'un élément à l'autre sans la moindre continuité apparente. Cette particularité est puissante puisqu'elle autorise la discontinuité entre les éléments, ce qui n'était pas le cas avec la méthode MEF « classique ». Conséquemment, dès lors que le problème est à dominante convective, comme cela est souvent le cas dans les problèmes d'ondes de choc, la technique des volumes finis devient un atout majeur. Or, tel que stipulé précédemment, le problème des écoulements viscoélastiques est à dominante convective : la méthode des volumes finis semble donc tout indiquée pour résoudre ce problème [31].

Il existe plusieurs algorithmes dans le cas de la méthode des volumes finis permettant de résoudre à peu près n'importe quel problème de mécanique des fluides. L'un des plus utilisés, en régime stationnaire, se nomme *semi-Implicit Method for Pressure Linked* Equations ou SIMPLE. Il a été développé par Patankar : un des pionniers de la recherche en volumes finis [69]. Il permet non seulement de résoudre l'équation de quantité de mouvement et de la continuité de manière classique, mais aussi de les coupler à n'importe quelle autre équation constitutive. Cet algorithme est employé la plupart du temps pour simuler les écoulements viscoélastiques, car il est très robuste et permet de prédire un certain nombre de phénomènes rhéologiques [93]. Toutefois, certains phénomènes physiques (« peau de requin », GMF,…) sont purement transitoires, il paraît donc assez peu judicieux de simuler ce type d'écoulement à l'aide d'un algorithme créé pour le régime permanent. Heureusement, plusieurs chercheurs, dont Patankar, ont créé l'algorithme PISO présenté ci-après pour les écoulements newtoniens [44].

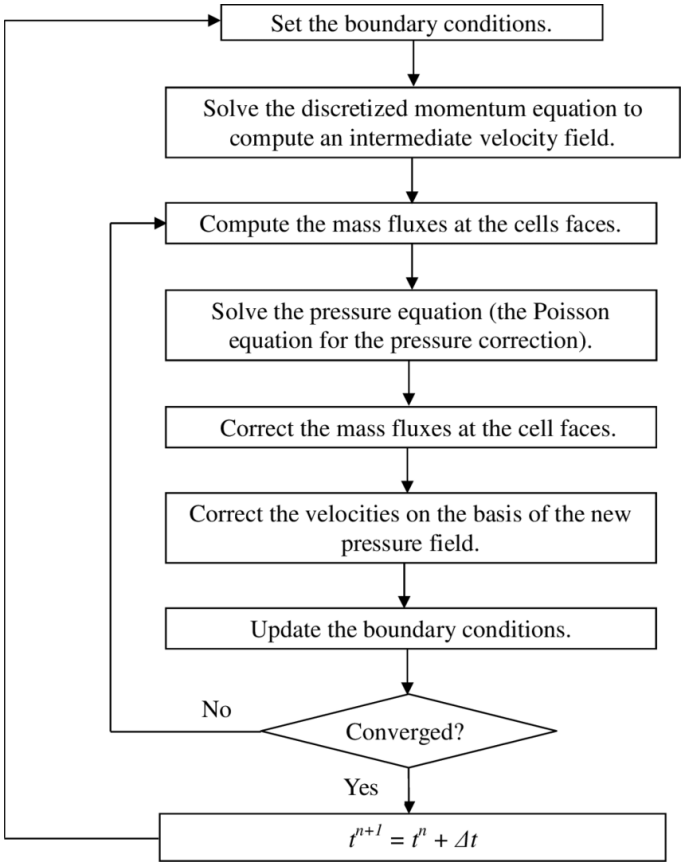

Figure 2.15 Algorithme *PISO* [44].

Pour ce qui est des écoulements viscoélastiques, il suffit de venir rajouter une étape où le système d'équation définissant le champ de contrainte viscoélastique est résolu de manière découplée [44]. En incluant un pas de temps modifiable, il en résulte l'un des algorithmes les plus utilisés dans la simulation des écoulements viscoélastiques en filière. Il est à noter que cette technique n'a, cependant, jamais été utilisée dans le cas d'un quelconque polymère énergétique. Toutefois, puisqu'elle fonctionne parfaitement avec des polymères classiques tels que le HDPE ou le PP, il semble raisonnable de penser qu'elle puisse fonctionner pour n'importe quel type de polymère. Pour finir à propos de la méthode des volumes finis, il faut ajouter que celle-ci, même si elle n'est pas aussi répandue que celle des éléments finis, reste une alternative plus facile d'accès que la méthode des éléments finis et permet de simuler autant de phénomènes que cette dernière. Finalement, c'est donc une des méthodes qui sera employée dans cette étude.

2.4 Logiciel de simulation

Toutes les techniques présentées auparavant sont déjà implémentées dans des logiciels commerciaux ou « open-source » mis à jour continuellement. Il a donc été choisi, pour gagner du temps, que l'utilisation d'un logiciel de simulation déjà codé serait préférable. Présentement, dans le cas des simulations viscoélastiques, seuls trois logiciels sont couramment utilisés et ont fait leurs preuves dans ce domaine. Les logiciels concernés sont: OpenFoam/FoamExtend (utilisant la méthode des volumes finis), Comsol et Polyflow (utilisant la méthode des éléments finis).

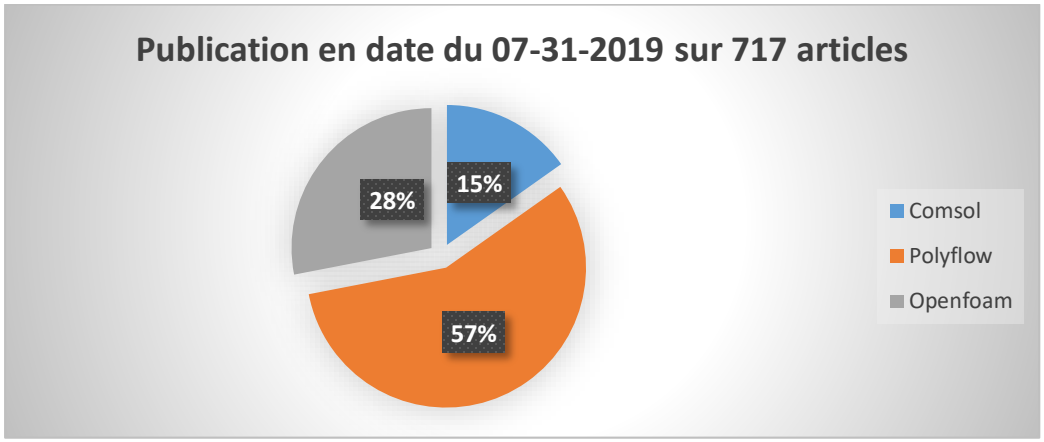

Figure 2.16 Publication en fonction du logiciel utilisé.

La Figure 2.16 ci-dessus présente l'utilisation des différents logiciels dans le domaine des écoulements viscoélastiques. Toutefois, ces valeurs sont à prendre avec précaution, car, même s'il semble que le logiciel le plus utilisé soit Polyflow d'ANSYS, il a été créé en 1970 soit 16 ans avant le logiciel Comsol et 34 ans avant OpenFoam. Il a donc plus mature et possède une plus grande communauté active.

2.4.1 Polyflow (ANSYS)

Polyflow est un logiciel commercial de simulation d'écoulement utilisant la méthode des éléments finis qui a été racheté par la société ANSYS. Il a été initialement conçu pour simuler les écoulements polymériques viscoélastiques, mais il est utilisé, aujourd'hui, pour plusieurs types d'écoulements. Il a donc comme avantage de permettre l'utilisation d'une large bibliothèque de modèles viscoélastiques déjà implémentés et régulièrement mise à jour par la société ANSYS. Il a, de plus, une interface utilisateur assez claire et possède une documentation conséquente facilitant

l'utilisation de fonctionnalités complexes déjà implantées. Une des simulations les plus intéressantes utilisant ce logiciel a d'ailleurs permis de simuler un gonflement en sortie de filière dont le ratio D/d allait jusqu'à 5 pour des taux de cisaillements dépassant les 100 s^{-1} pour divers modèles rhéologiques [49].

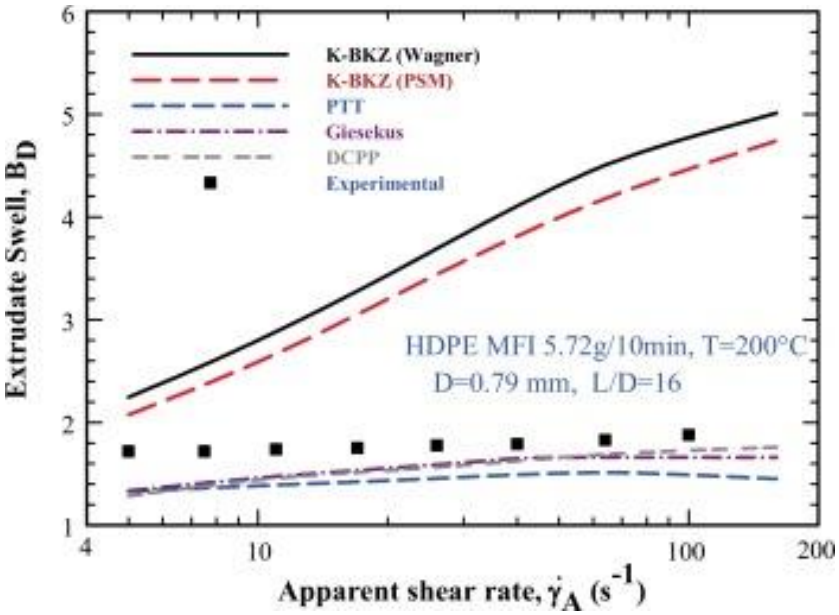

Figure 2.17 Gonflement en sortie de filière prédit par ANSYS [49].

Il faut signaler que, dans le cas étudié ici, ce taux de cisaillement est représentatif de ce qu'il est possible de rencontrer dans un écoulement en profilé. Les nombres de Weissenberg peuvent, dans certains cas, dépasser les 100 ce qui est le cas pour l'écoulement en filière plate d'un film de celluloïd. Cependant, les licences du logiciel Polyflow ont un certain coût non négligeable (de l'ordre de la dizaine de milliers de dollars US pour une licence) qui rend difficile l'acquisition de ce logiciel. Contrairement, au logiciel Comsol ci-après, il n'est pas possible de concevoir des applications simplifiées autonomes qui permettraient de faire un transfert facile des modèles développés à d'éventuels partenaires industriels. Ainsi, pour toutes ces raisons, il est peu probable que ce logiciel soit utilisé, mais il reste une alternative possible, déjà très exploitée dans la littérature.

2.4.2 Comsol multiphysics

Comsol est un logiciel commercial à licence payante de simulation en éléments finis codés originellement sous Matlab, en 1986, sous le nom de FEMLAB. Ce logiciel a comme avantage de permettre de coupler très facilement plusieurs physiques, ce qui est une chose particulièrement importante lors de l'étude des écoulements viscoélastiques. En outre, il est possible de trouver une large combinaison d'outils permettant de créer des physiques qui n'existaient pas initialement dans les modules implémentés sous Comsol. En ce qui concerne les écoulements viscoélastiques, il n'existe pas de modèle préfabriqué sous Comsol contrairement à Polyflow [50]. Cependant, il est possible de trouver plusieurs exemples, sur le site web de cette compagnie, qui expliquent comment créer ces modèles et la façon de les stabiliser. De surcroît, un des gros avantages de Comsol par rapport à Polyflow est qu'il est possible de téléverser les modèles créés sur le logiciel Comsol vers un site web permettant la simulation sur des clusters de la compagnie Comsol, ce qui limite le recours à des clusters personnels coûteux. Il est, par la suite, permis de convertir ces modèles en de petites applications plus simples donnant lieu à un transfert technologique plus rapide et n'obligeant pas l'utilisateur à comprendre parfaitement le fonctionnement du logiciel. Depuis 2018 et l'avènement de la version 5.4., il est envisageable de créer des applications Standalone supportant l'utilisation de ces applications sans avoir Comsol installé sur son ordinateur.

En ce qui concerne les simulations viscoélastiques déjà réalisées sur ce logiciel, un article de 2013 montre la simulation, à l'aide d'un modèle PTT classique, des écoulements « peau de requin », gonflement en sortie de filière et GMF, et ce, grâce â une technique de level set couplée à une stabilisation. Celle-ci implique le logarithme du tenseur de conformation, pour des nombres de Deborah allant jusqu'à 60 comme cela est illustré à la Figure 2.18 [51].

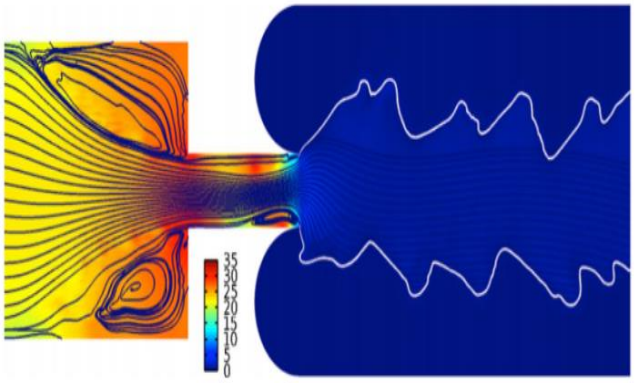

Fig. 4 Streamlines and extrudate surfaces on the contour of pressure that depict gross melt fracture. Flow fields corresponding to De=60, n=0.1, s=0.001 at t=1.7 (multimedia view)

Figure 2.18 Gonflement en sortie de filière simulé sous Comsol [51].

Il est, par ailleurs, facile d'utiliser sous Comsol des systèmes multi-physiques ou encore d'optimiser des formes géométriques afin de minimiser les défauts d'écoulement. Par conséquent, le logiciel Comsol est très intéressant pour un projet où on désirerait tenter de faire des simulations multiphysiques. Il ne faut, cependant, pas oublier que tout comme Polyflow, ce logiciel est payant. De plus, l'implantation d'un modèle viscoélastique en 3D est une chose très difficile. Ceci étant principalement dû au fait que pour permettre le passage de la 2D à la 3D, il est impératif d'utiliser une méthode de Galerkin discontinue [50]. Or, présentement, bien que ces techniques soient présentes pour d'autres applications (acoustique, électromagnétisme…), il est techniquement trop complexe de l'implanter dans la physique CFD (computational fluid dynamics). Par ailleurs, une fois en 3D il n'est plus possible d'utiliser une méthode LU directe, car le système d'équations peut allégrement dépasser les 10^6. Il est donc obligatoire d'utiliser une méthode de Krylov puisque le système n'est pas du tout symétrique [50]. L'unique méthode de Krylov existante sur Comsol étant la méthode GMRES. Le seul choix éventuel concernera la sélection du préconditionneur et, même à ce niveau, les possibilités sont limitées. Sur Comsol, il n'est pas possible d'implanter ses propres préconditionneurs numériques ou son propre solveur.

2.4.3 OpenFoam/Foam-Extend

Le dernier logiciel, le plus couramment utilisé dans ce domaine, est le logiciel OpenFoam qui, contrairement aux deux logiciels précédents, est open source et disponible gratuitement en ligne. OpenFoam utilise la méthode des volumes finis pour simuler à peu près n'importe quelle

équation différentielle partielle. La première version d'OpenFoam est sortie en 2004 [52] et ne contenait aucun modèle pour des écoulements viscoélastiques déjà implantés. Il faudra attendre la scission d'OpenFoam en deux versions; OpenFoam et Foam-Extend, pour voir apparaître les premiers modèles impliquant du viscoélastique. Par la suite, en 2009, Foam-Extend inclut ainsi officiellement dans sa version 3.1 une bibliothèque viscoélastique qui s'est depuis largement étoffée. Cette prouesse est en grande partie due aux efforts du professeur Jovanni L. Favro qui a créé un véritable arsenal de modèles viscoélastiques utilisables en 2D et en 3D [53]. Le logiciel Foam-extend a toutefois une contrainte, par rapport à ses deux autres concurrents, qui réside dans la manière de l'utiliser. Contrairement aux deux autres logiciels, il ne possède pas d'interface graphique facilitant sa prise en main. Il est donc impératif de l'utiliser à l'aide de ligne de commande Bash ce qui nécessite un minimum de connaissance dans ce langage.

Cependant, une fois ce prérequis complété, Foam-Extend devient un outil efficace facilitant la manipulation des équations différentielles hyperboliques complexes et la génération des codes procéduraux afin de tester plusieurs cas simultanément, sous différentes conditions, dans le but de trouver des optimums. Dans le cas des écoulements viscoélastiques, la Figure 2.19 présente des résultats allant jusqu'à un des nombres de Deborah de 10000.

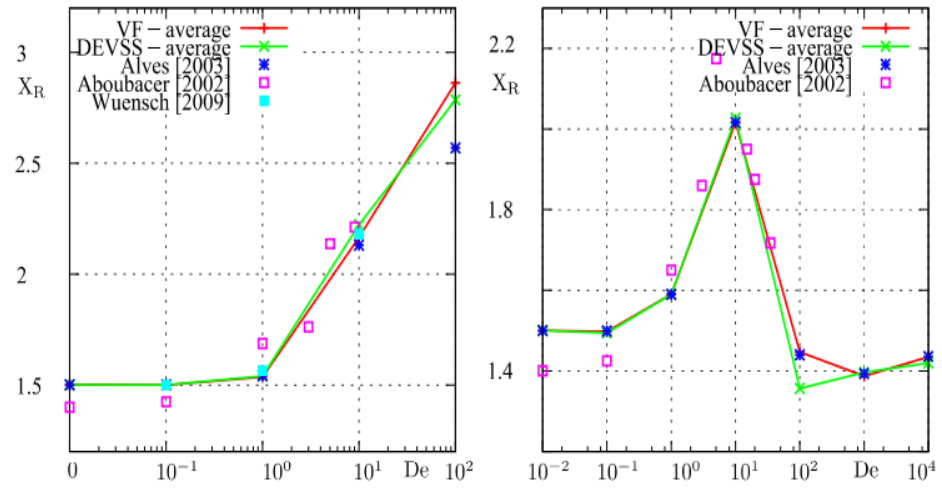

Figure 6: The size of the vortex near the re-entrant corner with the De number (log-scale) for **left:** the linear and **right:** the exponential PTT fluid with $\beta = 1/9$ and $\alpha = 0.25$.

Figure 2.19 Vortex de contraction prédit grâce à OpenFoam [55].

En somme, ce logiciel est donc une excellente alternative gratuite très prometteuse même s'il nécessite des connaissances en Bash. Il embarque d'ailleurs un nombre impressionnant de fonctionnalités autorisant ainsi la parallélisassions du code à un niveau très avancé. En outre, il existe tout un éventail de solveurs numériques en tout genre couplés à un grand nombre de préconditionneurs. Finalement, il est à noter que si l'équation différentielle n'existe pas ou que les solveurs ne conviennent pas, il est tout à fait possible de les programmer sans forcément avoir des connaissances très pointues sur OpenFoam. Il faudra cependant avoir des notions de C++ pour programmer et compiler le solveur afin de l'utiliser dans Foam-extend.

Pour conclure cette section, il est important de rappeler que, la manipulation du mélange, NC/Camphre requiert beaucoup de précautions. Or, à l'exception de quelques rares études sur le comportement de ce genre de mélange, il n'existe que peu de données sur la manière de simuler ce genre d'écoulement de fluide énergétique en surface libre. Ce mélange n'a ainsi jamais été encore étudié dans le cadre d'une simulation d'écoulement. Ce mémoire présentera donc un outil développé spécifiquement pour simuler l'écoulement du celluloïd dans un profilé. Grâce à cet outil, il sera possible de simuler pour la première fois le comportement du celluloïd en écoulement.

2.5 Objectifs spécifiques

Pour conclure, au terme de cette revue de la littérature, il a été permis d'identifier plusieurs points clefs permettant de définir les objectifs spécifiques qui devront être accomplis dans ce mémoire. Ceux-ci sont :

1. établir une régression non-linéaire à partir de données rhéologiques en cisaillement existantes afin d'obtenir les paramètres du modèle rhéologique caractérisant le celluloïd étudié, puis injecter ce modèle dans les modèles viscoélastiques étudiés (PTT, Giesekus, White-Metzner) de manière à ce qu'ils respectent les données expérimentales en cisaillement;
2. implanter des modèles de fluides viscoélastiques à l'aide de la méthode des éléments finis et du logiciel Comsol, étant donné qu'il n'existe aucun module par défaut dans Comsol contenant des modèles viscoélastiques du moins jusqu'à la version 5.4;

3. simuler l'écoulement du celluloïd dans la gamme de nombres de Weissenberg d'opération du profilé, à l'aide de la méthode des éléments finis implantée dans Comsol ou à l'aide de la méthode des volumes finis implantée dans Foam-Extend;
4. tester la faisabilité de la simulation de l'écoulement du celluloïd dans la géométrie réelle du profilé toujours à l'aide du logiciel Foam-Extend.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

Dans ce chapitre, la démarche utilisée sera présentée afin de répondre aux objectifs spécifiques de la recherche énoncée précédemment. Ce cheminement commencera par une définition du cadre et des hypothèses qui seront posés afin de simplifier le problème étudié. Par la suite, suivra une section expliquant comment seront construites les simulations sous les deux logiciels. Celle-ci contiendra en plus des détails techniques concernant les deux logiciels, un résumé des conditions frontières utilisées ainsi que de leurs définitions. Cette partie sera suivie de deux autres qui expliqueront le modus operandi utilisé pour vérifier si les simulations prédisent bien des résultats cohérents avec les solutions analytiques et avec les données expérimentales. Il est cependant important de signaler que, malheureusement, aucune expérience n'a pu être réalisée au cours de cette recherche. Les données utilisées, lors de cette étude, étant celles obtenues par le professeur Charles Dubois durant ses expérimentations.

3.1 Hypothèses et cadre de la recherche

Pour commencer correctement le cycle de la modélisation, il est important de partir du phénomène physique qui sera modélisé et de se débarrasser des variables superflues qui complexifieraient inutilement le problème. Les principales hypothèses de notre modèle sont les suivantes :

1. le fluide s'écoule en régime rampant ($Re \ll 1$);
2. le fluide est incompressible;
3. le fluide est isotherme;
4. il n'y a pas de contrainte seuil ;

Nous allons maintenant les analyser en détails.

Dans le cas présent, si l'équation de quantité de mouvement est analysée terme par terme, il apparaît assez rapidement que la composante convective du problème est inutile. Cette dernière décrit principalement les phénomènes d'accélération du fluide et serait très utile pour des fluides très peu visqueux comme l'air. Cependant, dans le cas d'un fluide tel que le celluloïd, la viscosité est des milliards de fois plus grandes que celle de l'air. Les termes d'accélération n'auront donc

qu'une très faible contribution dans le phénomène qu'il est nécessaire de modéliser. Les équations de la quantité de mouvement deviennent donc :

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}\right) = -\boldsymbol{\nabla} p - \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \vec{g} \tag{45}$$

En ce qui concerne la pression, elle sera définie à l'aide de l'équation de continuité, parce que le fluide est considéré incompressible. En revanche, le terme de dissipation visqueuse sera négligé ce qui éliminera la seule source de chaleur. De plus, si l'on considère que le système est thermiquement isolé, cela revient à dire que le problème est isotherme, ce qui rend inutile la résolution de l'équation de la chaleur. Cette hypothèse simplificatrice est une hypothèse couramment utilisée dans les études essayant de modéliser le comportement viscoélastique en première approximation [53]. Cette dernière sera étudiée dans la partie discussion et résultat afin de voir quels impacts elle peut avoir sur les résultats de simulation qui seront présentés.

En ce qui concerne la "contrainte seuil" du fluide, cela revient à dire qu'en dessous d'une certaine contrainte le fluide exhibe une viscosité infinie. D'un point de vue numérique, ce fait peut être approximé par une viscosité très grande, mais finit en dessous d'une certaine contrainte. Cependant, ceci rajoute un degré de complexité inutile étant donné qu'il n'est pas sûr que le celluloïd utilisé ici exhibe ce comportement. L'étude de Beverly et Tanner parlant de ce phénomène utilise d'ailleurs un mélange de nitrocellulose et nitroglycérine, ce qui est très différent du celluloïd [102]. Il a donc été décidé de négliger cette particularité du fluide en l'absence de données suffisantes sur ce phénomène.

Ce point étant expliqué, il ne reste plus qu'à trouver une définition pour le tenseur des extra-contraintes. Cette définition sera, dans un premier temps, celle d'un fluide de type Maxwell convecté. Ce choix a été fait, car la forme de ce modèle est celle que devrait avoir tous les autres modèles présentés à la section 2.1.2 à une modification près. S'il est correctement implanté, il sera facile de le transformer en un autre modèle plus évolué prenant en compte le caractère rhéofluidifiant du matériau. Ces modèles seront, dans le cadre de cette étude, Ceux de Giesekus, PTT et White-Metzner. Enfin, il faudra par ailleurs déterminer les paramètres nécessaires à leur utilisation ce qui sera expliqué dans la section vérification expérimentale.

3.2 Construction de la simulation viscoélastique

Étant donné que l'Éq. (19) ne sera pas considérée, pour des raisons de simplification du problème déjà fort complexe, les paramètres de viscosité utilisés dans cette étude seront obtenus à basse température. En faisant ce choix, il est assuré que les contraintes normales prédites seront maximales, car elles sont proportionnelles à la viscosité. Cette simplification donnera donc une borne supérieure qu'il sera théoriquement difficile de dépasser puisque l'augmentation de la température (induite par la dissipation visqueuse) fera mécaniquement diminuer la viscosité [60]. Les données de gonflement en sortie de filière (die swell) ainsi obtenues ne devraient donc ne jamais être dépassées ce qui permet de prédire le pire des cas qui pourrait arriver.

3.2.1 Conditions frontières et conditions initiales

Le choix des conditions frontières dans tout problème de simulation numérique est un des points les plus critiques à définir. De fait, il conditionne toute la stabilité du problème et engendre une quantité de questions quant au bien-fondé de leur définition. Dans le cadre de l'étude ici présentée, les conditions frontières devront être imposées sur trois ensembles de variables. Celles-ci sont la vitesse, la pression et les extra-contraintes. Globalement, elles auront toujours la même définition dépendamment du type de frontière pris. Trois types de conditions frontières seront utilisés et sont dénommées respectivement parois fixe, entrée et sortie. Ces dernières représenteront physiquement [61]:

1. *une condition de non-glissement aux parois pour la frontière dénommée parois fixes.* Cette condition représente le fait qu'au niveau de la paroi, le fluide est stagnant ce qui se caractérise par un profil de vitesse nul. Autrement dit, à la paroi, la condition frontière pour la vitesse est une condition de Dirichlet. Pour ce qui est de la pression, du champ des extra-contraintes et du tenseur $\overline{\mathbf{D}}$ de la méthode DEVSS, il faudra utiliser une condition de Neumann qui permet de poser une absence d'échange d'informations. Ainsi, à chaque fois que la condition parois fixe sera évoquée cela reviendra à poser :

$$\vec{v} = \vec{0}; \boldsymbol{\nabla\tau} \cdot \vec{n} = \vec{0}\,; \boldsymbol{\nabla} p \cdot \vec{n} = 0; \boldsymbol{\nabla}\overline{\mathbf{D}} \cdot \vec{n} = \vec{0}$$

2. *une condition d'entrée uniforme pour la frontière dénommée entrée.* Elle se caractérise par le fait que le fluide est considéré comme entrant avec une vitesse uniforme dans le profilé.

Physiquement, cela est assez proche de ce qui se passe dans la réalité étant donné que, bien souvent, l'écoulement provient d'une extrudeuse qui possède un diamètre plus grand que celui observé dans les faits. Cette contraction créant ainsi un profil d'entrée plat, il devient possible d'approximer le champ de vitesse par une condition de Dirichlet constante. Pour ce qui est de la pression, du champ des extra-contraintes et du tenseur $\overline{\mathbf{D}}$ de la méthode DEVSS, ils sont définis de la même manière que précédemment puisqu'en entrée il est d'usage de déduire ces variables du champ de vitesse imposée :

$$\vec{v} \cdot \vec{n} = c; \boldsymbol{\nabla\tau} \cdot \vec{n} = \vec{0}; \boldsymbol{\nabla} p \cdot \vec{n} = 0; \boldsymbol{\nabla}\overline{\mathbf{D}} \cdot \vec{n} = \vec{0}$$

3. *une condition de frontière ouverte pour la frontière dénomme sortie de filière.* Cette condition consiste à considérer qu'il n'y a pas de variation de vitesse en sortie lorsque le fluide est en contact avec le milieu extérieur. Le point crucial de cette condition est que cette fois-ci la condition de Dirichlet sera imposée sur la pression et non sur le champ de vitesse. Ici, la pression est considérée comme nulle sur toute la frontière. Étant donné qu'il est question de pression relative, cela signifie que le fluide est à pression ambiante dès lors qu'il est en contact avec l'air ambiant. Ceci est une approximation physiquement réaliste puisqu'en sortie, le fluide n'est plus du tout contraint par une quelconque force exceptée celle induite par la pression atmosphérique. En ce qui concerne le tenseur de contrainte, le tenseur $\overline{\mathbf{D}}$ de la méthode DEVSS et le champ de vitesse, ils seront définis à l'aide d'une condition de Neumann, car il n'y a théoriquement aucune accélération du fluide qui pourrait créer un transfert d'information :

$$p = 0; \boldsymbol{\nabla\tau} \cdot \vec{n} = \vec{0}\,; \boldsymbol{\nabla}\vec{v} \cdot \vec{n} = \vec{0}; \boldsymbol{\nabla}\overline{\mathbf{D}} \cdot \vec{n} = \vec{0}$$

Le tableau suivant résume les définitions qui seront utilisées dès lors qu'une référence sera faite à l'une de ces trois conditions frontières.

Tableau 1 Récapitulatif des variables et des conditions frontières qui leur sont associées.

	Entrée	Parois Fixe	Sortie	t=0 s
Tenseur des extra-contraintes σ	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla\tau}\cdot\vec{n}=\vec{0}$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla\tau}\cdot\vec{n}=\vec{0}$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla\tau}\cdot\vec{n}=\vec{0}$	Fluide au repos $\tau_{ij}=0$
Champs de vitesse v	Condition de Dirichlet $\vec{v}\cdot\vec{n}=c$	Condition de Dirichlet $\vec{v}\cdot\vec{n}=0$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}\vec{v}\cdot\vec{n}=\vec{0}$	Fluide au repos $\vec{v}=\vec{0}$
Pression p	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}p\cdot\vec{n}=0$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}p\cdot\vec{n}=0$	Condition de Dirichlet $p=0$	Fluide au repos $p=0$
Tenseur $\overline{\mathbf{D}}$ de la méthode DEVSS	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}\overline{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{n}=0$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}\overline{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{n}=0$	Condition de Neumann $\boldsymbol{\nabla}\overline{\boldsymbol{D}}\cdot\vec{n}=0$	Fluide au repos $\overline{\mathrm{D}}_{ij}=0$

Il apparaît de manière assez évidente que la condition concernant le tenseur des extra-contraintes sera toujours la même. Ceci s'explique majoritairement par le fait qu'imposer une condition frontière autre que celle de Neumann est quasiment impossible, car il s'agit d'une variable dépendante du gradient du champ de vitesse. Il faudrait connaître le gradient, ce qui détruirait tout l'intérêt d'une simulation numérique visant à déterminer comment la contrainte influence le gradient de vitesse et réciproquement.

En somme, il est important de signaler qu'à cause de l'utilisation de la méthode DEVSS, le problème doit être étudié en régime transitoire. En effet, cela est dû au fait qu'il est peu raisonnable d'utiliser une condition autre que celle de Neumann a $\overline{\boldsymbol{D}}$ en tout point. Comme précédemment, il faudrait connaître le gradient du champ de vitesse ce qui rendrait la méthode peu intéressante. Or, en faisant le choix d'utiliser cette condition frontière pour ce genre de problème, cela reviendrait

par analogie à étudier un problème de transfert thermique possédant un terme source où toutes les parois sont isolées. Le problème est un problème de Neumann avec termes sources pour lequel une solution en régime permanent ne peut être garantie dans le cas général; il faut absolument utilisée le régime transitoire. Ce qui signifie qu'il est impératif de définir des conditions initiales telles qu'elles soient représentatives de ce qui pourrait se passer au démarrage d'une mise en profilé.

Étant donné que le fluide est censé être au repos dans la filière, si elle n'est pas en fonction, il paraît légitime de supposer qu'initialement le fluide est immobile et que la pression entre l'entrée et la sortie est équilibrée. Ceci signifie qu'initialement (t=0) :

$$\vec{v} = \vec{0}; p = 0; \tau_{ij} = 0; \overline{D}_{ij} = 0$$

3.2.2 Implantation sous Comsol

Maintenant que les équations à utiliser sont connues et que toutes les conditions frontières sont posées. Voyons comment implanter tout ce qui a été présenté précédemment. Il existe essentiellement trois manières de procéder sous Comsol si les équations de base n'existent pas.

La première consiste à utiliser une formulation forte de l'équation et d'y ajouter des termes stabilisant (SUPG, GLS,…) à l'aide d'une fonction particulière dans Comsol. Cette technique est de loin la plus utilisée, car elle permet d'entrer les équations sans se soucier des termes de la formulation. C'est aussi la technique la plus opaque compte tenu du fait qu'il n'y a aucun moyen d'être sûr que la formulation faible finale que Comsol utilisera est bien celle formulée. La seconde est une variante de la première et se nomme formulation par coefficient. Ici, une version générale de toutes les équations est écrite et les seules choses modifiables sont les coefficients affichés dans cette équation. Cette méthode est encore plus opaque que la précédente puisqu'elle limite la liberté de la forme des équations à celle proposée par Comsol. La dernière méthode, nommée formulation faible, est celle qui sera utilisée dans cette étude. Il s'agit de rentrer de manière brute la forme faible des équations présentés précédemment. Cette méthode a été choisie, car elle est la plus transparente des trois techniques vu que les termes de stabilisation sont introduits explicitement dans Comsol.

Une fois ce choix fait, il a été décidé de ne pas utiliser le module CFD de Comsol considérant qu'il pourrait y avoir une incompatibilité fondamentale entre les techniques de stabilité utilisées et celle équipant le module CFD. La forme faible des équations de Cauchy est recréée,

puis testée dans un premier temps. Dans un second temps, une fois que la méthode a convergé pour des fluides newtoniens simples, dont les solutions sont connues, l'équation d'Oldroyd_B a été créée et couplée à celle de Cauchy déjà implantée. La première version de cette équation était dénuée de tout terme stabilisant et utilisait une formulation de Galerkin avec des éléments P2. Il est important de signaler que les éléments utilisés dans l'équation de Cauchy sont des éléments P1 pour la pression et P2 pour le champ de vitesse. Lorsqu'une convergence était obtenue à très faible nombre de Weissenberg (environ 0.01), une technique de stabilisation était ajoutée par-dessus afin de monter en nombre de Weissenberg. Pour s'assurer que Comsol implantait correctement les méthodes de stabilisations (SUPG et DEVSS), plusieurs cas tests ont été utilisés.

Ces cas tests consistent, par exemple, dans le cas de SUPG, à simuler une onde de choc. Dans ce cas précis, la méthode Galerkin classique oscille assez violemment, car elle ne supporte pas des variations rapides induites par une convection forcée. La méthode SUPG, quant à elle, n'est pas supposée osciller ce qui indiquerait que l'implantation a correctement été réalisée. La dernière étape consistera à prédire une rhéofluidifiance en fonction du taux de cisaillement. Pour ce faire, il a été ajouté le terme exponentiel de PTT manquant à l'équation d'Oldroy-B. Il a suffi, par la suite, de vérifier que les données obtenues étaient bien conformes au cas analytique avant d'aller plus loin et de prédire le phénomène en trois dimensions. Ceci a été impossible sous Comsol pour les raisons qui seront évoquées dans la présentation des résultats.

3.2.3 Implantation sous Foam-Extend

Contrairement à Comsol, ici il ne sera pas question de construire la simulation en partant d'une page vierge. Grâce au travail du professeur Jovanni L. Favro, qui a déjà implanté une dizaine de modèles dont les trois présentés précédemment, cela consistera en une manipulation du logiciel qui ne possède aucune interface graphique à utiliser [71]. En outre, Foam-Extend, contrairement à Comsol, n'a pas de logiciel de CAO avancé qui générerait des géométries complexes ainsi que leur maillage associé. Il faudra donc aussi trouver un autre logiciel pour remplacer le constructeur de maillage de base (BlockMesh) fourni avec Foam-Extend.

Pour utiliser Foam-extend en viscoélastique, il est nécessaire de créer trois fichiers indispensables. Le premier est appelé 0 et contiendra les conditions initiales ainsi que les conditions frontières de chaque variable. Le second, dénommé constant, aura à la fois les données du maillage,

de la géométrie et les propriétés du fluide. Le dernier fichier, intitulé system, comprendra toutes les méthodes relatives à la FVM ainsi qu'à la décomposition du domaine en vue de sa parallélisation. Par la suite, à chaque fois, qu'il faudra exécuter OpenFoam, il sera important d'exécuter une suite d'instruction dont la première est la génération du maillage. Tel que stipulé précédemment, cette étape ne sera pas réalisée à l'aide du logiciel de base fournie dans Foam-Extend. À la place, il a été décidé d'utiliser le logiciel GMSH beaucoup plus versatile et puissant que blockMesh. Il s'exécute normalement en écrivant un code détaillant toutes les spécificités du maillage. Cependant, il existe une interface graphique, dénommée OpenCascade, aidant à manipuler les géométries et à obtenir des prévisualisations du maillage fort utile. Une fois que les données de maillage sont générées par GMSH, il ne suffira plus que de décomposer le maillage à l'aide de l'algorithme metis puis de lancer la simulation en parallèle, en utilisant les commandes de la bibliothèque MPI. Une fois les résultats bruts obtenus, le post traitement des données se fera grâce au logiciel ParaView. Il suffira, pour finir, de comparer ces données à celles obtenues analytiquement pour vérifier leur prédiction théorique. Puis, de confronter la simulation à des cas réels pour voir si les données obtenues sont bien celles observées expérimentalement. Pour ce qui est de la convergence à proprement parler, elle sera vérifiée en traçant graphiquement le résidu initial en fonction du temps. Ce point sera expliqué plus en détails dans la partie résultats à la section dédiée à Foam-Extend. Pour finir, il est à noter que le solveur utilisé dans Foam-Extend est un solveur Bi-gradient conjugué stabilisé (BiCGStab) combiné à un préconditionneur ILU0.

3.3 Vérification des simulations numériques

Les modèles présentés antérieurement sont censés prédire un certain nombre de comportements non newtonien. Considérant la forte teneur en terme hyperbolique de ces équations, il n'est absolument pas évident de trouver des solutions analytiques à ce problème. Fort heureusement, dans certains cas bien spécifiques, le problème se simplifie énormément et permet d'obtenir certaines solutions comparables à celles prédites. L'une de ces situations consiste à considérer un cisaillement linéaire tel que:

$$|\dot{\gamma}| = ax + b$$

Ici, a et b représentent des constantes et x représente la composante orthogonale à l'écoulement où s'établit le champ de contrainte(en cisaillement et normale). Pour obtenir ce phénomène, il suffit

de simuler un écoulement établi dans une conduite (cylindrique ou rectangulaire) qui peut être représentée par la forme suivante (en 2 Dimensions).

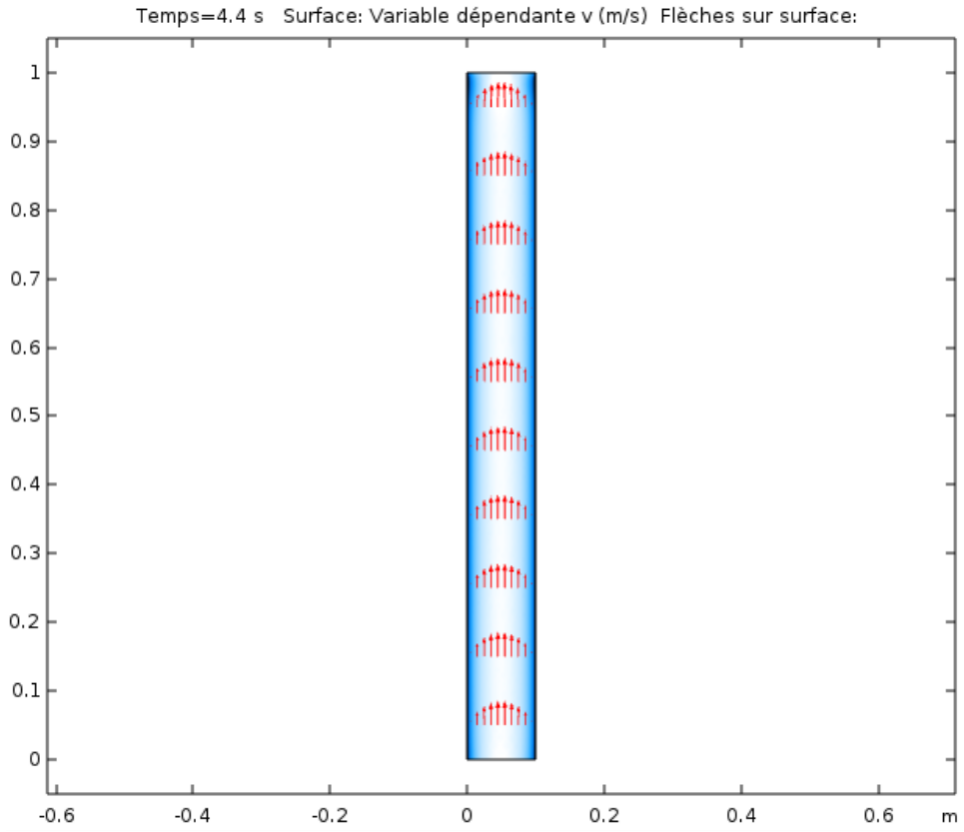

Figure 3.1 Profil de vitesse dans une fente.

Sur cette figure, le profil de vitesse est représenté par des flèches orientées dans le sens de l'écoulement. Cette forme et le fait que l'écoulement soit bidimensionnel forcent le profil de vitesse à prendre une configuration parabolique classique. Grâce à cela, il est possible de simplifier les équations définissant le tenseur des extra-contraintes afin d'en extraire des équations du coefficient de la première différence des extra-contraintes et de la viscosité. Il suffira, ensuite, de comparer ces valeurs à celles obtenues par simulation et d'en tirer les conclusions qui s'imposent quant à la validité de ces résultats. À titre d'exemple, voici quelle serait analytiquement la forme de l'équation définissant la viscosité en fonction du temps pour un modèle de Maxwell convecté [10]:

$$\eta_{analytique} = \frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} = \eta_0 \left(1 - e^{\frac{\lambda}{t}}\right) \tag{46}$$

En supposant qu'ici la définition de l'erreur est celle prise au sens de la norme L2. C'est-à-dire :

$$erreur = \left(\int_{\Omega} \left(\frac{\eta_{i_{simulée}} - \eta_{analytique}}{\eta_{analytique}} \right)^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}} \tag{47}$$

La vérification consistera à obtenir une erreur avoisinant les 1% ce qui permettra de considérer que la simulation est suffisamment fiable pour être utilisée dans des prédictions.

Dans les cas où il est impossible d'avoir des solutions analytiques, il est possible de mettre à profit la méthode d'extrapolation généralisée de Richardson qui consiste à lancer plusieurs simulations pour des maillages de plus en plus fins, et qui dans la limite de la convergence asymptotique permet d'estimer la solution qui serait obtenue pour un maillage infiniment petit [101]. Cette solution peut alors servir comme solution de référence à la place de la solution analytique. Toutefois, ceci n'est qu'une première partie du problème puisqu'il faudra confronter ces prédictions à la réalité expérimentale. Ceci est abordé à la section suivante.

3.4 Précision relative à la validation expérimentale du projet

Après l'étape de vérification de la bonne implantation du modèle numérique, il est d'usage de réaliser la validation du modèle numérique par comparaison des prédictions du modèle à des données expérimentales. Dans ce contexte-ci, une des possibilités aurait été de réaliser des tests sur le profilé en faisant varier la pression d'entrée puis en mesurant le débit de sortie et l'épaisseur des films produits. De cette manière, il aurait été possible d'estimer si les simulations permettent bien de prédire le même comportement observé expérimentalement. Toutefois, la validation n'a pu être menée à terme pour trois raisons:

1. le manque de disponibilité de l'extrudeuse et de son profilé, et du celluloïd lui-même;
2. la dangerosité du celluloïd qui empêche de réaliser les mesures rhéologiques (p.ex. contrainte seuil, module de perte, module stockage…) requise comme donnée d'entrée du modèle numérique;
3. les contraintes de temps reliées au projet.

CHAPITRE 4 RÉSULTATS ET ANALYSE

Après cette brève explication de la méthodologie qui a été employée afin de répondre aux objectifs spécifique de cette recherche, il est maintenant temps de voir quels résultats ont pu être obtenus. Dans cette partie, il sera présenté, dans un premier temps, les données rhéologiques utilisées ainsi que la manière dont ont été obtenus les paramètres des modèles viscoélastiques. Dans un second temps, les données obtenues seront examinées à l'aide de la méthode des éléments finis implantés dans le logiciel Comsol ainsi que les limitations du logiciel. Pour finir, les données qu'il a pu être possible d'obtenir par la méthode des volumes finis implantée dans le logiciel Foam-Extend seront exposées. Il faut porter à l'attention du lecteur que le développement de la partie éléments finis (Comsol) du projet a pris près de deux ans de développement. Tandis que la méthode des volumes finis (Foam-Extend) n'a été étudiée que durant les 6 derniers mois de la recherche.

4.1 Données rhéologiques et choix des paramètres des modèles

À l'aide des données de viscosité apparente en fonction du taux de cisaillement apparent obtenue en rhéomètre capillaire (C. Dubois, M. Massart, communication privée, aout 2018), il est permis de construire une courbe de viscosité en fonction du taux de cisaillement à une température donnée. Rappelons que le but de cette étude est de prédire les plus fortes contraintes normales qu'il serait théoriquement possible d'observer.

Tableau 2 Viscosité en fonction du taux de cisaillement, pour un écoulement de celluloïd dans un profilé à 70 °C.

Taux de cisaillement, 1/s	Viscosité en cisaillement Pa.s	Logarithme du cisaillement	Logarithme en base 10 d'êta
33.2	1497.8	1.52	3.18
62.7	898.0	1.80	2.95
120.4	535.4	2.08	2.73
321.1	243.0	2.50	2.38
781.0	113.8	2.89	2.06
1750.9	56.0	3.24	1.75
4995.1	21.9	3.70	1.34
9990.2	11.7	3.99	1.07
13048.4	10.2	4.11	1.01

Le Tableau 3 présente les données obtenues en rhéologie capillaire. Ces données ont été récoltées à la plus basse température d'opération possible c'est-à-dire 70 °C. Il est à signaler qu'il n'existe aucun appareil capable de mesurer directement la viscosité d'un fluide en écoulement. Ces données ont été obtenues en mesurant la pression et le débit de sortie, puis en appliquant une formule qui permet de déduire le cisaillement aux parois et la viscosité.

En représentant ces données sur un graphique logarithmique et en essayant de faire passer une courbe à travers les points, il est possible de construire la courbe suivante.

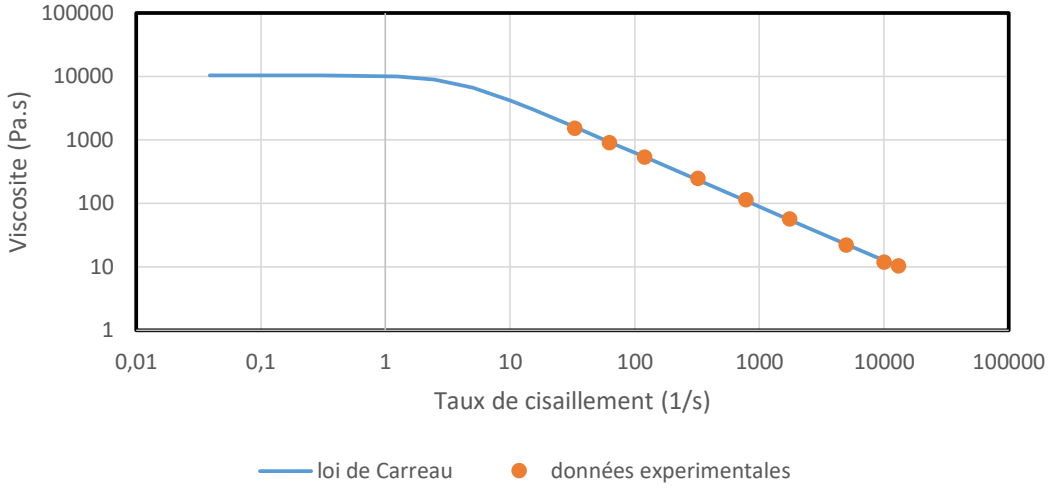

Figure 4.1 Loi de Carreau vs données expérimentales à 70 °C.

La Figure 4.1 présente la régression non linéaire (obtenue par Matlab « fitnlm ») du modèle de Carreau sur les données rhéologiques. La viscosité plateau à faible taux de cisaillement η_0 n'étant pas disponible à partir des données expérimentales, le paramètre η_0 a été approximativement estimé à 10 kPa.s à partir des travaux de Beverly et Tanner pour des mélanges NC/NG [102] pour des températures similaires. Après régression, les paramètres n et l du modèle de Carreau ont été estimés respectivement à 0.19 et 0.31 s (avec des p-valeurs de 1.6E-11 et 3.2E-10).

Pour ce qui est du temps de relaxation λ, puisqu'il n'a pas été possible de le déterminer par une quelconque expérimentation, il a été décidé de le poser plus ou moins arbitrairement à 0.264

s, valeur choisie par Beverly et Tanner pour un mélange[5] à forte teneur (supérieure à 60%) en NC similaire au celluloïd [102]. Les résultats de simulations ainsi obtenus à partir de ces valeurs, régressées et choisis, seront donc à prendre que comme une preuve de concept et non comme des valeurs physiquement réalistes.

Pour résumer, les paramètres des modèles viscoélastiques censés représenter le celluloïd seront les suivants :

Tableau 3 Résumé des paramètres utilisés.

	White-Metzner	PTT	Giesekus
η_0	$10\ kPa.s$	n.a.	n.a.
n	0.19	n.a.	n.a.
l	$0.31\ s$	n.a.	n.a.
λ	0.264 s	0.264 s	0.264 s
η	n.a.	$10\ kPa.s$	$10\ kPa.s$
ε	n.a.	0.19[6]	n.a
α	n.a.	n.a	0.22[4]

n.a. : Non applicable.

Il est à noter que, pour la partie impliquant le logiciel Comsol, un modèle type Maxwell a été implanté avec des valeurs de paramètres plus faibles dans un premier temps. Ce choix a été fait,

[5] Il ne faut cependant pas oublier que le mélange de Beverly et Tanner est plastifié avec de la nitroglycérine ce qui n'est pas le cas pour du celluloïd.

[6] Ces valeurs ont été obtenues par calibration de sorte que la courbe de viscosité en fonction du taux de cisaillement générée par simulation dans une conduite à section rectangulaire concorde à la courbe rhéologique de la Figure 4.1.

parce que, pour des valeurs de temps de relaxation réelles, la simulation n'arrivait pas à converger. Ceci sera expliqué plus en détail dans la section suivante.

4.2 Implémentation sous Comsol

4.2.1 Test de la Méthode de Galerkin continue

Telle que précisée dans la partie méthodologie, la technique employée pour implanter le modèle viscoélastique dans Comsol sera, grâce à la formulation faible, disponible sous Comsol. L'idée de départ est de simuler de manière « naïve » l'équation d'état du fluide sans utiliser de terme de stabilisation. Pour ce faire, la première étape a été de construire l'équation en 2 dimensions et de la coupler à l'équation de Cauchy. Puisque le tenseur des extra-contraintes est un tenseur d'ordre 2 de dimension 2*2 et qu'il est symétrique, cela signifie qu'il faut rajouter 3 équations différentielles aux 3 de base définissant les deux composantes(en 2 dimensions) de la vitesse ainsi que la pression. Par conséquent, il est impératif d'ajouter 3 fonctions tests qui permettront d'affaiblir ces équations. Cette première version simplifiée donne donc un total de 6 équations auxquelles sont associées 6 fonctions tests. À noter que, sous Comsol, lors de la déclaration des variables tests affaiblissant la formulation forte, cela se fera via une commande nommée test. Par exemple, dans le cas simplifié présenté, cela signifie que les variables et leur fonction test associée seront nommés :

$$\sigma_{11}; \sigma_{12}; \sigma_{22} \; et \; test(\sigma_{11}); test(\sigma_{12}); test(\sigma_{22})$$

Cette définition de test revient à utiliser la formulation de Galerkin classique. Dans le cas présent, la discrétisation de ces fonctions tests se fera grâce à des éléments de Lagrange P2. Ce choix a été fait pour diminuer la quantité d'éléments à générer compte tenu des techniques de stabilisation qui seront utilisées plus tard. Une fois tous ces paramètres et équations implantés, il est nécessaire de vérifier si l'équation de Maxwell convecté a été correctement implantée sur Comsol. Pour y arriver, il a donc été décidé de simuler un écoulement en régime transitoire dans la géométrie présentée dans la partie méthodologie. Comme condition d'entrée, il a été décidé d'appliquer un profil de vitesse parabolique avec une vitesse maximale au centre de 0.1 m/s en entrée. Ce choix a été fait pour des raisons de stabilité et afin de comparer directement le profil de vitesse en entrée à celui obtenu à un point quelconque de la simulation.

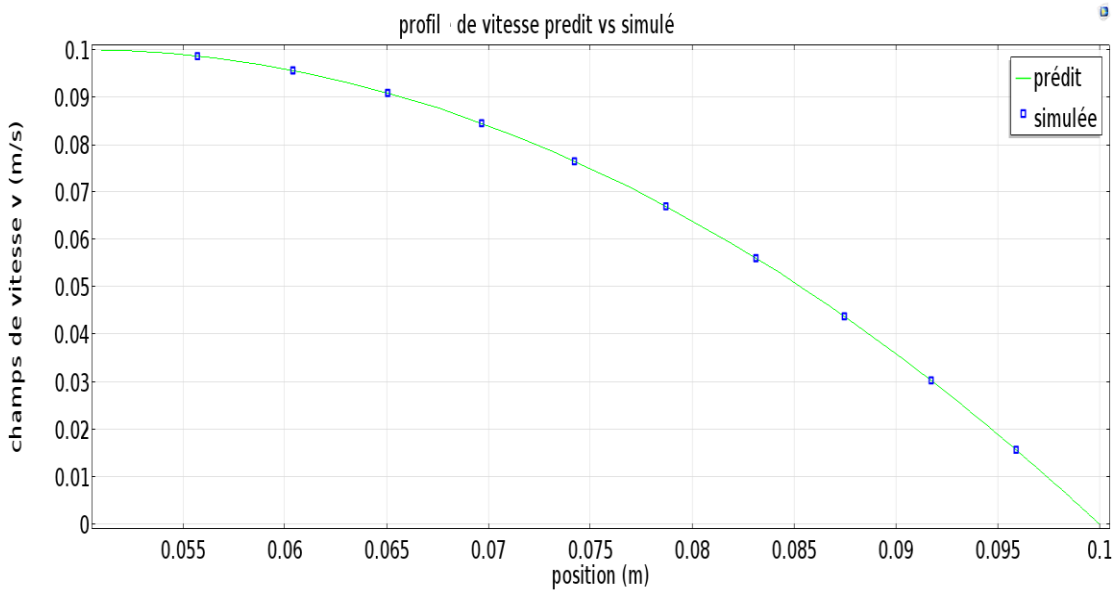

Figure 4.2 Profil de vitesse à faible nombre de Weissenberg.

Le résultat présenté à la figure précédente montre que le profil de vitesse obtenu par simulation (point en bleu sur la figure) correspond parfaitement au profil de vitesse parabolique classique (trait continue vert). Théoriquement, c'est ce que prédit le modèle de Maxwell convecté. Il est, par ailleurs, important de signaler que ce profil est celui obtenu lorsque le système a atteint son régime permanent. Toutefois, ce résultat ne montre en rien qu'il y a bien un effet viscoélastique. Pour le faire apparaitre, il faut regarder la première différence de contraintes normales aux parois. Pour un fluide newtonien commun, dans un cas comme celui-ci, il ne devrait pas y avoir de contrainte normale quelle que soit la position où l'observation est réalisée. Or, dans cette simulation, il est possible de prédire une différence de contrainte non nulle (excepté au centre) significative.

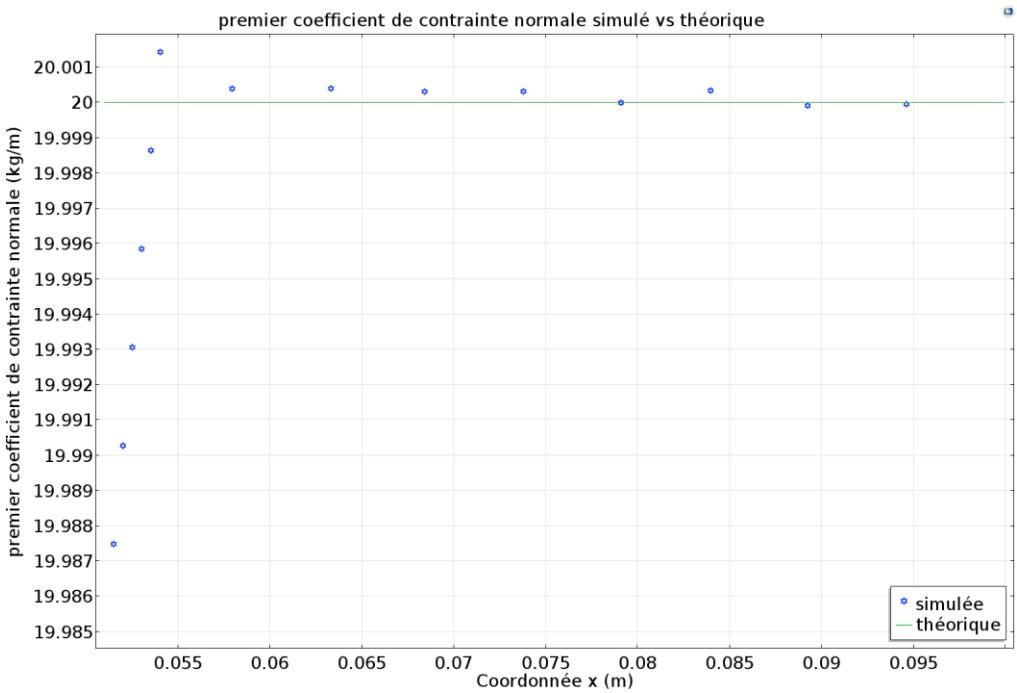

Figure 4.3 Premier coefficient de contraintes simulé à faible nombre de Weissenberg (modèle non stabilisé).

Comme il est possible de le constater à la lecture de la figure ci-dessus, la valeur du premier coefficient de contrainte normale est supposée être théoriquement constante et vaut:

$$\psi_1 = 2\eta_{pol}\lambda = 20\frac{kg}{m} \ (16) \tag{48}$$

Numériquement, la valeur obtenue est quasiment constante mis à part de très légères variations imputables essentiellement au fait que proche du centre de la géométrie le cisaillement et la première différence de contrainte ($\tau_{11} - \tau_{22}$) tendent vers 0. Cependant, cette variation crée, au maximum, une erreur de l'ordre de 0.075% ce qui est largement en-dessous du seuil de 1% fixé dans la partie méthodologie.

Tableau 4 Erreurs obtenues à faible nombre de Weissenberg (modèle non stabilisé).

	$\frac{\sigma_{12}}{\lvert\dot{\gamma}\rvert}$	Vitesse	ψ_1
Erreur selon la norme L2	0.00005%	0.00005%	0.1%

Les erreurs ainsi obtenues sur les variables d'intérêt et sont très largement en dessous de 1% ce qui respecte le critère fixé et permet de dire que la simulation est valide d'un point de vue théorique. Néanmoins, cette simulation ne fonctionne que pour un nombre de Weissenberg inférieur ou égal à 0.1. Au-delà de cette faible valeur, il s'avère que la simulation ne converge pas quel que soit le maillage employé. Pour arriver à dépasser cette trop faible valeur du nombre de Weissenberg, il est impératif d'utiliser des techniques de stabilisation présentées dans la revue de la littérature.

4.2.2 Test de la stabilisation couplée SUPG/ DEVSS

Il a été impossible de dépasser un Weissenberg de 0.1 quel que soit le maillage par la méthode de Galerkin non stabilisée, ce qui est cohérent puisque l'équation d'état est à dominante convective. La stabilisation du système d'équations a dû être faite en en ajoutant des termes aux fonctions test de base. Toutefois, pour que cela soit réellement efficace, il est nécessaire d'appliquer toutes ces modifications à une forme alternative de l'équation d'état. Cette dernière est celle du tenseur de conformation qui est relié au tenseur de contrainte par la formule présentée dans la revue de la littérature. En raisonnant de cette manière, il est possible de grandement stabiliser le problème et de multiplier le nombre de Weissenberg maximal atteint par un facteur 8 ce qui est assez bon.

L'inconvénient d'utiliser cette technique est que raisonner sur le tenseur de conformation nécessite de renoncer à chercher une quelconque interprétation physique aux valeurs de la variable obtenue. Cela est dû au fait que cette variable est reliée à la conformation que peut prendre la molécule dans l'espace qui lui est allouée. Puisque raisonnée sur le sens physique que représente le tenseur des extra-contraintes est une chose déjà ardue, il semble encore plus improbable

d'obtenir une interprétation physique sur une variable encore plus abstraite. De plus, la technique DEVSS impose d'ajouter 3 nouvelles équations en 2D pour définir les composantes du tenseur de taux de cisaillement. Ceci augmente le nombre d'équations différentielles (ainsi que le nombre de fonctions test associées) le faisant passer de 6 à 9. Les résultats restent, cependant, appréciable et il est assez aisé de remarquer qu'une fois les problèmes d'implémentation passés les simulations en 2 dimensions sont assez rapides.

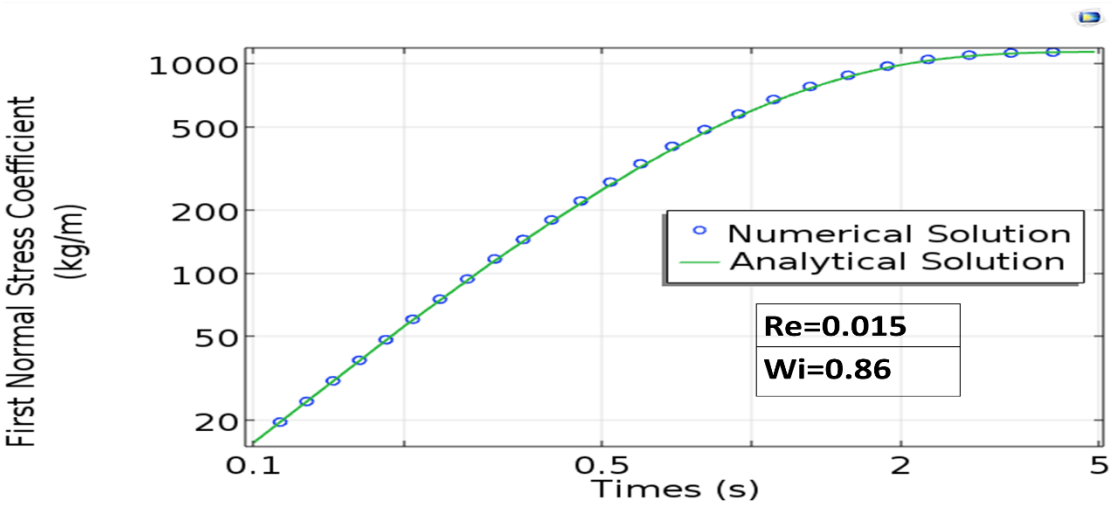

Figure 4.4 Premier coefficient de contraintes normales prédit à l'aide d'un modéle oldroyd-B stabilisé [72].

Il est donc permis de constater, sur la courbe précédente, que les résultats simulés suivent ce que prédisent les solutions analytiques. Cette courbe présente, ainsi, les résultats en régime transitoire d'un test appelé shear stress step. L'idée derrière ce test est d'appliquer à t0 un taux de cisaillement constant en tout point du système et de mesurer l'évolution des fonctions rhéologiques présentées précédemment. Dans un cas newtonien incompressible, la réponse au test est instantanée puisqu'à cause de l'équation de continuité, le transport de l'information est instantané. Or, dans un cas viscoélastique, la transmission de l'information est freinée proportionnellement au temps de relaxation qui limite le transport de l'information. Ceci se caractérise sur la courbe par un délai entre le moment où le test est démarré(t=0) et le moment ou le régime permanent est atteint. Dans ce cas, le temps auquel la courbe atteint le régime permanent, représenté graphiquement par un plateau ce situe à 5 s. Ce phénomène est prédictible analytiquement par l'équation suivante [10] :

$$2\eta_0\lambda\left(1-e^{-\frac{t}{\lambda}}\left(1+\frac{t}{\lambda}\right)\right) \tag{49}$$

C'est les résultats de cette équation qui ont été représentés sur la courbe par la ligne continue. En les comparant au point bleu obtenu par simulation numérique, il apparait que les deux courbes se superposent quasi parfaitement. L'erreur par la norme L2 n'est d'ailleurs que de 0.5%, ce qui est en dessous du seuil de 1 % fixé. Les résultats sont donc suffisamment précis pour être utilisés dans la simulation numérique de l'écoulement pour une géométrie un peu plus complexe. La géométrie qui a été choisie pour réaliser cette expérience est une contraction 4 :1en 2 dimensions représentée à la Figure 4.5.

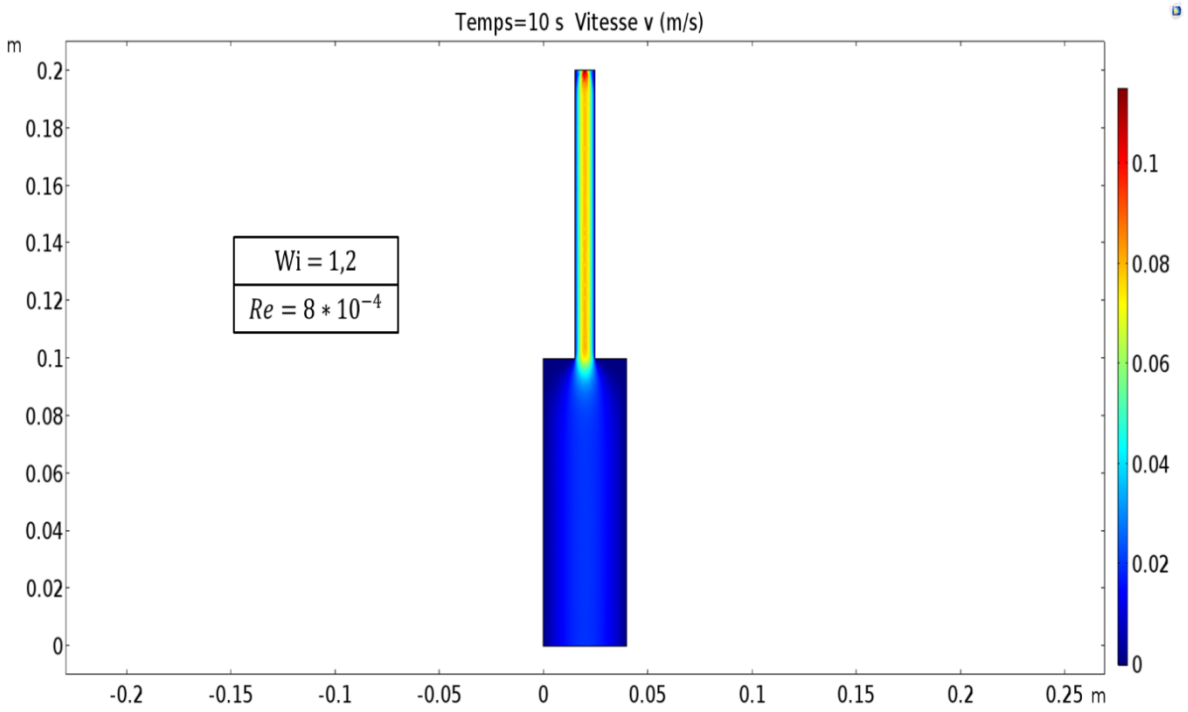

Figure 4.5 Simulation d'une contraction sous Comsol.

Ici, l'entrée et la sortie se situent respectivement à y=0 et y=0.2; le reste des conditions frontières sont des parois. Sur la figure précédente, le code couleur représente le profil de vitesse en tout point de la géométrie. Il apparait de façon très évidente que le fluide est accéléré une fois la contraction dépassée. Ceci est cohérent avec ce qu'il est possible d'observer physiquement puisque le débit volumétrique est constant (fluide incompressible) le profil de vitesse doit augmenter pour pallier la réduction de section. Il est, par contre, impossible de prédire

analytiquement si le profil de vitesse est le même que celui obtenu analytiquement. En effet, il n'existe aucune solution analytique à ce problème. La seule manière de savoir si cette solution numérique est juste est de vérifier si elle prédit les comportements observables expérimentalement. L'un de ces comportements est le fait qu'après une contraction la quantité de contraintes normales augmente brutalement. Puis, elle se dissipe au fur et à mesure que le fluide avance dans la conduite. Cela est dû à l'effet mémoire induit par la partie élastique du fluide et à la déformation que subit la macromolécule une fois qu'elle entre dans la contraction. Elles sont ainsi distordues comme un élastique qui se ferait tendre d'un seul coup. Cet excès de contrainte sera, par la suite, atténué par le réarrangement des molécules dans le nouvel espace qu'elles occupent. Il suffit donc d'observer la différence de contraintes normales pour se rendre assez vite compte de cet effet ce qui est représenté à la Figure 4.6.

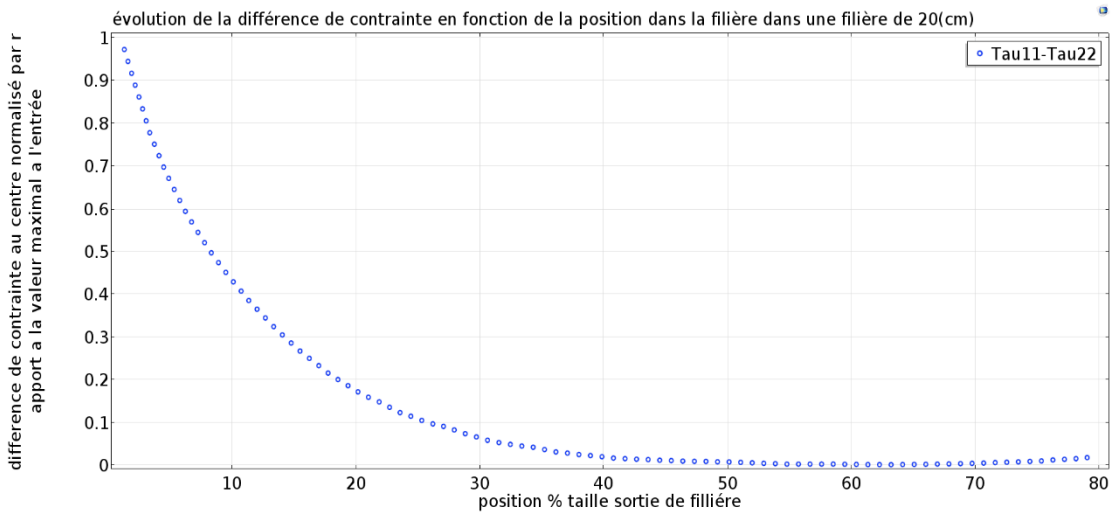

Figure 4.6 Évolution de la première différence de contrainte au centre d'une contraction.

Cette courbe représente l'évolution de la différence de contraintes normales le long de la filière juste après la contraction. Les données ont été normalisées afin de voir l'évolution de cet excès de contrainte. Le choix du centre de la filière n'est pas anodin puisqu'en théorie la contrainte est nulle s'il n'y a pas de contraction. Il est donc légitime de s'attendre à ce qu'elle vaille zéro dès lors que le fluide a fini son réarrangement, ce qui arrive à 50% de la contraction. Le comportement obtenu correspond ainsi, assez fidèlement, à ce qui a été décrit dans le paragraphe précédent. Le modèle est donc assez cohérent physiquement ce qui rend ces prédictions pertinentes. Au vu de ces résultats, il est possible d'affirmer que pour un fluide viscoélastique; si l'écoulement se fait à un

nombre de Weissenberg égal à 1.2 dans une contraction similaire à celle présentée précédemment, il faudrait laisser 5 cm de canal en plus, après la contraction, pour éviter un excès de contrainte normale qui conduirait à une augmentation du gonflement en sortie de filière. Cette analyse n'est valide que si le fluide obéit à une équation de Maxwell convecté ce qui est loin d'être le cas pour la plupart des polymères. Cette divergence est due au fait que la loi de Maxwell convecté, telle qu'elle a été présentée, ne tient pas compte du fait que les propriétés sont dépendantes du taux de cisaillement. Tel que déjà montré dans la revue de la littérature, les polymères tels que le celluloïd ont tendance à voir leur viscosité diminuée dès lors que le taux de cisaillement augmente. Cette diminution peut être suffisamment forte pour transformer un profil parabolique commun en un profil quasi plat. Ceci fausse complètement les résultats et conclusions présentés précédemment, car ils se basent sur le fait que les propriétés du fluide étaient constantes. Fort heureusement, il est possible de corriger ce problème en ajoutant une constante et en modifiant légèrement la forme finale de l'équation du tenseur des extra-contraintes. Sous Comsol, cela a été réalisé en implémentant le modèle E-PTT présentée dans la partie méthodologie. De cette manière, le profil de vitesse suivant a été obtenu:

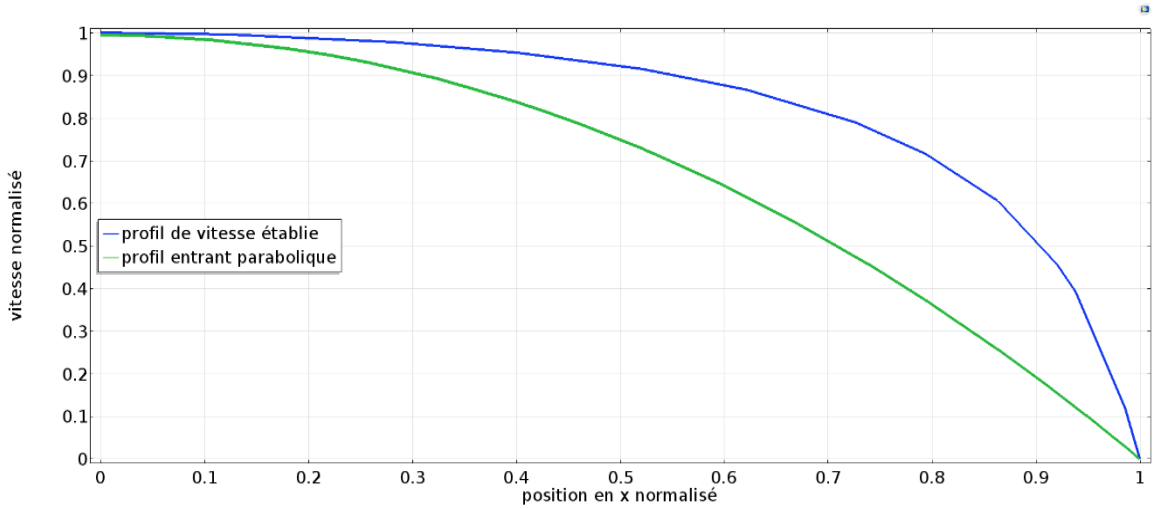

Figure 4.7 Profil de vitesse d'un fluide rhéofluidifiant simulé sous Comsol.

Sur cette courbe, apparaît le profil d'entrée normalisée appliquée ainsi que le profil établi normalisé après une certaine distance parcourue par le fluide. Il est quasi plat puisque la viscosité a tendance à chuter assez rapidement en fonction du taux de cisaillement. La géométrie utilisée, ici, est la même que celle employée pour valider le modèle de Maxwell convecté (c'est-à-dire un

rectangle). Dans cette configuration, le taux de cisaillement sera toujours plus fort aux parois, car le fluide à une vitesse nulle aux parois. A contrario, le fluide aura un taux de cisaillement quasiment nul, proche du centre, puisque le profil de vitesse dans cette zone est plat. Ces deux affirmations impliquent que la viscosité du fluide devrait être plus grande au centre et plus faible proche des parois puisque le fluide est rhéofluidifiant. Pour vérifier si cette affirmation est validée dans notre modèle, il suffit de considérer un fluide ayant une viscosité à taux de cisaillement nul de 1000 Pa.s et de voir comment évolue la fonction de viscosité η qui a été définie dans la revue de la littérature comme étant le ratio contrainte en cisaillement sur taux de cisaillement.

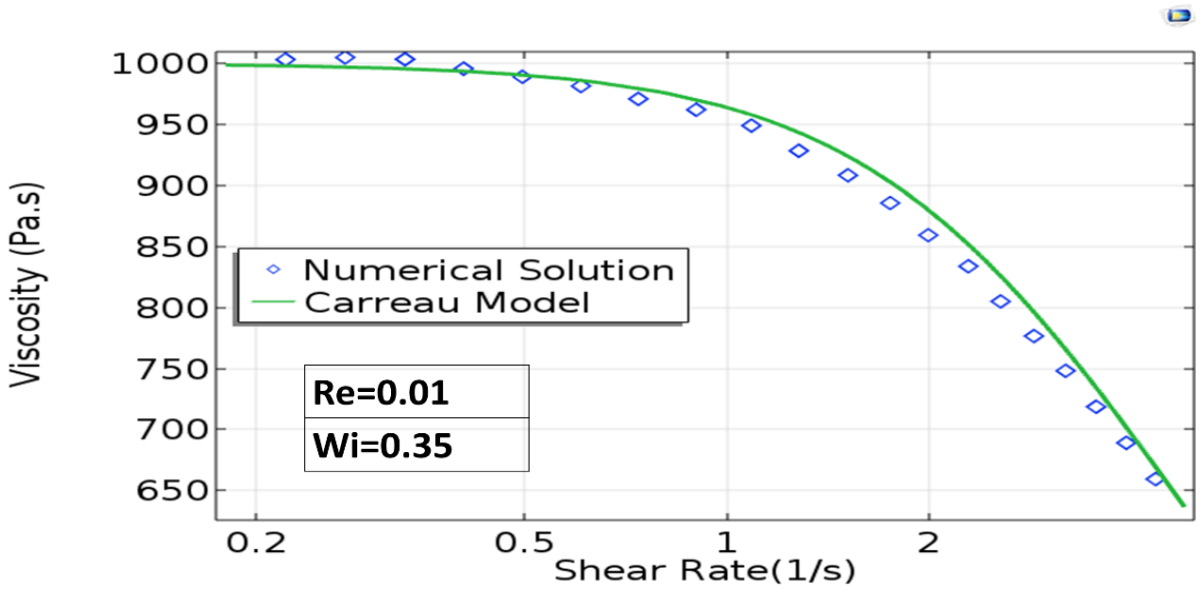

Figure 4.8 Évolution de la viscosité pour un modèle PTT sous Comsol [72].

La figure ci-dessus montre ainsi clairement que la viscosité prédite numériquement est dépendante du taux de cisaillement. En outre, il apparaît que cette viscosité est inversement proportionnelle au taux de cisaillement. Tout ceci tend à prouver que les prédictions faites par la simulation restent cohérentes par rapport au phénomène et donc que le modèle est valide. Toutefois, si les résultats sont comparés à ceux obtenus par un modèle de Carreau avec $\varepsilon = n$ et m=η_0 , les deux courbes suivent la même tendance, mais ne se chevauchent pas en tout point. Vu que les prédictions du modèle de Carreau sont supposément les solutions analytiques du modèle E-PTT, en ce qui concerne la viscosité en régime permanent établie, la norme L2 de l'erreur calculée grâce aux deux courbes approche les 5%. Bien que cela soit faible, cette valeur est au-dessus des 1% de seuil fixé dans cette étude. Plusieurs tests ont été réalisés pour raffiner le maillage

afin de diminuer cette erreur, mais ils furent tous un échec. Aucun des maillages raffinés n'a permis d'atteindre une forme de convergence quelconque, ce qui tend à prouver que, malgré tous les efforts mis en œuvre, des instabilités dans la méthode d'implantation choisie subsistent.

4.2.3 Limite de l'implémentation sous Comsol

L'utilisation de Comsol comme outil de simulation numérique découle d'un intérêt de l'industriel partenaire pour la simulation des écoulements viscoélastique par des logiciels commerciaux simples d'utilisation. Comsol a en effet pour avantages de faciliter le couplage de physiques et le transfert rapide de technologie. La version 5.4 permet même de créer des applications autonomes qu'il est possible d'utiliser sans posséder le logiciel Comsol. Il a donc été décidé de voir quel nombre de Weissenberg était possible d'atteindre, malgré les limitations inhérentes aux méthodes Galerkin continues. Après deux ans de développement, il s'est avéré qu'au-delà d'un nombre de Weissenberg de 1, la plupart des simulations n'ont pas convergé. Ce problème est récurrent dans la littérature et il fallait s'y attendre au vu des méthodes employées. Depuis le début de cette étude, il a été précisé qu'il n'existe aucun terme diffusif dans l'équation des extra-contraintes. Cette équation est à dominante convective ce qui est un problème dès lors que des discrétisations de Galerkin commune sont utilisées. Dans la littérature, il est précisé que, pour atteindre des nombres de Weissenberg supérieur à la dizaine, il est obligatoire d'utiliser des techniques discontinues. En élément fini, cela revient à utiliser une technique dite de Galerkin discontinue. Cette technique autorise la discontinuité d'un élément à un autre, ce qui est particulièrement utile dans des cas comme celui étudié ici. Le problème de cette implémentation est qu'elle est très dure, voire même impossible, à réaliser dans Comsol avec les outils fournis par le logiciel. Par surcroît, il faut aborder le problème des solveurs dans Comsol. Depuis le début cela n'a pas été précisé, mais pour résoudre les systèmes d'équations linéaires générées, la technique employée est celle de la décomposition LU. Elle est utilisée à l'aide de l'algorithme Paradiso qui permet de fortement paralléliser les calculs. Toutefois, comme cela est stipulé dans plusieurs livres d'algèbre linéaire, cette technique nécessite un temps de calcul qui évolue en $O(n^3)$. Cela signifie que, si le nombre de mailles est triplé le temps de calcul sera multiplié par 27. Autant en deux dimensions ce n'est pas un problème, car les calculs restent assez rapides, autant en 3 dimensions cela devient inacceptable. Les calculs devraient donc se faire en 3 dimensions par une méthode

itérative munie du préconditionneur adéquat. C'est donc là que Comsol perd tout son intérêt puisque la seule technique itérative intéressante implantée est la méthode GMRES. Cette dernière permet certes de résoudre les problèmes en un temps de l'ordre de $O(n^2)$, mais elle nécessite de trouver le bon pré conditionneur. Sous Comsol 5.3 ce choix est très limité et il n'est pas possible d'importer un autre pré conditionneur d'une source externe. Ceci expliquant pourquoi la plupart des publications utilisant Comsol se concentrent sur la 2D. Le logiciel reste un bon outil pour apprendre les bases, mais il ne permet pas encore de réaliser des projets en viscoélastique à la hauteur de ses concurrents. Pour conclure sur les résultats obtenus à l'aide de ce logiciel, il apparaît que pour des applications à faible nombre de Weissenberg en 2 dimensions, le logiciel est utilisable. En revanche, pour des projets en 3 dimensions d'envergure, il n'est pas encore assez mature. Il faudrait attendre de voir si, dans les futures versions, il existera un moyen d'utiliser la méthode de Galerkin discontinue pour simuler ce genre d'écoulement.

4.3 Implémentation sous Foam-Extend

Sous Foam-Extend, l'implantation de la technique de stabilisation et des modèles viscoélastiques est déjà réalisée pour 10 modèles différents. La véritable difficulté de ce logiciel est que l'environnement de travail est contrôlé par ligne de commande. Il faut donc créer un dossier contenant les éléments de base; c'est-à-dire, maillage, propriété du fluide, propriété du solveur, type de discrétisation et condition frontière pour chaque variable.

Dans tous les cas qui seront présentés sous Foam-Extend, il est à noter que les schémas utilisés sont les suivants :

1. pour les gradients de pression, de vitesse et tous les laplaciens, un schéma d'interpolation linéaire (ou linéaire corrigé) sera utilisé;
2. les divergences sont interpolées à l'aide d'un schéma upwind;
3. un schéma d'Euler implicite en temps sera utilisé avec un pas de temps adaptatif, pour ce qui est des dérivées temporelles. Ce pas de temps sera limité par un nombre de

Courants[7] maximal de 0.1 et ne devra pas dépasser un pas de temps maximal de 0.01s; tel que suggéré par Jovanni L. Favro pour éviter d'éventuelles instabilités de la procédure adaptative [53].

De plus, deux correcteurs seront utilisés dans l'algorithme PISO ainsi qu'un correcteur pour la non-orthogonalité. Il est à signaler que le résidu au début de chaque itération diminue au cours du temps jusqu'à se stabiliser vers une valeur fixée par la tolérance imposée au solveur qui devrait indiquer que le régime permanent est atteint. Ainsi, les tolérances utilisées par le solveur sont : pour la pression de 10^{-7}; pour le tenseur des extra-contraintes de 10^{-6}; pour le champ de vitesse de 10^{-6}.

Puisque la plupart de ces fichiers ne changent pas de forme d'une simulation à l'autre, le véritable problème proviendra de la géométrie et du maillage. Tel que mentionné dans la partie méthodologie, le constructeur par défaut BlockMesh est limité. Il a donc été décidé d'utiliser le constructeur de maillage GMSH qui, lui aussi, fonctionne en ligne de code. L'avantage de ce constructeur par rapport à BlockMesh est qu'il possède une interface graphique facilitant les opérations de CAO.

Cette section présente les résultats de simulations d'écoulement du celluloïd obtenu pour diverses géométries tests en deux et trois dimensions, découlant à l'aide de la méthode de stabilisation DEVSS. Des tests de vérification et de convergence ont été réalisés sur des géométries de plus en plus complexes allant de la simple contraction 2D au cas réel du profilé et seront analysés dans la suite de cette section.

4.3.1 Vérification sur une contraction en deux dimensions

Dans un premier temps, il a été décidé de créer une contraction en 2D afin de simuler un écoulement viscoélastique via différents modèles. Cette géométrie a été choisie, car elle permet d'obtenir certaines données comparables à des prédictions analytiques. La Figure 4.9 présente la

---

[7] Le nombre de Courants étant définis par $Co = \frac{v_i \Delta t}{\Delta x}$

géométrie ainsi que le profil de pression obtenu pour un fluide obéissant à une loi de White-Metzner.

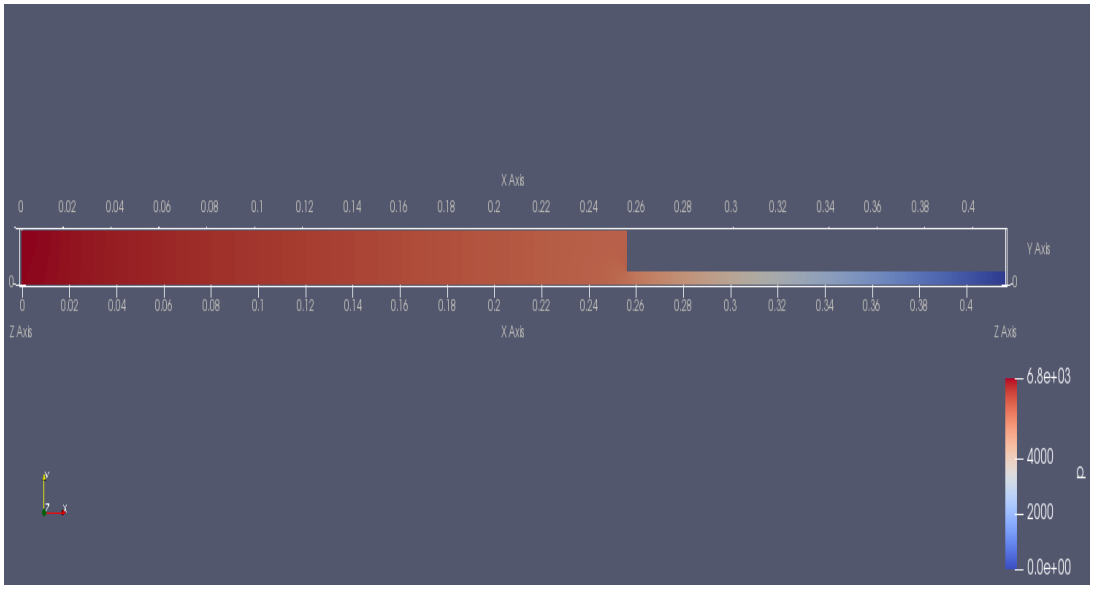

Figure 4.9 Contraction simple en 2 dimensions sous Foam-Extend.

Sur cette figure, l'entrée se trouve au niveau où la pression est la plus forte (surface rouge) et la sortie se trouve du côté où la pression est la plus faible (surface bleue). Le fluide entre ainsi à une vitesse uniforme, ce qui est assez représentatif de ce qui peut être observé à l'entrée d'une filière classique. Il est à noter que les données de pression sous FOAM-EXTEND sont rapportées par rapport à la masse volumique du fluide.

Dans le cas du celluloïd, cette variable a été fixée à 850 kg/m^3, ce qui est la valeur la plus plausible trouvée dans la littérature pour un mélange (faute de données expérimentales suffisantes pour confirmer cette hypothèse) [73]. Comme pour ce qui avait été fait sous Comsol, il faut comparer les résultats produits à ceux obtenus analytiquement. Vu que les modèles les plus intéressants sont déjà implémentés dans le logiciel, il a été décidé de ne pas simuler les équations ne prédisant pas de rhéofluidifiant et de s'attaquer directement à des modèles plus complexes. La Figure 4.10 montre ainsi l'évolution de la viscosité en fonction du taux de cisaillement pour : un modèle de White-Metzner; un modèle exponentiel Phan-Thien-Tanner (E-PTT) ainsi qu'un modèle Giesekus. La vitesse d'entrée imposée est de 0.01 m/s. Les données de viscosité et de temps de

relaxation utilisées sont celles présentées dans la partie « Données rhéologiques et choix des paramètres des modèles ».

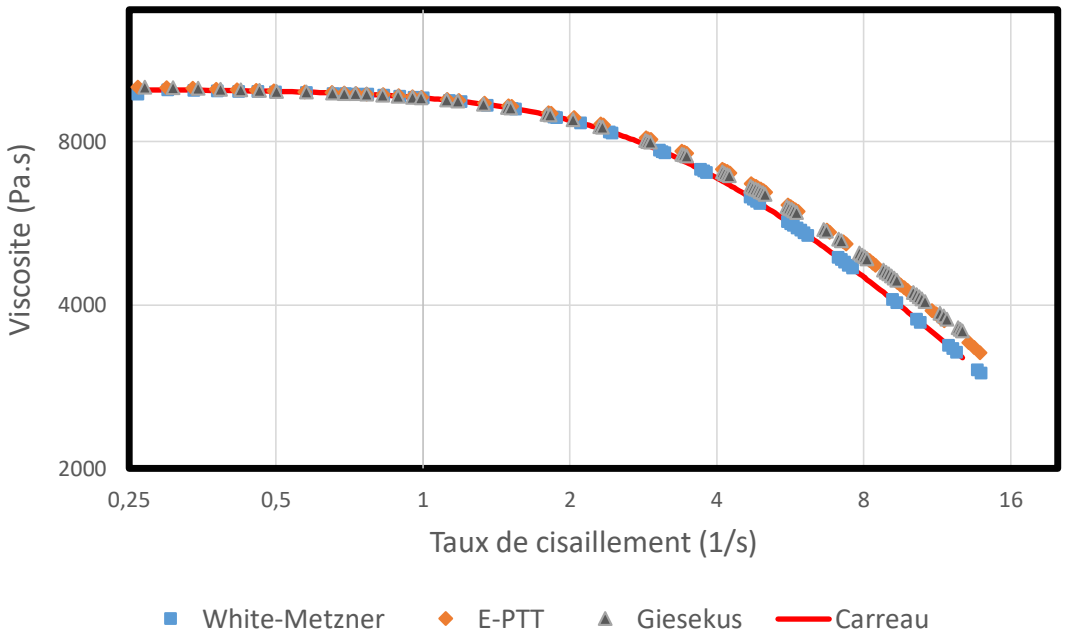

Figure 4.10 Évolution de la viscosité pour différents modèles implantés sous Foam-Extend.

La Figure 4.10 présente les différentes courbes de viscosité générées en traçant une ligne de coupe sur la géométrie présentée à la Figure 4.9 à 0.4 m (c.-à-d. proche de la sortie). Ces données de viscosité sont tracées en fonction du taux de cisaillement afin de mettre en évidence le caractère rhéofluidifiant des modèles. La courbe en rouge représente, à titre indicatif, les données obtenues par la régression de la loi de Carreau à la Section 4.1. Ces résultats montrent que les paramètres choisis par calibration, pour les modèles E-PTT et Giesekus, permettent bien de retrouver la forme générale de la courbe rhéologique. Par ailleurs, les données de viscosité découlant des modèles de White Metzner concordent bien avec celles venant du modèle de Carreau introduit en donnée d'entrée. Ceci est une forme de vérification de la bonne implantation du dit modèle.

Il est évident que le modèle de White-Metzner permet de capturer toute la complexité de la courbe (en comparaison aux deux autres modèles) étant donné qu'il utilise deux paramètres de plus et qu'il utilise en entrée le modèle de Carreau. Les deux autres modèles, quant à eux, n'utilisent qu'un seul paramètre calibré (Cf. Tableau 3). Par ailleurs, ce faible nombre de degrés de liberté ne permet pas un rendu aussi bon de la courbe rhéologique.

Pour ce qui est de la vérification des résultats précédents du point de vue de la convergence de la simulation, la Figure 4.11 présente l'évolution du résidu initial en fonction du temps pour un modèle White-Metzner. Les courbes sont très similaires pour les deux autres modèles viscoélastiques.

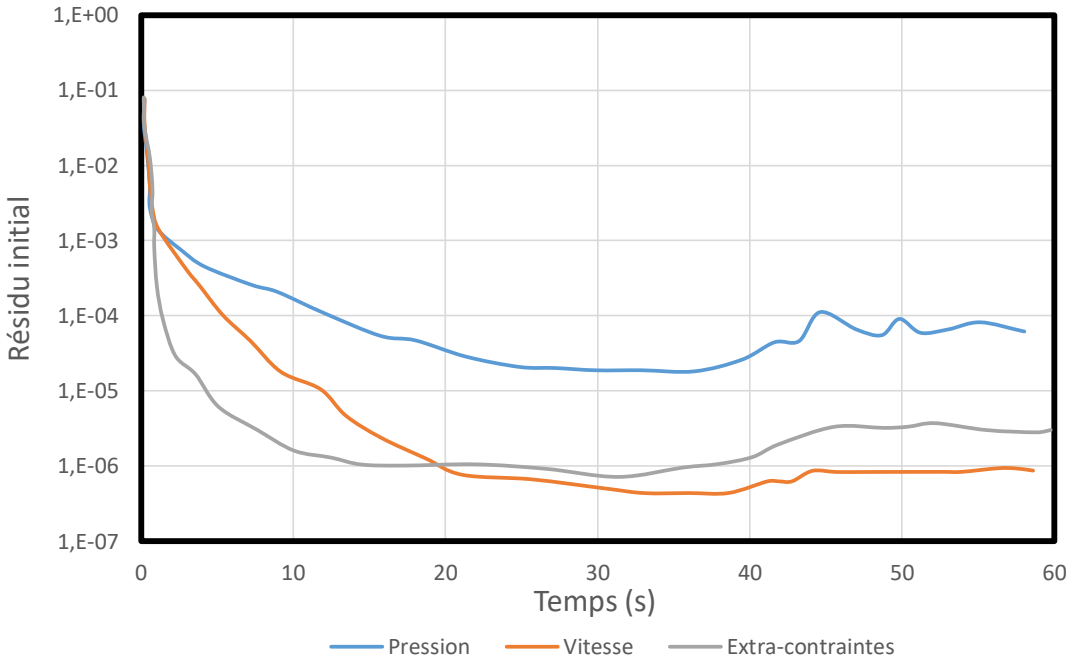

Figure 4.11 Évolution du résidu initial dans une contraction 2D en fonction du temps pour : la pression; la norme de la vitesse; la norme de Frobenius du tenseur des extra-contraintes.

Il apparaît ainsi sur la Figure 4.11 que, pour le champ de vitesse et le tenseur des extra-contraintes, la valeur du résidu initial converge bien vers la valeur de tolérance fixée. Cependant, pour la pression, cette valeur n'est pas atteinte même au-delà de 60 secondes. Après plusieurs tests il semble que cela puisse être réglé en fixant le champ de pression en entrée à la place du champ de vitesse. Ce résultat sera illustré à la section suivante en trois dimensions ou la condition frontière

a été effectivement modifiée. Toutefois, il est possible de dire que, pour l'instant, les résultats semblent cohérents avec la physique et que le résidu initial est relativement assez faible pour poursuivre les tests.

4.3.2 Effet du maillage dans une conduite rectangulaire en trois dimensions

Sous Foam-extend, l'ajout d'une dimension est assez simple puisque le modèle 2D est en réalité un modèle 3D ne possédant qu'un seul élément dans la dimension z. Il faut donc raffiner le maillage dans cette direction et spécifier les bonnes conditions frontières. Comme expliqué précédemment, après plusieurs essaies la meilleure condition d'entrée semble être un profil de pression constant à la place d'un champ de vitesse constant. Pour visualiser ce phénomène une conduite rectangulaire a été construite en trois dimensions sous Foam-Extend.

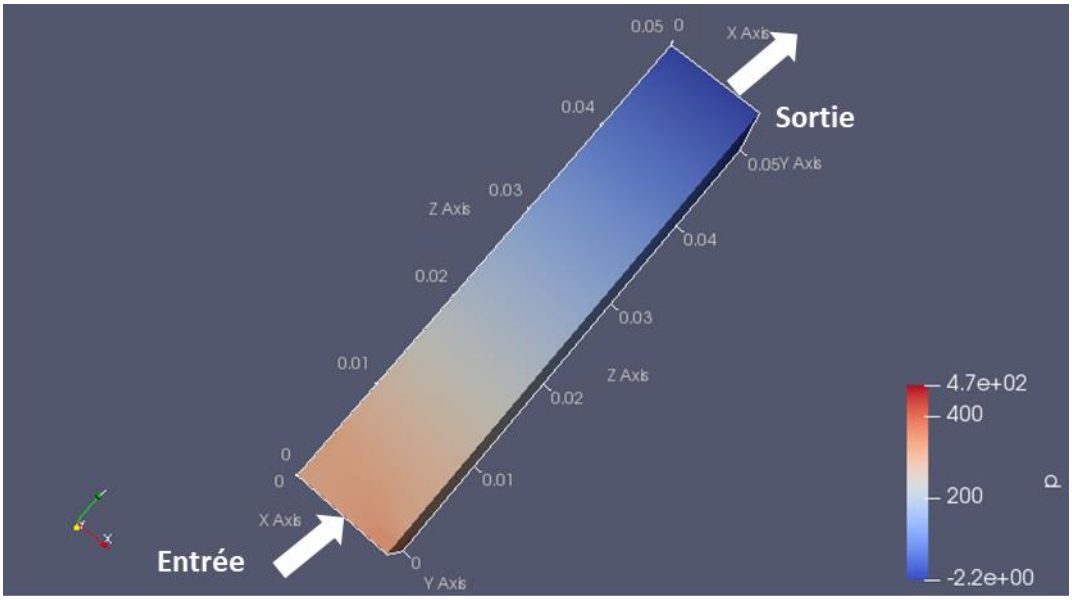

Figure 4.12 Présentation du champ de pression dans une conduite rectangulaire.

Tel que démontré auparavant, sur la Figure 4.12, la couleur rouge représente une forte pression (associée à l'entrée) et la couleur bleue représente une basse pression (associée à la sortie). Il est à noter que la résolution de la conduite n'est réalisée que sur ¼ du domaine par l'utilisation d'axe de symétrie pour un modèle de White-Metzner. Lors de la simulation de l'écoulement dans cette conduite, les tolérances des solveurs ont été abaissée à 10^{-8} afin de voir s'il était possible d'atteindre des résidus initiaux plus faibles en changeant de condition frontière.

La Figure 4.13 présente l'évolution de ces résidus initiaux et il apparaît que le résidu initial pour la pression passe en dessous de la barre des 10^{-6} autour de 40 secondes. Ceci montre que le changement de la condition frontière a bien eu un effet bénéfique sur la convergence et améliore grandement les résidus initiaux.

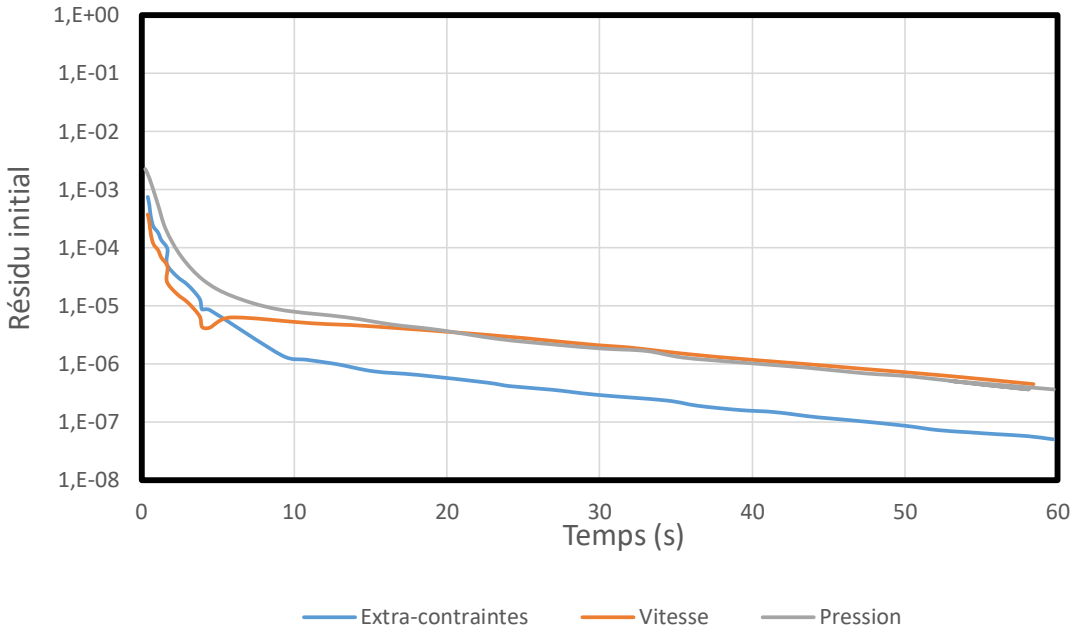

Figure 4.13 Évolution du résidu initial dans une conduite rectangulaire 3D en fonction du temps pour : la pression; la norme de la vitesse; la norme de Frobenius du tenseur des extra-contraintes.

Cependant, la Figure 4.13 n'indique rien concernant la qualité des résultats et il s'avère que le choix du type de maillage joue aussi un rôle très important. Ce résultat est illustré à la Figure 4.14.

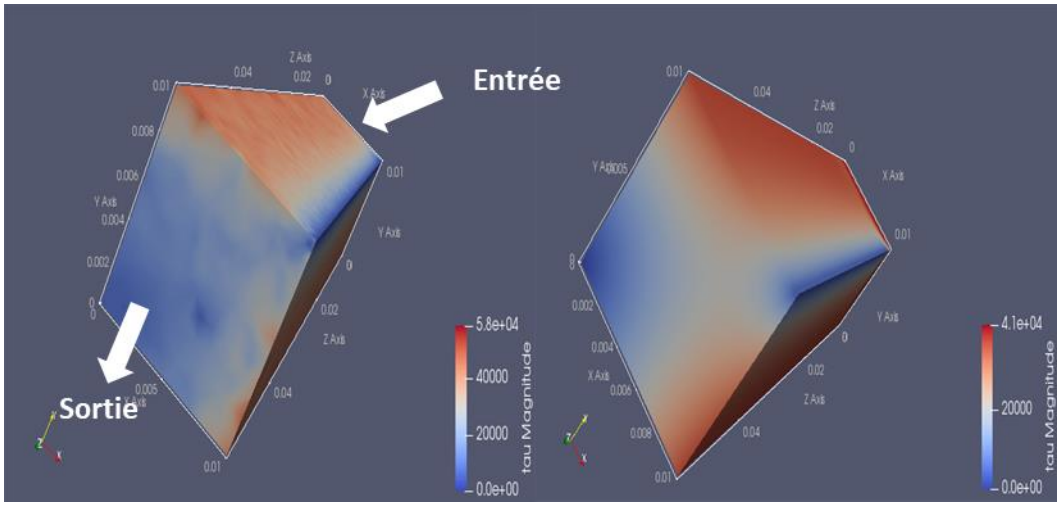

Figure 4.14 Magnitude de la contrainte dans une conduite rectangulaire pour un maillage non structuré (à gauche) et un maillage structuré (à droite).

Il apparait ainsi à la Figure 4.14 qu'un maillage non structuré donnera des résultats plus bruités qu'un maillage structuré. Cela signifie que l'outil de simulation utilisé est très sensible aux types de maillage. Un maillage structuré serait donc préférable à un maillage non structuré quand cela est possible. Dans le cas contraire, il sera toujours possible de produire des résultats; cependant ces résultats seront assez bruités ce qui rendra leur exploitation plus complexe. Ceci sera montré dans les sections suivantes.

4.3.3 Convergence dans un canal de répartition simple en 3 dimensions

Avant de simuler des géométries de profilés existants, il a été décidé de simuler l'écoulement dans une géométrie représentant un canal de répartition simplifiée au maximum ce qui permet de produire des feuilles d'une épaisseur arbitraire fixé à 1 cm. Ce choix a été fait afin d'étudier, d'abord, le profil de vitesse obtenue pour une simplification du profilé réel (qui sera présentée dans la dernière partie de cette section). La géométrie ainsi utilisée est celle présentée à la Figure 4.15.

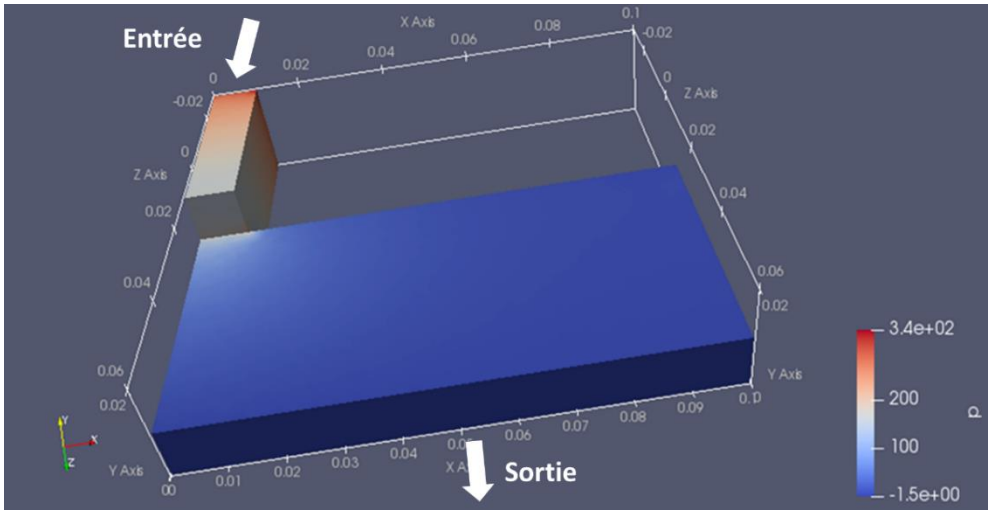

Figure 4.15 Géométrie d'un canal de répartition approximer par une succession de deux hexaèdres réguliers.

Sur la Figure 4.15 la pression d'entrée a été fixée à 289 kPa. Cette valeur a été choisie, car elle permet de reproduire un phénomène de non-uniformité de l'écoulement en sortie observable expérimentalement. Ce phénomène est illustré à la Figure 4.16, se caractérise par un excès de matière en sortie là où le profil de vitesse est le plus grand. Il est à noter que, comme précédemment, la résolution de la géométrie n'est réalisée que sur ¼ du domaine par l'utilisation d'axe de symétrie pour un modèle de White-Metzner.

La Figure 4.16 présente donc les champs de vitesse obtenus en sortie pour deux maillages non structurés, un grossier et un plus fin, ainsi que pour un maillage structuré de même longueur caractéristique que le maillage non structuré le plus fin. Dans tous les cas, il est possible d'observer que le champ de vitesse est plus grand au centre du profilé (x=0) ce qui est signe que le débit de matière est plus grand à ce niveau. Un bruit notable sur le maillage non structuré le plus fin peut aussi être observé à la Figure 4.16. Par ailleurs, dans le cas du maillage structuré de taille similaire, aucun bruit notable n'est apparent ce qui laisse suggérer que le bruit est dû au type de maillage employé. Une des causes éventuelles de ce bruit serait reliée à une erreur d'interpolation engendrée par la structure non uniforme du maillage. Toutefois, du fait de la forte hyperbolicité des équations, il se peut que le transfert d'information sur des volumes non alignés puisse causer des erreurs numériques supplémentaires. Ceci reste une hypothèse à vérifier.

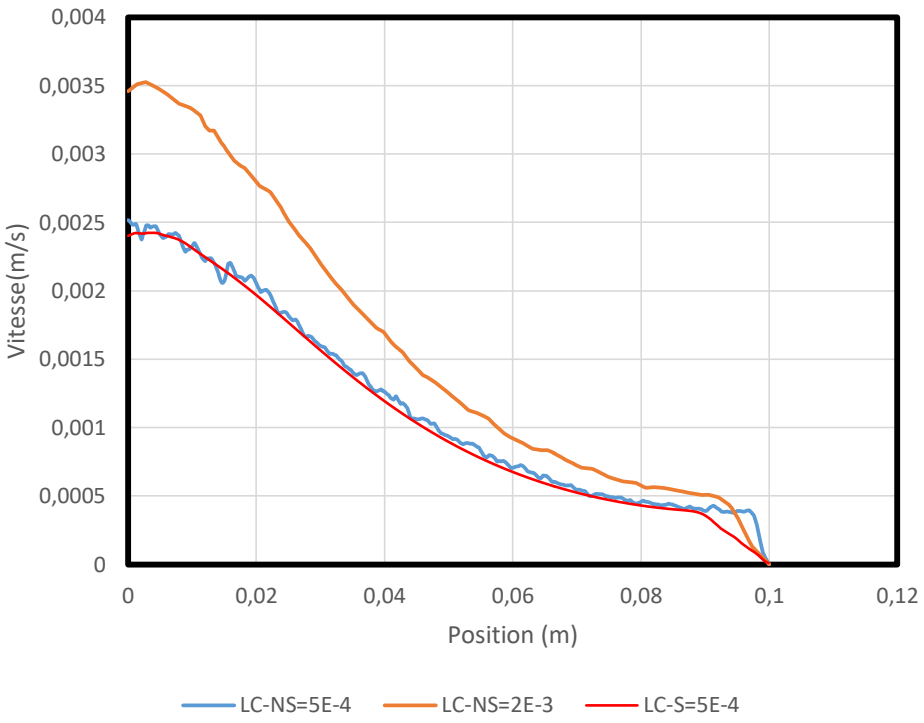

Figure 4.16 Profil de vitesse à y=0 et z=0.06 pour deux maillages non structurés de longueur caractéristique (LC) égale à 5.10^{-4} et 2.10^{-3} m, et un maillage structuré de longueur caractéristique égale à 5.10^{-4} m (NS=non structuré, S=structuré).

Étant donné qu'il n'existe pas vraiment de solution analytique pour cette géométrie et que le champ de vitesse est assez bruité dans le cas non structuré le plus fin, il a été décidé d'utiliser le procédé d'extrapolation de Richardson afin de trouver la valeur numérique de l'asymptote.

Pour réaliser ce procédé, il a été nécessaire de simuler l'écoulement pour différentes tailles de mailles afin d'obtenir à chaque fois des valeurs du champ de vitesse à y=0 et z=0.06. L'erreur utilisée dans le procédé d'extrapolation de Richardson a été calculée point par point selon la norme L2. La Figure 4.17 présente les erreurs de simulations en fonction de la longueur caractéristique des éléments et de la courbe de convergence obtenue à l'aide du procédé d'extrapolation de Richardson. Ainsi, grâce au procédé d'extrapolation de Richardson, il apparaît que l'ordre de convergence de la méthode des volumes finis employée pour résoudre ce problème est de 1.68. Cet

ordre se situe entre 1 et 2, ce qui est cohérent puisque que les discrétisations employées mélangent des schémas d'ordre 1 et 2.

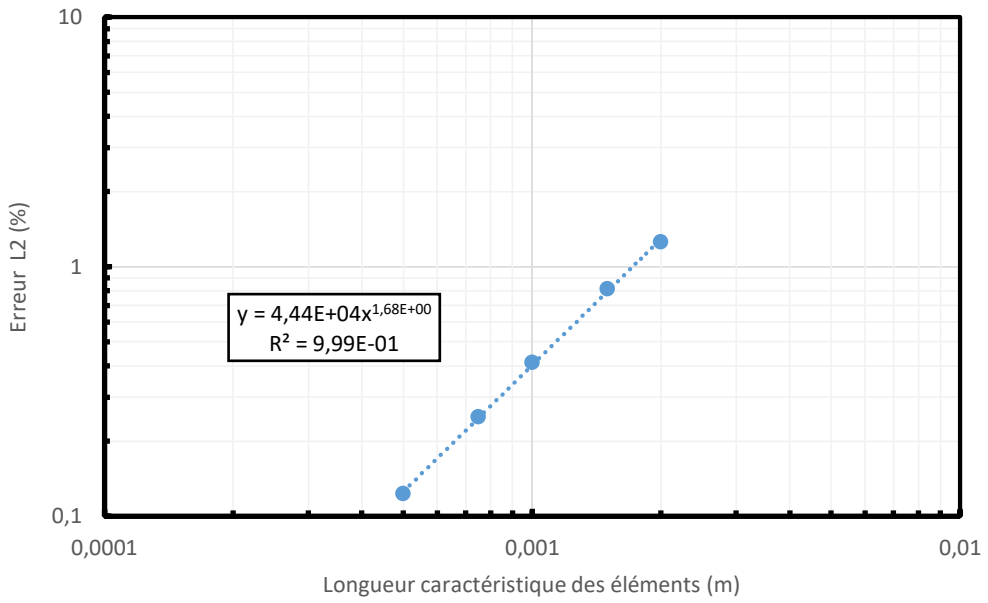

Figure 4.17 Erreur selon la norme L2 en fonction de la longueur caractéristique des éléments pour différente simulation.

Globalement, les résultats présentés dans cette section montrent qu'il est possible d'obtenir une convergence dans un profilé en 3 dimensions même avec un maillage non structuré. Toutefois, un maillage structuré reste préférable puisque que dans le cas d'un maillage non structuré, du bruit est observable même après raffinement. Il a, de plus, été possible de constater que dans un canal de répartition, un profil de vitesse non uniforme peut apparaître, ce qui cause un excès de matière dans une partie de la sortie du profilé. Il est maintenant temps de voir ce qui se passerait si une simulation était lancée sur un profilé proche de celui disponible en laboratoire.

4.3.4 Simulations dans une filière simplifiée et la filière actuelle

Considérant que la filière réel (présenté à l'annexe A) a été difficile à mailler correctement (ce qui sera vu un peu plus bas), des tests ont été lancés sur une version simplifiée ne faisant appel qu'à des formes géométriques simples. Cependant, même en simplifiant la géométrie de manière à ce qu'elle reste plus ou moins fidèle à la géométrie du véritable profilé, il a fallu utiliser un maillage

non structuré, car la génération d'un maillage structurée sur GMSH dans ce genre de géométrie est longue et complexe. Il faudra donc s'attendre à voir apparaître un bruit dans les simulations qui seront réalisées. De plus, à cause de l'incertitude sur les paramètres utilisés dans les modèles, il faudra prendre les données présentées ci-après avec beaucoup de précautions. Ces données pourraient ne pas représenter les valeurs physiques observables expérimentalement. Elles donneront, néanmoins, des prédictions de phénomènes physiques observables dans ce type de profilé.

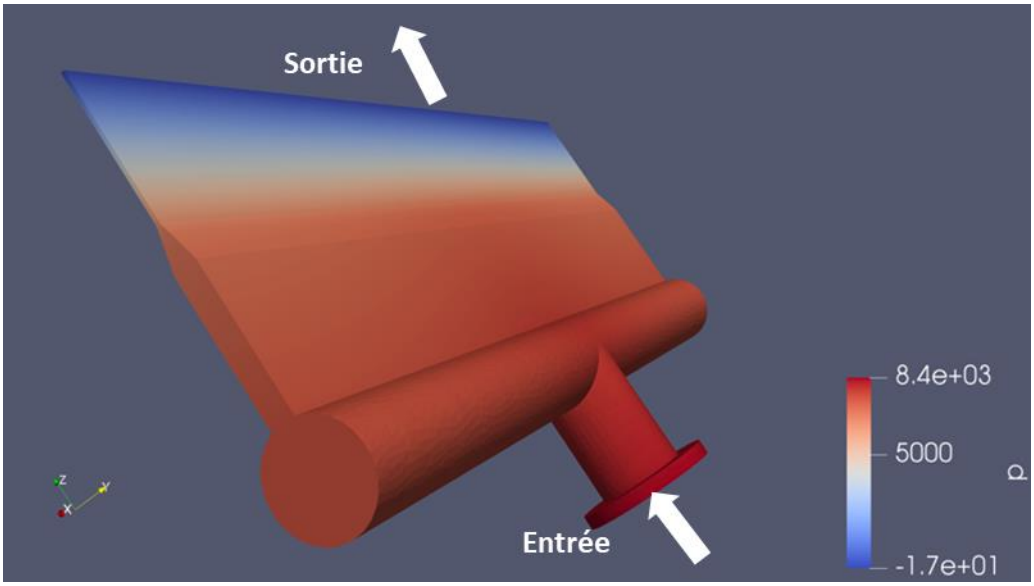

Figure 4.18 Géométrie simplifiée de profilé existant.

La Figure 4.18 présente le profilé simplifié utilisé pour effectuer les simulations du Celluloïd. Ce profilé est donc une simplification du profilé sur lequel les expérimentations ont été réalisées. Cette simplification a été faite, car les premières implémentations fidèles de la géométrie ne permettaient pas d'avoir des données valables. Ceci était dû au maillage généré par GMSH qui était très mal répartie dans la géométrie. Dans celle qui est représentée à l'annexe A, la génération du maillage construit des éléments fortement asymétriques avec une non-orthogonalité pouvant dépasser les 89°. Or, dans la littérature, il est précisé que ce genre de maillage converge très rarement, ce qui est exactement ce que l'on observe dans le cas présent [65]. Le seul moment où cette non-orthogonalité a baissé en dessous des 70° a été le moment où le nombre d'éléments a dépassé les 20 Millions. À raison de 50000 éléments par processeur, il en aurait donc fallu 400 tournant en parallèle pendant une semaine pour obtenir une seule simulation complète. Grâce à la

simplification de la géométrie comme présenté à la Figure 4.18, le nombre d'éléments nécessaires pour obtenir un résultat acceptable sera plus de l'ordre du million. Sur cette figure, le seul gros défaut est qu'avec 1.3 million d'éléments il n'y aura que 6 éléments sur la tranche transversale en sortie. Cela est dû à une contrainte forte qui est telle que le ratio épaisseur sur longueur du rectangle de sortie est très inférieur à 1. Ceci signifiant que si le nombre d'éléments sur cette longueur transverse devait être doublé, il faudrait multiplier par 8 le nombre d'éléments dans tout le rectangle. Or, sur les 1.3 million d'éléments, près de 1 million d'entre eux sont répartis dans ce rectangle de sortie. Une première approximation a donc été réalisée afin d'observer les tendances bien plus que les résultats. Ainsi, en appliquant un champ de vitesse de 0.01 m/s en entrée, il a été prédit par le modèle de White-Metzner qu'en sortie, le profil de vitesse ressemblerait à celui présenté à la Figure 4.18.

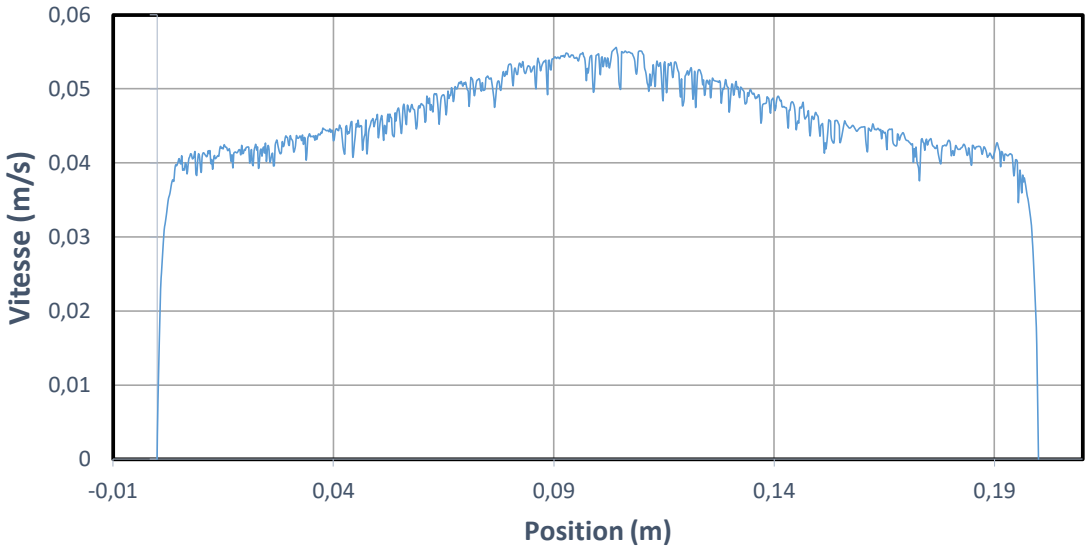

Figure 4.19 Champs de vitesse en sortie de profilé pour un maillage non structuré.

Sur cette courbe, il apparaît que le champ de vitesse est quasi plat partout sauf au centre. Étant donné qu'il n'a pas été possible d'avoir une solution analytique ou de raffiner le maillage (faute de temps et de ressources de calcul) pour utiliser le procédé d'extrapolation de Richardson, il est difficile vu le fort bruit de considérer ce résultat comme acceptable même si le résidu initial était de l'ordre de 10^{-5}. Au vu des simulations présentées à la section 4.3.2 et 4.3.3, ce fort bruit

provient très probablement du maillage non structuré. Il faudrait donc simuler une nouvelle fois avec un maillage structuré afin d'éliminer ce bruit ce qui n'a pas pu être fait faute de temps.

Cependant, dans la Section 4.3.3 le phénomène de non-uniformité du champ de vitesse a déjà pu être observé pour des géométries très simplifiées. De plus, ceci est cohérent avec ce qu'il est possible d'observer physiquement.

Expérimentalement, il a d'ailleurs été observé que le débit de matière sortant est plus grand au centre du profilé que sur les côtés. Puisque ce débit est directement relié aux champs de vitesse par une double intégration sur la surface orthogonale à ce vecteur, plus la vitesse sera grande, plus le débit sera élevé, ce qui est exactement ce qui est observé. D'un point de vue pratique, ce phénomène pourrait s'expliquer par un problème de distribution du liquide dans le profilé. En ce qui a trait à la pression, le profil obtenu dans le profilé est le suivant.

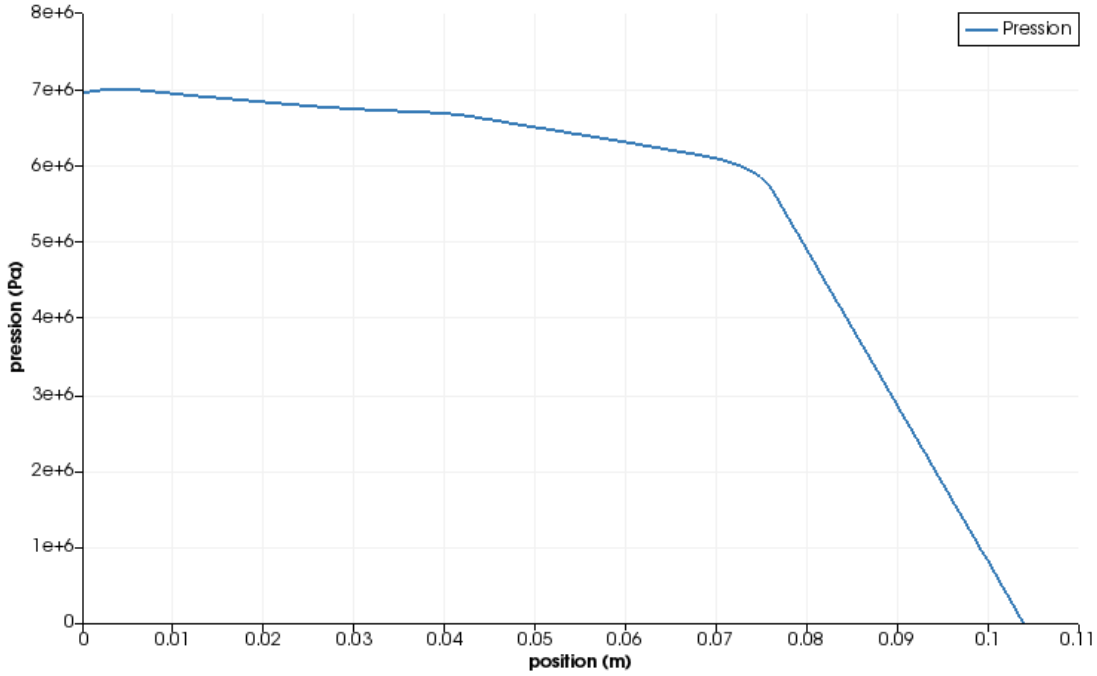

Figure 4.20 Champ de pression le long de la filière.

La courbe de pression présentée à la Figure 4.20 montre que, pour les paramètres entrés et une vitesse d'entrée uniforme de 0.01m/s, la perte de charge totale sera d'environ 7.6 MPa. Sur cette même courbe, il est possible de distinguer trois zones où la pression chute selon différentes pentes. Elles correspondent aux trois contractions qui ont lieu respectivement à 1,4 et 8 cm. En

rhéologie plus une contraction est forte plus la perte de charge qui lui est associée sera grande. Sur la courbe la contraction à 8 cm est une contraction 1:20 tandis que celle à 4 cm n'est que de 1:6. La courbe respecte donc bien cette prédiction rhéologique et ajoute un degré de confiance au modèle. La dernière chose à vérifier sera la différence de contrainte normale qui ne peut être prédite que pour des modèles viscoélastiques.

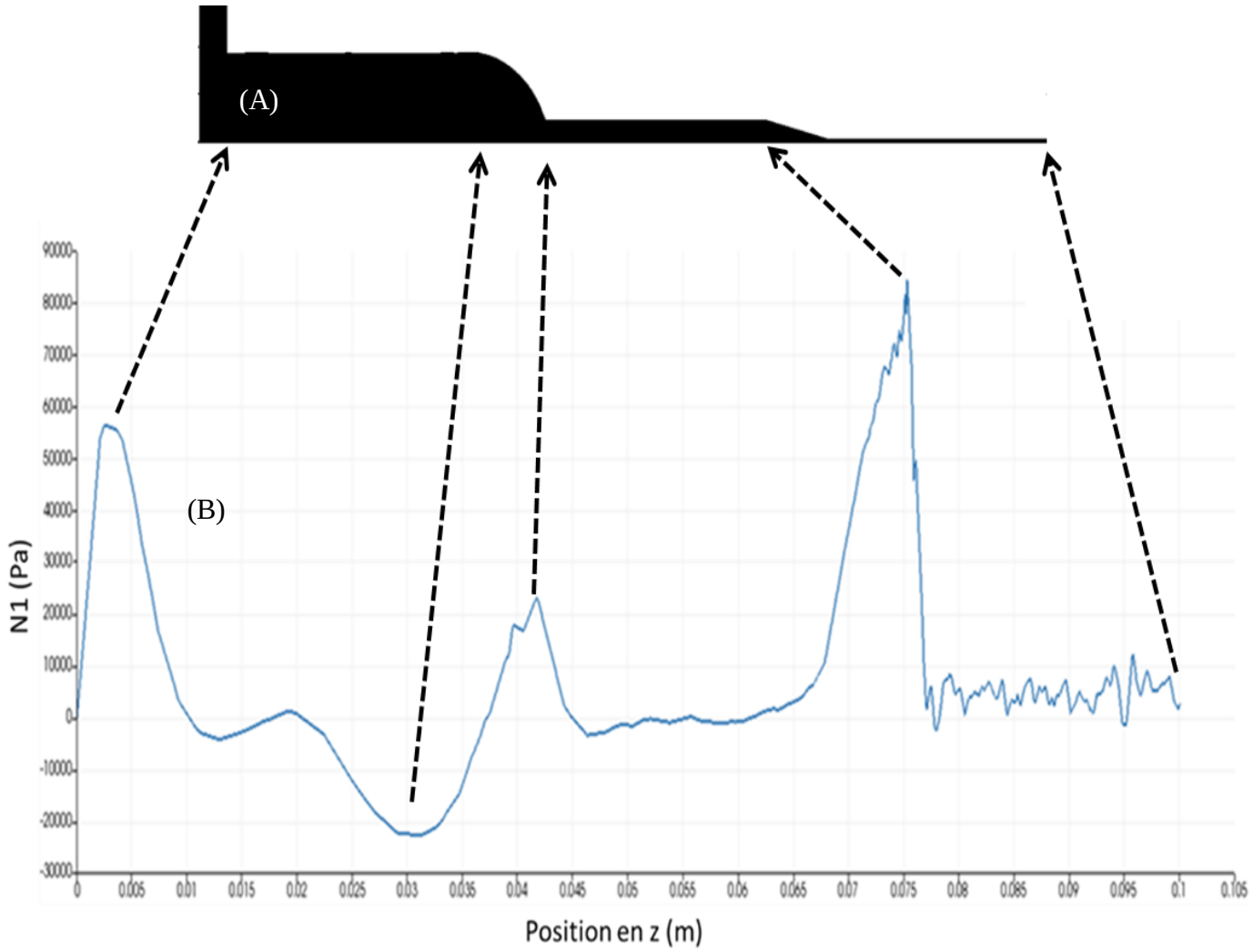

Figure 4.21 Évolution de la première différence de contraintes (B) le long du plan de coupe du profilé (A).

Sur la Figure 4.21 (B), la première différence de contrainte a été obtenue en traçant une ligne de coupe en x=0 et y=0. L'allure générale de la courbe s'explique par les différentes contractions qui ont lieu successivement au fur et à mesure que le fluide avance dans le profilé

(Figure 4.21 (A)). En effet, lorsque le fluide s'écoule les molécules polymériques sont contraintes à changer de conformation à chaque contraction dans la géométrie (présentée à la Figure 4.18). Cela engendre des pics de contrainte normale comme présentée à la Figure 4.21 (B) [31].Par exemple, la première contraction a lieu vers 0.003 m. Ceci devrait se caractériser par un pic dans cette région ce qui est bien ce qu'il est possible d'observer sur la Figure 4.21 (B). Les deux pics situés à 0.04 et 0.074 m sont suivis d'une ligne quasi constante, ce qui est significatif d'une région plate car les macromolécules ont eu le temps de se réarranger [31]. Pour ce qui est des oscillations se situant au-delà de 0.08 m, elles sont dues au faible nombre de mailles du maillage non structuré. Le seul point difficilement explicable vient de la région située entre 0.025 et 0.04 m puisque la courbe donne une différence de contrainte négative. Étant donné la forme bombée de la géométrie à cet endroit, l'hypothèse la plus probable serait que cette détente engendre une différence de contrainte négative [4].

Il est à noter que si le modèle avait été uniquement rhéofluidifiant, il aurait été impossible de prédire la moindre différence de contrainte normale significative. Dans le cas présenté à la Figure 4.21, cette contrainte normale monte jusqu'à 85 kPa. Globalement, cela représente un nombre de Weissenberg de 140. Pour donner une idée plus tangible de ce que cela représente précisons que : si la sortie était fixée à ce niveau, sachant qu'aux parois la contrainte en cisaillement vaut 65kpa, il est possible de dire par la loi de Tanner (Éq. (21)) que le gonflement serait de 16%. La valeur du gonflement en sortie est, toutefois, beaucoup plus faible et tourne autour des 13%.Il est permis de venir modifier le profil du champ de vitesse et le taux de gonflement en sortie de filière en modifiant la géométrie d'entrée ce qui viendrait affecter la répartition du liquide dans le profilé. Cela a été réalisé en essayant de reconstruire et paramétrer complètement la vraie géométrie sous GMSH. En procédant de cette manière, sans importer la géométrie d'un fichier STEP, il a pu être obtenu une géométrie très fidèle à la vraie géométrie présentée à l'annexe A. Dans cette dernière, (présentée à l'annexe G) le profil de vitesse obtenu pour un champ de vitesse d'entrée de 0.6 mm/s sera le suivant.

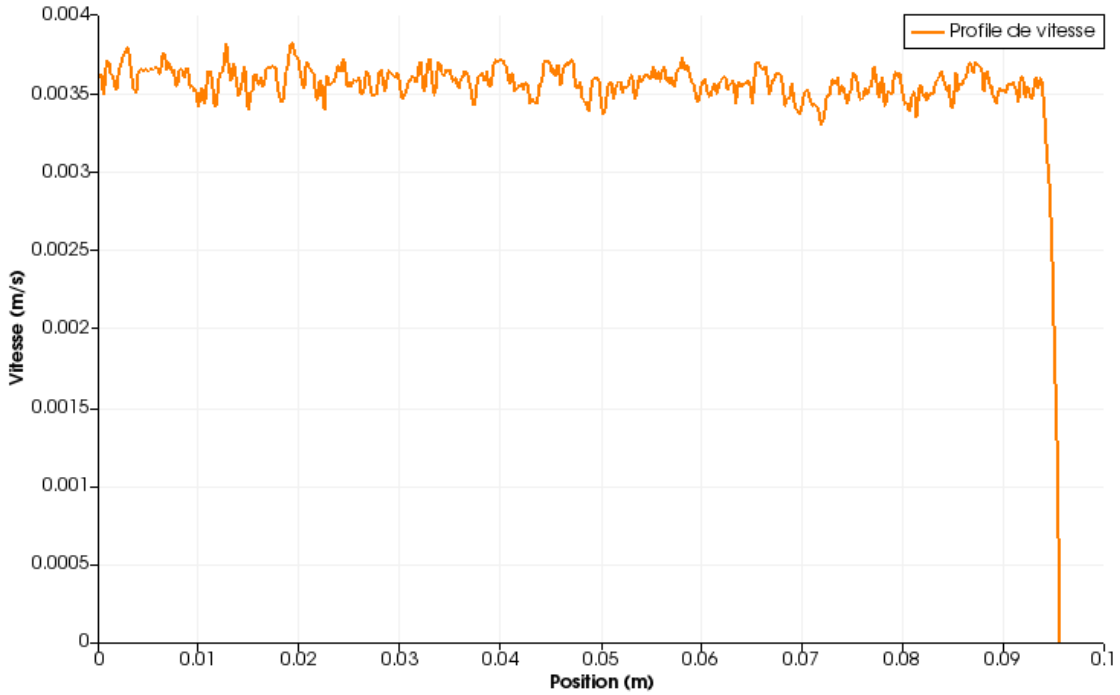

Figure 4.22 Profil de vitesse en sortie pour la géométrie réelle.

Sur la Figure 4.23, le profil de vitesse présentée est pris à la moitié de la géométrie. Le bruit sur la courbe vient du fait qu'un maillage non structuré a été utilisé afin de gagner du temps. Il apparait ainsi, sur cette figure, que le profil est quasi plat pour les conditions imposées. Ceci signifierait, d'un point de vue expérimental, qu'en sortie la répartition de la quantité de matière est uniforme pour une vitesse d'entrée inférieure à 1 mm/s. Toutefois, cela ne serait vrai que si le profil de contrainte normale est uniforme, ce qui est difficile à prédire étant donné que le maillage utilisé reste assez grossier. Il est important de signaler que, n'ayant pas de données expérimentales concernant les champs de pressions, les débits et les gonflements en sortie de filière, il est impossible de confronter les prédictions à la réalité. Pour conclure ce chapitre, il est nécessaire de signaler que tous les résultats présentés sont plutôt des preuves de concept. Il est donc envisageable de prédire quasiment tous les phénomènes physiques observables. Il faudrait, cependant, calibrer les modèles à l'aide de valeurs expérimentales et vérifier la robustesse des prédictions évoquées précédemment.

CHAPITRE 5 DISCUSSION GÉNÉRALE

Après cette présentation des résultats de simulation obtenue sous Foam-Extend et Comsol, il est maintenant temps d'aborder les limites de ces simulations. Il sera donc d'abord discuté de l'utilisation de la version 5.4 du logiciel Comsol dans le cas des écoulements viscoélastiques et des limitations que cela engendre. Ensuite, il sera discuté de l'intérêt du logiciel Foam-Extend dans le cas des écoulements viscoélastiques et de la manière dont il serait possible de l'améliorer. Pour finir, certaines hypothèses seront discutées afin de voir quel pourrait être leur impact sur les différentes simulations.

5.1 Utilisation de Comsol et des éléments finis en viscoélastique

Tel que mentionnée à plusieurs reprises dans ce mémoire, la version 5.4 de Comsol reste un outil limité pour étudier des fluides viscoélastiques. Contrairement à ANSYS, en élément fini, il n'y a pas de modèle viscoélastique préexistant. Bien que Comsol permette d'implémenter tous les modèles, il n'est pas forcément possible de les stabiliser. En élément fini, les techniques d'implantation et de stabilisation classiques ne permettent pas de simuler à n'importe quel nombre de Weissenberg. Très souvent, elles n'arrivent même pas à dépasser 1. De façon générale, la seule manière efficace d'implanter un modèle viscoélastique, plus ou moins stable, en élément fini, est d'utiliser soit une technique Galerkin discontinue ou une méthode log-tensor. Or Comsol ne permet pas réellement d'utiliser la technique GD. Il devient alors obligatoire de se rabattre sur une méthode log-tensor. Des travaux impliquant la méthode log-tenson en 3 dimensions existent [103], ils n'ont cependant jamais été implantés dans Comsol en 3 dimensions vu les limitations du logiciel. Ceci empêche donc Comsol de posséder une quelconque utilité pour des cas réels non symétriques.

Il serait difficile d'accélérer les simulations en changeant de solveur puisqu'il n'est pas possible d'importer un autre solveur dans Comsol. Même dans le cas où la méthode GD était implantée sur Comsol 5.4, les solveurs qui existent sous Comsol 5.4 ne permettent pas une combinaison solveur/préconditionneur satisfaisante pour accélérer la résolution. Par exemple, de tous les solveurs de Krylov existants, le seul ayant été implantée sous Comsol 5.4 a été GMRES. Il serait préférable, dans le cas des fluides viscoélastiques, d'utiliser un solveur Bi-gradient

conjugué stabilisé (BiCGStab), car il est plus rapide que GMRES pour un même préconditionneur ILU0 (décomposition incomplète LU0) [104].

D'un point de vue plus pragmatique, Comsol reste un outil intéressant pour des applications académiques. Il aide à comprendre le fonctionnement des méthodes de stabilisation, mais ne permet pas d'utiliser les plus sophistiquées. Le problème des fluides, tel que le celluloïd en solution, est qu'il nécessite d'utiliser des équations fortement hyperbolique. Or, dans ce genre de cas, l'une des méthodes les plus adaptées reste la méthode GD [31]. Comsol 5.4 n'est donc pas le bon outil pour ce genre d'application. Pour finir, la méthode des éléments finis reste une technique fondamentale mal adaptée au problème du viscoélastique. Le nombre d'articles publiés dans le domaine évolue en dents de scie. D'une évolution à l'autre de la méthode, il peut arriver que des dizaines de publications paraissent une année, puis qu'une seule se présente l'année suivante. Le graphique suivant montrant d'ailleurs cette évolution.

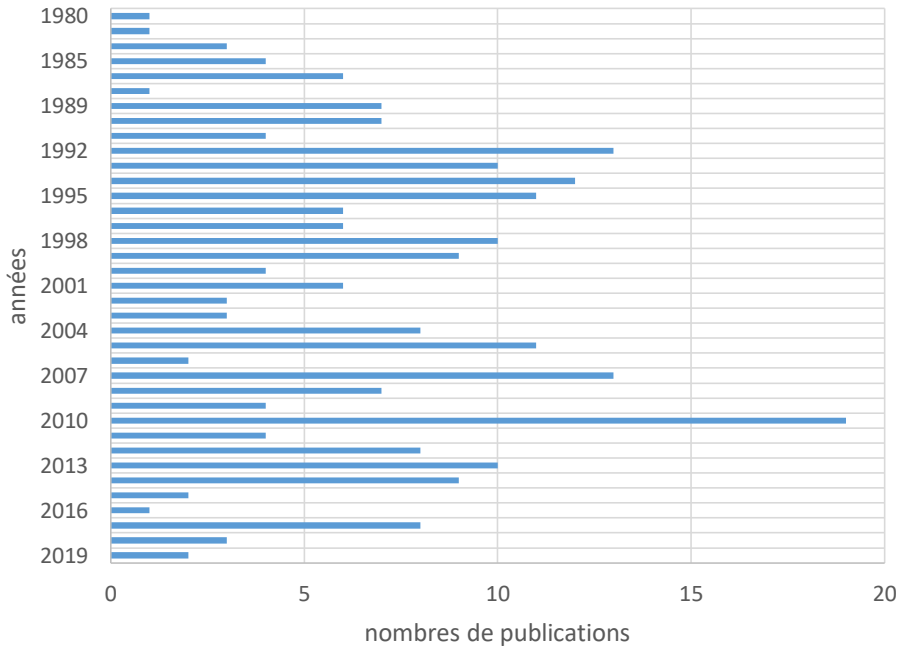

Figure 5.1 Nombre de publications dans le domaine du viscoélastique par FEM sur compendex.

L'engouement dans ce domaine est excessivement dépendant de la dernière méthode à la mode. Il faudra attendre et voir si de nouvelles méthodes dans le domaine verront le jour et si ces nouvelles techniques seront compatibles avec Comsol.

5.2 Valorisation de la méthode des volumes finis en viscoélastique

La méthode des volumes finis est une méthode jeune en comparaison à celle des éléments finis. Elle a été créée dans les années 80 et n'a connu son essor que dans les années 2000. Pourtant, sa structure discrète lui confère un avantage colossal par rapport aux éléments finis dès qu'il est question d'étudier des problèmes à dominante convective [92].

Cette technique a été construite pour ce genre de problème et cela se voit dans les résultats obtenus grâce à Foam-Extend. Là où avec Comsol il était ardu d'atteindre un nombre de Weissenberg de 1, le nombre de Weissenberg peut, grâce à Foam-Extend, facilement dépasser les 1000 [55]. Son vrai défaut est qu'il est peu courant de la voir implanter dans des logiciels commerciaux. Par surcroît, l'implémentation réalisée sous Foam-Extend reste très difficile d'accès à des personnes ayant peu de connaissance en informatique et en mathématiques. Comsol, en comparaison, possède une interface graphique qui aide énormément les non-initiés à la simulation.

En ce qui concerne les simulations réalisées, elles ont nécessité un temps d'adaptation au logiciel. Le point le plus critique est la génération du maillage. En effet, il a été démontré dans la Section 4.3 qu'un maillage structuré était préférable à un maillage non structuré pour avoir des résultats moins bruités entre autres.

Au début de cette étude, le constructeur de maillage blockMesh a été utilisé. Ce choix a ralenti considérablement le projet puisque ce constructeur était beaucoup trop rudimentaire. Une personne désirant travailler dans ce domaine ne devrait pas utiliser ce logiciel et devrait se tourner directement vers GMSH. Il existe aussi une autre application appelée snapyHexMesh, mais elle ne vaut pas GMSH [64]. Le logiciel vient avec une interface graphique et permet de générer de très bons maillages. Cependant, si une géométrie est importée en step sur GMSH pour être maillée, il se peut que le maillage obtenu ne soit pas du tout utilisable en simulation. Cela a été le cas pour la véritable géométrie qui a dû être simplifiée afin de faire converger les simulations. Il est d'ailleurs recommandé de créer la géométrie directement dans GMSH afin de faciliter la génération du

maillage. Évidemment, GMSH n'est pas un constructeur de maillages parfait et certains constructeurs de maillage commerciaux pourraient mieux convenir. A ce sujet, il semble que le logiciel de maillage commercial le plus intéressant soit le logiciel PointWise, mais cela reste à vérifier.

Pour ce qui est de la partie modèle implantée dans Foam-Extend, le seul des 3 ayant donné des résultats satisfaisants a été le modèle de White Metzner. Comme précisé dans la revue de la littérature, il existe 10 modèles implantés sous Foam-Extend. Il serait donc intéressant de tester les autres modes et de voir les prédictions qu'il en ressort.

En outre, Foam-Extend permet d'utiliser du multimode, ce qui est très utile pour raffiner les résultats. Le multimode vient, cependant, avec un défaut de taille qui est l'over fitting. Pour expliquer cela, il suffit de reprendre le modèle de White Metzner. Dans sa forme simple, il possède 6 paramètres si une loi de Carreau est considérée. Lors de l'utilisation du multimode, ce nombre de paramètres passe de 6 à 6*n où n représente le nombre de modes. Autant dire qu'à partir de 4 modes le problème de l'éléphant de Neumann pointe le bout de sa trompe. L'utilisation du multimode ne devrait donc se faire que si le nombre de points expérimentaux dépasse de très loin le nombre de paramètres. Pour finir, puisque les résultats d'erreur sur les cas tests en 2D et en 3D (en simple mode) sont tous proches de 0.5%, Foam-Extend peut être retenu comme l'outil le plus adapté pour ce genre de simulation.

5.3 Résultats expérimentaux et prédictions par simulation

Mis à part les résultats obtenus concernant la viscosité, il reste un abîme colossal à traverser. Les prédictions faites à l'aide du modèle restent beaucoup plus nombreuses que les données expérimentales comparables. Sur ce point, cette étude peut être vue plus comme une preuve de concept que comme une réelle prédiction comparable à ce qui est physiquement observable. Bien que les prédictions de la courbe de viscosité cadrent avec les données expérimentales, il est impossible de dire si le champ de pression prédictible sera celui observé. Il est d'ailleurs impératif de noter que les données de temps de relaxation n'ont pas été calibrées. Il faudrait des données de pression/débit pour justement venir calibrer ce paramètre.

De plus, la masse volumique du celluloïd a été posée à l'aide de ce qui a été trouvé dans la littérature [102]. Il faudrait donc faire des mesures de masse volumique pour venir le confirmer. Ce n'est qu'à ce prix que cette hypothèse pourra être vérifiée. Une fois toutes ces calibrations faites, le modèle pourra ensuite être comparé aux données d'épaisseur des feuilles de celluloïd obtenues. Dans la partie résultat, il a été montré que l'épaisseur du film varie à cause de la distribution. Si la simulation numérique était exacte, alors cela reviendrait à générer un excès de matière dans certaines zones. Cet excès de matière se traduisant par une variation de l'épaisseur de la feuille produite, il suffira de simplement mesurer cette variation et de la comparer à celle obtenue pour différents champs de vitesse. Pour aller plus loin, il faudrait aussi augmenter le nombre de mailles en sortie afin d'obtenir des résultats plus précis. Ceux-ci permettraient de prédire un gonflement en sortie de filière qui pourrait être comparé à ce qui est obtenu expérimentalement.

Il est maintenant temps d'évaluer l'hypothèse d'un écoulement isotherme. Depuis le début, le fluide est considéré à température constante. Dans des cas comme le HDPE, il s'avère que la dissipation visqueuse fait augmenter la température du fluide de plusieurs degrés [88]. Dans le cas du celluloïd, il est possible de calculer un ordre de grandeur du terme de dissipation visqueuse, et pour ce faire un écoulement de Poiseuille dans une fente en 2 dimensions (plan xz par exemple) est considéré, ainsi que les hypothèses suivantes :

1. le fluide est newtonien incompressible
2. l'écoulement est en régime rampant (Re<<1)
3. il n'y a pas d'effet de bord
4. la viscosité est constante (fixée à 10 kPa.s)
5. l'écoulement est en régime permanent établi.

Tout ceci permet de simplifier le terme de dissipation visqueuse de l'Éq. (19) qui devient :

$$\boldsymbol{\tau}:\boldsymbol{\nabla}\vec{v} = \mu\left(\frac{\partial v_z}{\partial x}\right)^2 \tag{50}$$

Avec pour un écoulement de Poiseuille dans une fente[8] :

$$\frac{\partial v_z}{\partial x} = v_{zmax}(\frac{4}{e} - \frac{8x}{e^2}) \tag{51}$$

Si maintenant la vitesse maximale de l'écoulement est de 6 mm/s (ce qui est la valeur observée à la Figure 4.20) alors, dans une fente où les dimensions sont semblables à l'hexaèdre de sortie représentée à la Figure 4.18[9], la dissipation visqueuse générerait 157 kW/m^3 (ce qui représenterait un nombre de Brinkman[10] de l'ordre de la centaine), ce qui n'est absolument pas négligeable. Il faudrait donc coupler toutes les équations précédentes à l'équation de la chaleur, ce qui n'est pas, pour le moment, une chose triviale à faire sous Foam-Extend.

Théoriquement, il faudrait aussi utiliser un facteur de glissement pour tenir compte de l'effet des variations de température sur les différents paramètres. D'un point de vue pragmatique, cela revient à prévoir de refaire toutes les expériences et simulations précédentes à différentes températures. Dans le cadre de cette étude, le problème a été contourné puisqu'à basse température les contraintes normales et de cisaillement sont les plus fortes.

Les données présentées sont une borne supérieure théoriquement infranchissable par un fluide correspondant aux prédictions du modèle. Cette manière de procéder est donc assez valable s'il fallait se cantonner à étudier des fluides thermiquement stables. Le celluloïd est potentiellement un explosif de grade militaire pouvant détruire l'extrudeuse à la moindre variation de température trop prononcée. Conséquemment, il semble impératif d'ajouter l'équation de la chaleur aux précédentes équations.

---

[8] En considérant qu'à x=0 et x=e la vitesse est nulle, et que e représente l'épaisseur de la fente [6].

[9] C.-à-d. épaisseur=0.35mm, longueur=20mm et largueur=10cm.

[10] Le nombre de Brinkman est défini comme le rapport entre l'énergie produite par les forces visqueuses et l'énergie transféré par conduction.

CHAPITRE 6 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

À la lumière de ce qui précède, ce projet a donc permis de simuler un écoulement de celluloïd dans un profilé. Il en résulte que le logiciel Comsol n'est pas actuellement utilisable pour des simulations viscoélastiques en 3 dimensions. Le seul logiciel ayant donné des résultats intéressants est Foam-Extend. En conséquence, il devrait être le logiciel à utiliser par toute personne désirant simuler ce genre d'écoulement gratuitement. En outre, il a pu être prédit, grâce à ce logiciel, que l'écoulement du celluloïd dans un profilé, notamment, celui présenté à la Figure 4.14, engendrerait un profil de vitesse en sortie non homogène.

Par ailleurs, ce profil de vitesse permet de prédire que les feuilles de celluloïd produites ne seront pas uniformes. Selon ce qui a pu être calculé, leur centre devrait être plus chargé en polymère que le reste de la feuille. De fait, certaines observations expérimentales semblent ainsi corroborer le modèle. Cependant, ces prédictions restent purement qualitatives. Pour s'assurer de leur validité, il faudrait dans un premier temps calibrer le modèle à l'aide d'autres données expérimentales, et dans un second temps, confirmer les prédictions à l'aide d'autres données expérimentales. Cette simulation n'est, bien entendu, qu'un premier pas vers d'autres évolutions.

De surcroît, pour étoffer le simulateur, il faudrait coupler ce dernier avec un module thermique qui prendrait en compte les variations de température induites par la dissipation visqueuse. Ce paramètre reste un point critique, car, dans le cas du celluloïd, une variation trop grande de température pourrait engendrer une explosion. Un couplage écoulement/température serait donc nécessaire pour s'assurer de la stabilité du procédé.

Cela n'est, toutefois, pas suffisant puisque, même en ayant un modèle calibré à tous les niveaux (thermique ou viscoélastique), il reste l'équation de Tanner qui pose problème. Cette équation a été construite à partir d'une quantité non négligeable d'hypothèses. Elle permet certes de donner un bon ordre de grandeur des valeurs que peut prendre le gonflement. Par contre, elle ne pourra pas prédire avec exactitude ce que peut valoir réellement le gonflement en tout point.

Par conséquent, pour obtenir des valeurs précises, il faudrait coupler le modèle fonctionnel à une technique de simulation en surface libre. C'est un exercice bien difficile impliquant une grande connaissance mathématique des techniques à maillage mobile. Heureusement, de nombreuses équipes se sont penchées sur ce problème et il en est ressorti plusieurs techniques

viables. Celle déjà implantée sous Foam-Extend se nomme « Volume of fluid » et permet de prédire avec précision l'évolution du gonflement en sortie de filaire.

Pour conclure, il est possible de constater que, par sa complexité, la simulation d'un écoulement de celluloïd reste un exercice laborieux. Il est donc assez difficile de trouver des outils de simulation d'écoulement polymérique. Pourtant au cours de cette décennie, de nombreux chercheurs ont commencé à créer des codes en libre accès permettant de simuler ce genre d'écoulement. C'est donc un pas qui a été fait dans la bonne direction, mais ce pas reste insuffisant. En effet, la raison majeure découle du fait que la plupart des industriels qui pourraient être intéressés n'ont pas forcément la formation nécessaire pour utiliser ce genre d'outil.

Tel que cela a déjà été montré, les équations régissant l'écoulement d'un fluide viscoélastique sont à la fois complexes et variées. Une personne non initiée aurait donc beaucoup de mal à savoir par où commencer. La plupart du temps, si une personne non experte désire simuler ce genre d'écoulement, elle se tournera vers un logiciel avec une documentation fournie tel que PolyFlow. Ce genre de logiciel dit «facile à utiliser» permettra à son utilisateur de manipuler des fluides non newtoniens sans comprendre les mécanismes en arrière. Pourtant, des solutions telles que Foam-Extend possèdent de nombreux avantages sur ces logiciels commerciaux. Il faudra donc attendre et voir si ce logiciel permettra de créer un nouvel engouement pour ce domaine.

RÉFÉRENCES

[1] Sreekumar Pisharath, H. G. (26 mars 2012). *Energetic Polymers.* weinheim, germany: WILEY CH.

[2] Office of the Federal Register US. (2012). *Code of Federal Regulations, Title 49, Transportation, PT. 100-177, Revised as of October 1, 2012.* Government Printing Office.

[3] Q M P Nguyen, X. C. (2011). Effects of polymer melt compressibility on mold filling in micro-injection molding. *Journal of Micromechanics and Microengineering*.

[4] Jean-François AGASSANT, P. A.-P. (2014). *Mise en forme des polymères (4e éd.) : Approche thermomécanique de la plasturgie*. lavoisier.

[5] Institut de mathématiques Clay. (2000, june). *Navier–Stokes Equation*. Récupéré sur claymath: http://www.claymath.org/millennium-problems/navier%E2%80%93stokes-equation

[6] Bird, R. B. (2006). *Transport Phenomena.* new york: john willey &sons.

[7] Q M P Nguyen, X. C. (2011, aout 18). Effects of polymer melt compressibility on mold filling in micro-injection molding. *Journal of Micromechanics and Microengineering*.

[8] Oldroyd, J. G. (1950). On the formulation of rheological equations of state. *roceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 523-541.

[9] Shai Rahimi, A. P. (2007). On Shear Rheology of Gel Propellants. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 165-174.

[10] Morrison, F. A. (2001). *Understanding Rheology.* Oxford University Press.

[11] Lindsley, C. H. (1953). Intrinsic viscosity of nitrocellulose. *Industrial & Engineering Chemistry*, 2491-2497.

[12] Milner, S. T. (1998). Reptation and contour-length fluctuations in melts of linear polymers. *Physical Review Letters*, 725.

[13] J.L. White. (1991). *Twin Screw Extrusion: Technology and Principles.* New York: Hanser Publishers.

[14] Suchy Ivana. (1998). *Handbook of Die Design.* McGraw-HIll.

[15] Alves, M. A. (2003). Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 45-75.

[16] Martin Sentmanat, M. S. (2004). Mechanism of gross melt fracture elimination in the extrusion of polyethylenes in the presence of boron nitride. *Rheol Acta*, 624-633.

[17]Tanner. (1970). A theory of die-swell. *journal of polymer science part B*, 2067-2078.

[18] Whipple, B. A. (1978). Velocity distributions in die swell. *AIChE Journal*, 664-671.

[19] Duwig, L. B. (1999, 11 08). *Delayed die swell*. Récupéré sur Fluid Mechanics for graduate students Non-Newtonian fluid mechanics: https://www.mech.kth.se/~luca/html_lib/dieswell.html

[20] Soury, E. B. (2013). An experimental investigation on surface quality and water absorption of extruded wood–plastic composite. *Journal of Thermoplastic Composite Materials*, 680-698.

[21] Drda, P. P. (1995). Stick-slip transition at polymer melt/solid interfaces. *Physical review letters*, 2698.

[22] Goutille, Y. M. (2003). olecular structure and gross melt fracture triggering. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 175-198.

[23] Elvan Birinci, H. G. (2006). Rheological Characterization of Nitrocellulose Gels. *Journal of Energetic Materials*, 247-269. Récupéré sur http://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/07370650600791262?needAccess=true

[24] Pourmortazavi, S. M.-N. (2009). Effect of nitrate content on thermal decomposition of nitrocellulose. *Journal of hazardous materials*, 1141-1144.

[25] M Moniruzzaman. (20, mai 2010). Effect of Crystallinity on Ageing behaviour of Nitrocellulose. Cranfield, Department of Applied Science, Security and Resilience,, United Kingdom.

[26] R. Byron Bird, C. F. (1987). *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 1: Fluid Mechanics, 2nd Edition.* WILEY.

[27]univar. (2012, aout 20). *FICHE SIGNALÉTIQUE :LA0006 Nitrocellulose Wet With Isopropyl*. Récupéré sur univar canada: http://msds.univarcanada.com/private/document.aspx?prd=LA0006~~PDF~~MTR~~ANSI~~CF~~2012-08-20%2014%3A34%3A51~~NITROCELLULOSE%20WET%20WITH%20ISOPROPYL~~&__VIEWSTATEGENERATOR=D6323F43&subformat=d__ANSI&language=d__CF&productID_option=d__~value~&productName_

[28]Davis, T. L. (1943). The Chemistry of Powder and Explosives. Volume II (Davis, Tenney L.). *Journal of Chemical Education*, 414.

[29] RC .Warren. (1990). basic rheology and its application to nitrocellulose propellant. *WEAPONS SYSTEMS RESEARCH LAB ADELAIDE* .

[30] R. E. Carter, R. C. (1987). Extrusion Stresses, Die Swell, and Viscous Heating Effects in Double-Base Propellants. *Journal of Rheology*, pp. 151-173.

[31] R G OWENS, T. N. (2002). *computational Rheology*. londre: imperial college Press.

[32] André Fortin, A. G. (2011). *Les éléments finis :de la théorie a la pratique.* Récupéré sur GIREF: http://www.giref.ulaval.ca/~afortin/cours_elements_finis/documents/notes_elements_finis.pdf

[33] Thomas J. Craven, J. M. (2006). *Stabilised Finite Element Modelling of Oldroyd-B Viscoelastic Flows.* Récupéré sur researchgate: https://www.researchgate.net/publication/267946264_Stabilised_Finite_Element_Modelling_of_Oldroyd-B_Viscoelastic_Flows

[34] Peter Moczo. (2014). Finite-element method. Dans P. Moczo, *The Finite-Difference Modelling of Earthquake Motions* (pp. 263-284). Cambridge University Press.

[35] Fortin, A. G. (2000). On the discrete EVSS method. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 121-139.

[36] Brooks, A. N. (1982). Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 19.

[37] Finlayson, B. A. (2006). *Using Comsol Multiphysics to Model Viscoelastic Fluid Flow.* Récupéré sur whashington faculty: http://faculty.washington.edu/finlayso/comsol_polymer.pdf

[38] Fattal, R. &. (2005). Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation. 126. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics,*, 23-37.

[39] Sun, J. S. (1999). Finite element method for viscoelastic flows based on the discrete adaptive viscoelastic stress splitting and the discontinuous Galerkin method: DAVSS-G/DG. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 281-307.

[40] Wei Cao, S. H. (2016). Three-Dimensional Viscoelastic Simulation for Injection/Compression Molding Based on Arbitrary Lagrangian Eulerian Description. *J. Comput. Nonlinear Dynam V11*, 367-375.

[41] Johana Pinilla, C.-H. B. (2016). ront-tracking by the level-set and the volume penalizationmethods in a two-phase microfluidic network. *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS*, 23-52.

[42] Hubbard, M. (2002). *Finite Volume Schemes: A Tutorial*. Récupéré sur University of Leeds: http://www.comp.leeds.ac.uk/meh/Talks/FVTutorial.pdf

[43] The Visual Room. (31, janvier 2019). *EXAMPLES OF THE FINITE VOLUME METHOD WITH NUMERICAL METHODS*. Récupéré sur The Visual Room: http://www.thevisualroom.com/finite_volume_method_6.html

[44] Moukalled, F. M. (2015). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics.* suisse: Springer International Publishing.

[45] Wapperom, P. &. (1998). A second-order hybrid finite-element/volume method for viscoelastic flows. . *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 405-431.

[46] Ascher, U. M. (1995). Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 797-823.

[47] A A, M. (2011). *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes.* Berlin: Springer Science & Business Media,.

[48] Malaspinas, O. F. (2010). Lattice Boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1637-1653.

[49] Konaganti, V. K. (2015). Extrudate swell of a high-density polyethylene melt: II. Modeling using integral and differential constitutive equations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 94-105.

[50]COMSOL. (2012, mai). *COMSOL multyphisics user guide.* Récupéré sur COMSOL: http://nf.nci.org.au/facilities/software/COMSOL/4.3/doc/pdf/mph/COMSOLMultiphysicsUsersGuide.pdf

[51]Kwon, Y. (445-453). Melt fracture modeled as 2D elastic flow instability. *Rheologica Acta*, 2015.

[52] OpenFoam. (2019, 09). *The open source CFD toolbox*. Récupéré sur openfoam: https://www.openfoam.com

[53] Jovani L.Favero, A. R. (2009). Viscoelastic Flow Simulation: Development of a Methodology of Analysis Using the Software OpenFOAM and Differential Constitutive Equations. *Computer Aided Chemical Engineering*, 915-920. Récupéré sur Computer Aided Chemical Engineering.

[54] Greenshields, C. (2015, mars 13). *OpenFOAM Linux Guide*. Récupéré sur CFD direct: https://cfd.direct/openfoam/linux-guide/

[55] A. Abid (Al-Baldawi), O. W. (2012). Some New Aspects of the Invariants of the Rate of Deformation Tensor and their Application in Viscoelastic Polymer Melts. *Technische Mechanik. Scientific Journal for Fundamentals and Applications of Engineering Mechanics*, 667-683.

[56] Guénette, R. &. (1995). A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 27-52.

[57] Cruz, D. O. (2005). Analytical solutions for fully developed laminar flow of some viscoelastic liquids with a Newtonian solvent contribution. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 28-35.

[58] Beris, A. N. (1992). Spectral calculations of viscoelastic flows: evaluation of the Giesekus constitutive equation in model flow problems. . *Journal of non-newtonian fluid mechanics,*, 197-228.

[59] Souvaliotis, A. &. (1992). An extended White–Metzner viscoelastic fluid model based on an internal structural parameter. *Journal of Rheology*, 241-271.

[60] Wang, J. S. (1995). on the viscosity-temperature behavior of polymer melts. *Rheologica acta*, 496-503.

[61] Park, S. J. (1999). On the use of the open boundary condition method in the numerical simulation of nonisothermal viscoelastic flow. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 197-214.

[62] Mayer, J. K. (2010). Drawing an elephant with four complex parameters. *American Journal of Physics*, 648-649.

[63] Lloyd N. Trefethen, D. B. (1997). *Numerical Linear Algebra.* Pennsylvanie: siam.

[64] Rebecca Gullberg. (2017). *Computational Fluid Dynamics in OpenFOAM: Mesh Generation and Quality.* TKP 4555 Advanced Process Simulation.

[65] Ishigaki, M. A. (2017). Influence of mesh non-orthogonality on numerical simulation of buoyant jet flows. *Nuclear Engineering and Design*, 326-337.

[66] michel, j.-m. (2016). *LES PROBLEMES du CELLULOÏD*. Récupéré sur Société Chimique de France: http://www.societechimiquedefrance.fr/Premiere-partie-Les-polymeres-avant-Staudinger.html

[67] Goktekin, T. G. (2004). A method for animating viscoelastic fluids. . *ACM Transactions on Graphics* , 463-468.

[68] Dubois, C. &. (2017). *Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office Brevet n° 9,539,752.*

[69] Patankar, S. V. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.* Taylor & Francis.

[70] Malaspinas, O. (2009). *Lattice Boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows.* Lausanne: École Polytechnique Fédérale de Lausanne.

[71] Favero, J. L. (2010). Viscoelastic flow analysis using the software OpenFOAM and differential constitutive equations. *Journal of non-newtonian fluid mechanics,*, 1625-1636.

[72] A. Amos Benchimol, C. D. (2018, octobre 17). *Implementation of a Viscoelastic Model to Generate a Shear Stress Test Using the DEVSS/SUPG Method.* Récupéré sur COMSOL Conference 2018: https://www.comsol.dk/paper/implementation-of-a-viscoelastic-model-to-generate-a-shear-stress-test-using-the-63752

[73] Wilson, G. L. (1934). The Solvation of Nitrocellulose in Acetone-Water Mixtures. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 247-277.

[74] Christopher W. Macosko. (1994). *Rheology: Principles, Measurements, and Applications.* Willey-VCH.

[75] Larson, R. G. (2013). *Constitutive equations for polymer melts and solutions: Butterworths series in chemical engineering.*

[76] Tomé, M. F. (2019). Numerical solution of the Giesekus model for incompressible free surface flows without solvent viscosity. . *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 104-119.

[77] Raisi, A. M. (2008). An approximate solution for the Couette–Poiseuille flow of the Giesekus model between parallel plates. *Rheol Acta*, 75-80.

[78] Peters, G. W. (1999). On the performance of enhanced constitutive models for polymer melts in a cross-slot flow. *Journal of non-newtonian fluid mechanics,* , 387-427.

[79] Daprà, I. &. (2018). Analytical solution for axial flow of a Giesekus fluid in concentric annuli. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 10-16.

[80] Ferrás, L. L. (2019). A Generalised Phan-Thien-Tanner Model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*.

[81] Sousa, J. J. (2011). Effect of the skimming layer on electro-osmotic—Poiseuille flows of viscoelastic fluids. *Microfluidics and Nanofluidics*, 107-122.

[82] Syrakos A., D. Y. (2018). Theoretical study of the flow in a fluid damper containing high viscosity silicone oil: effects of shear-thinning and viscoelasticity. *Alexandros Syrakos, Yannis Dimakopoulos, John Tsamopoulos*.

[83] Ray, S. (2000). *A three-dimensional flow simulation using a viscoelastic constitutive equation and a segregated finite element scheme.* Industrial Research Institute Swinburne .

[84] Nikitine, C. S. (2007). Mesures rhéologiques sur un biopolymère. *GFR 42 -42ème Colloque du Groupe Français de Rhéologie*, (p. 4). Clermont-Ferrand, France.

[85] Lomellini, P. (1992). Williams-Landel-Ferry versus Arrhenius behaviour: polystyrene melt viscoelasticity revised. *Polymer*, 4983-4989.

[86] Alnaimi, S. E. (2015). Structural, Thermal and Morphology Characteristics of Low Density Polyethylene Produced by QAPCO. *The 8th International Symposium on Inorganic Phosphate Materials*, (pp. 13-19). Agadir-Morocco.

[87] Chhabra, R. P. (1980). The influence of fluid elasticity on the drag coefficient for creeping flow around a sphere. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 187-199.

[88] Zhang, X. H. (2008). Meshless analysis of heat transfer due to viscous dissipation in polymer flow. *Engineering analysis with boundary elements*, 41-51.

[89] Johnson C. (1992). *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method.* Cambridge University Press.

[90] Fan, Y. T.-T. (1999). Galerkin/least-square finite-element methodsfor steady viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 233-256.

[91] Reed W.H. and Hill T.R. (1973). Triangular mesh methods for the neutron transport equation. *Los Alamos Scientific Lab*.

[92] Ferziger J. H. (1996). *Computational methods for fluid dynamics.* Springer.

[93] Yapici, K. K. (2012). Numerical analysis of viscoelastic fluids in steady pressure-driven channel flow. Journal of fluids engineering. *Journal of fluids engineering*, 134-139.

[94] Messal R. (2013, Février-mars). La valorisation des déchets plastiques en Europe et en France Encore des progrès à faire…. *le journal de la société chimique de france N° 371-372* , pp. 12-15.

[95] Hurez P. (1989). *Modélisation d'écoulements de fluides pseudoplastiques et de fluides à seuil dans des géométries non confinées.* Quebec: Université Laval.

[96] Giles Jr, H. F. (2004). *Extrusion (Second Edition) : The Definitive Processing Guide and Handbook.* William Andrew.

[97] Gronostajski, Z. P.-S. (2019). Recent development trends in metal forming. . *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 898-941.

[98] Dandan Ji, a. X. (2014). Finite Element Simulation of Seven-hole Propellant Extrusion and the Optimization of Die Compression Ratio. *Advanced Materials Research Vols. 941-944*, 2373-2377.

[99] Pauli, L. B. (2013). Towards shape optimization of profile extrusion dies with respect to homogeneous die swell. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 200*, 78-87.

[100] Yue Mu, G. Z. (2010). An optimization strategy for die design in the low-density. *Int J Adv Manuf Technol*, 517-532.

[101] Oberkampf, W. L. (2010). *Verification and validation in scientific computing.* Cambridge University Press.

[102] C. R. Beverly, R. I. (1989). Numerical Analysis of Extrudate Swell in Viscoelastic Materials with Yield Stress. *Journal of Rheology 33*, pp. 989-1009.

[103] Kabanemi, K. K. (2009). Nonlinear dynamics and conformational changes of linear entangled polymers using the Rolie-Poly model with an “effective” maximum contour length. *Rheologica acta*, 801-813.

[104] Tsai, C. C. (1995). Comparison of three solvers for viscoelastic fluid flow problems. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 155-177.

[105] Pauli, L. B. (2013). Towards shape optimization of profile extrusion dies with respect to homogeneous die swell. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 79-87.

[106] Johnson, C. (2012). *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method.* Courier Corporation.

[107] Versteeg, H. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method.* Pearson Education Limited.

[108] Dubrocq-Baritaud, C. (2008). *Mécanismes d'action de" Polymer Processing Aids" fluorés durant l'extrusion d'un polyéthylène basse densité linéaire: études expérimentales et interprétations.* (Doctoral dissertation).

ANNEXE A GÉOMÉTRIE RÉELLE DE LA FILIÈRE

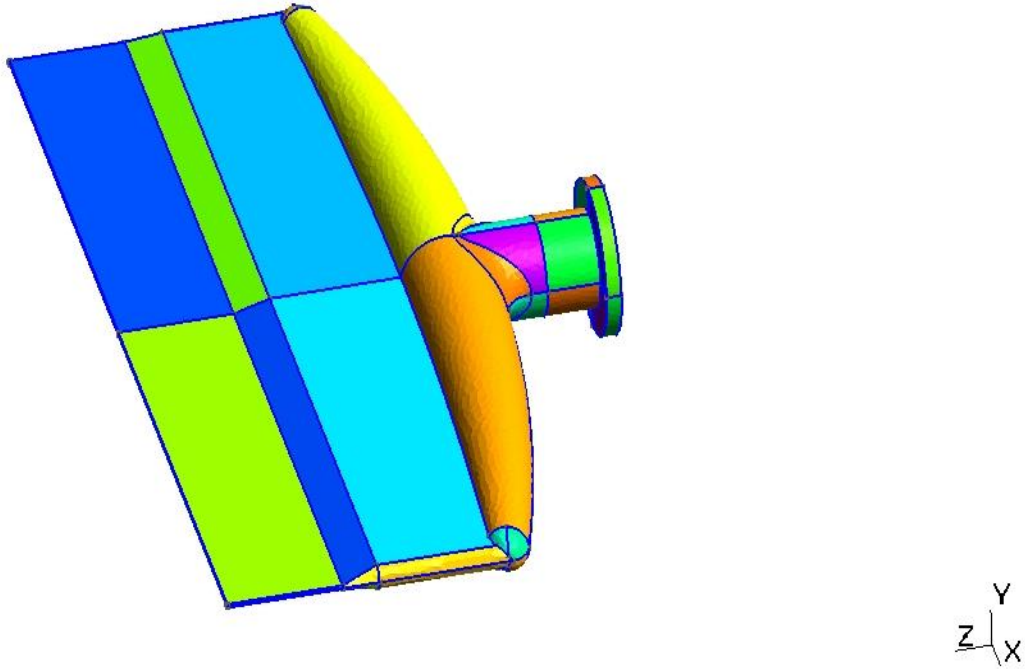

Figure A.1 Géométrie réelle de la filière.

ANNEXE B TABLEAU RÉCAPITULATIF DES AVANTAGES ET INCONVÉNIENTS DES DIFFÉRENTS OUTILS DE SIMULATION

	Avantages	Inconvénients
Comsol	• Simple d'utilisation • Permets de créer des applications sur un cluster en ligne de comsol • User friendly • Permet une optimisation de forme	• Logiciel payant • peu de documentation sur le viscoélastique • N'embarque pas de bibliothèque viscoélastique
Polyflow	• Très répandu • Vaste documentation sur le viscoélastique • User friendly • Crée pour l'extrusion de polymère	• Logiciel payant • Ne permets pas de créer d'application
Openfoam	• Logiciel gratuit • Bibliothèque viscoélastique disponible	• Nécessite de fortes connaissances en c++ • Complexe à coder • Faible documentation disponible

ANNEXE C RÉSULTAT DE SIMULATION POUR UN MODÈLE PTT GÉOMÉTRIE FENTE/ SPHÈRE POSITION APRÈS LA SPHÈRE

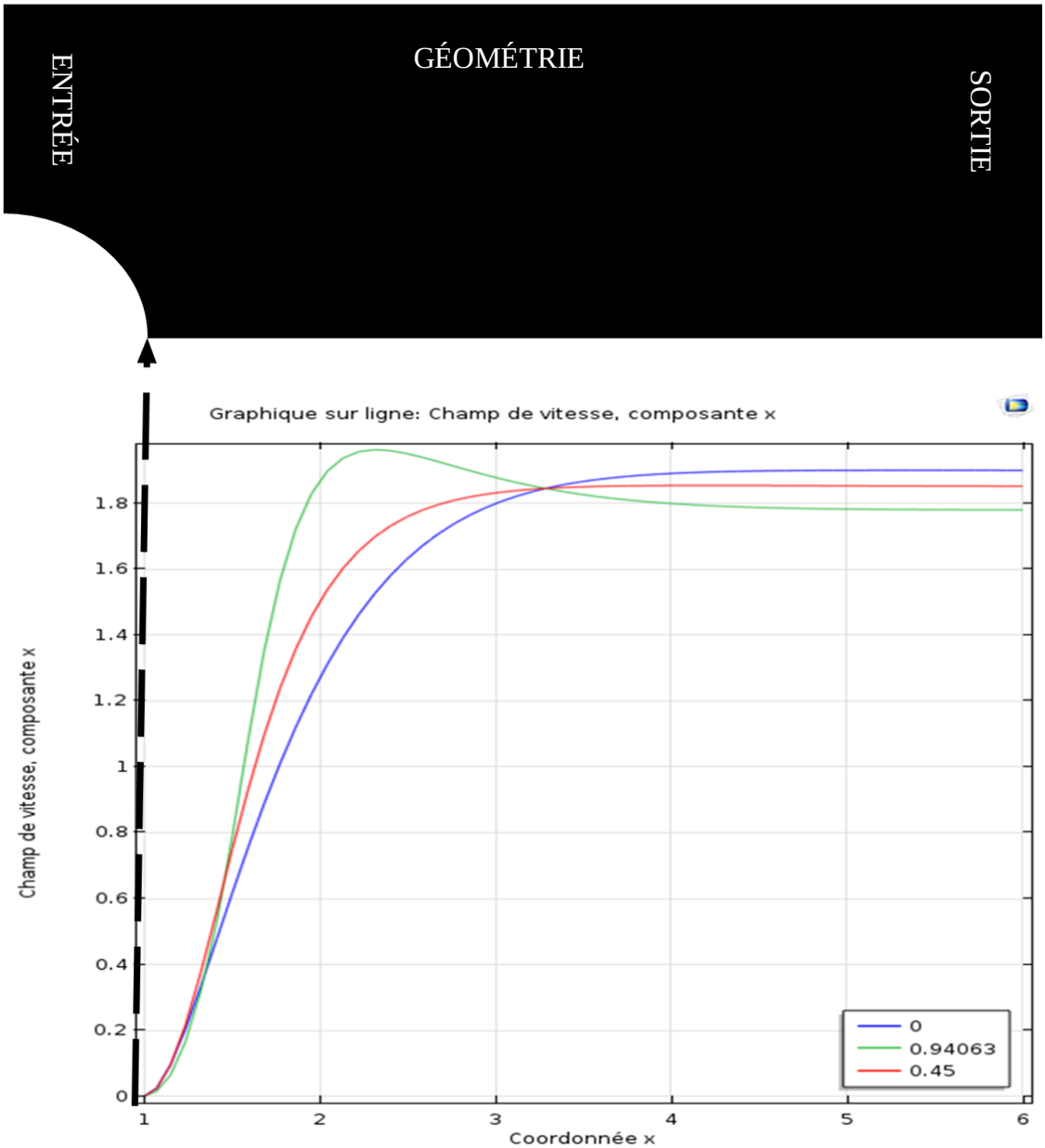

Figure B.2 Évolution de la force normale au cours du temps dans une géométrie de fente avec un obstacle sphérique.

ANNEXE D ALGORITHME *SIMPLE*

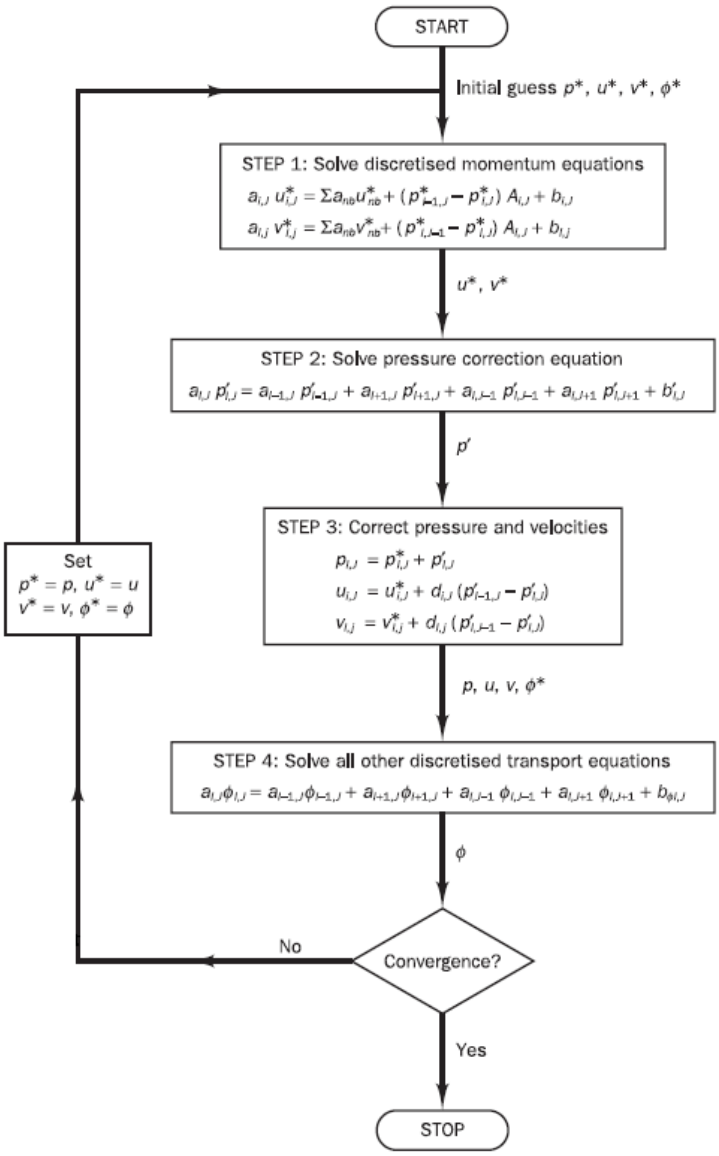

Figure C.3 Diagramme simplifié de l'algorithme *SIMPLE* [44].

ANNEXE E SCRIPT VISCOÉLASTIQUE FOAM-EXTEND/GMSH

Ce script permet de lancer et paralléliser les simulations viscoélastiques sous Foam-Extend pour des géométries codées en GMSH

```
#!/bin/bash
# please execute fe41 or other source code before launching this script
# don't use multiple .geo file inside the same directory files
# for symmetry please use in your gmsh program the flag simetry

# this part clean the case
. $WM_PROJECT_DIR/bin/tools/CleanFunctions
cleanCase
echo "done!"


nopr=4; #define number of processor >=2
rm -r processor* # supress old processor file
gmsh *.geo -3 # execute gmsh and create .msh file
gmshToFoam *.msh # convert .msh to Foam mesh


cd  constant/polyMesh/
grep simetry boundary

ligne=`grep -n simetry boundary | awk '{print $1}' | sed -e "s/:/ /"`
ligne=`expr $ligne + 2`
sed -e "${ligne}s/patch/symmetryPlane/" boundary > tempo;mv tempo boundary
cd -
cd system
sed -e ':a;N;$!ba;s/numberOfSubdomains.*metis/numberOfSubdomains "'$nopr'"; \n \n    method
metis/g' decomposeParDict> tempo;mv tempo decomposeParDict
cd -

decomposePar #decompose for parallel computing using mpi
mpirun -np $nopr viscoelasticFluidFoam –parallel #launch the computation in parallel
reconstructPar # reconstruct the solution

paraFoam -nativeReader # display the result on paraview

echo
echo Done Work
```

ANNEXE F SCRIPT POUR GÉNÉRER UNE GÉOMETRIE SIMPLIFIÉE À L'AIDE DE GMSH

Ce script permet de construire la géométrie du profilé sous GMSH.

```
//+
SetFactory("OpenCASCADE");
ec=0.0030988;
ec2=0.0030988+0.03;
//+
Cylinder(1) = {0, 0, 0, 0, 0, ec, 0.0150114, Pi/2};
Cylinder(2) = {0, 0, ec, 0, 0, 0.03, 0.0150114-0.0055114, Pi/2};
Cylinder(3) = {0, 0, ec2, 0.1, 0, 0, 0.0150114-0.0055114, Pi};
//+
Box(4) = {0,0, ec2+0.0150114-0.0066, 0.1, 0.002381249996, 0.02741869782 };
Box(6) = {0,0, ec2+0.0150114-0.0066+0.02741869782+0.00762, 0.1, 3.75E-4, 0.02741869782 };
//+
Symmetry {0, 1, 0, 0} {
  Volume{3};
}
//+
Line(61) = {19, 28};
//+
Line(62) = {30, 21};
//+
Line Loop(33) = {62, -29, 61, 43};
//+
Plane Surface(33) = {33};
//+
Extrude {0.1, 0, 0} {
  Surface{33}; Line{62}; Line{43}; Line{61}; Line{29};
}
Mesh.CharacteristicLengthFromCurvature=1;
Mesh.CharacteristicLengthMax=0.002;
BooleanUnion{  Volume{4};  Delete;  }{  Volume{3};  Volume{2};  Volume{1};  Volume{7};
Volume{6}; Delete; }
Physical Surface("outlet") = {30};
Physical Surface("simetry") = {29, 26, 21, 18, 14, 10, 7, 3, 5, 8, 11, 16, 13, 23, 22, 27, 31};
Physical Surface("inlet") = {4};
Physical Surface("fixedWalls") = {1,2, 6, 9, 15, 20, 25, 12, 17, 19, 24, 28};
Characteristic Length {32, 34, 31, 35, 28, 30, 27, 33, 22, 23, 26, 29} = 0.0005;
Physical Volume("vol") = {1};
```

ANNEXE G GÉOMÉTRIE OBTENUE SOUS GMSH FIDÈLE AU PROFILÉ RÉEL

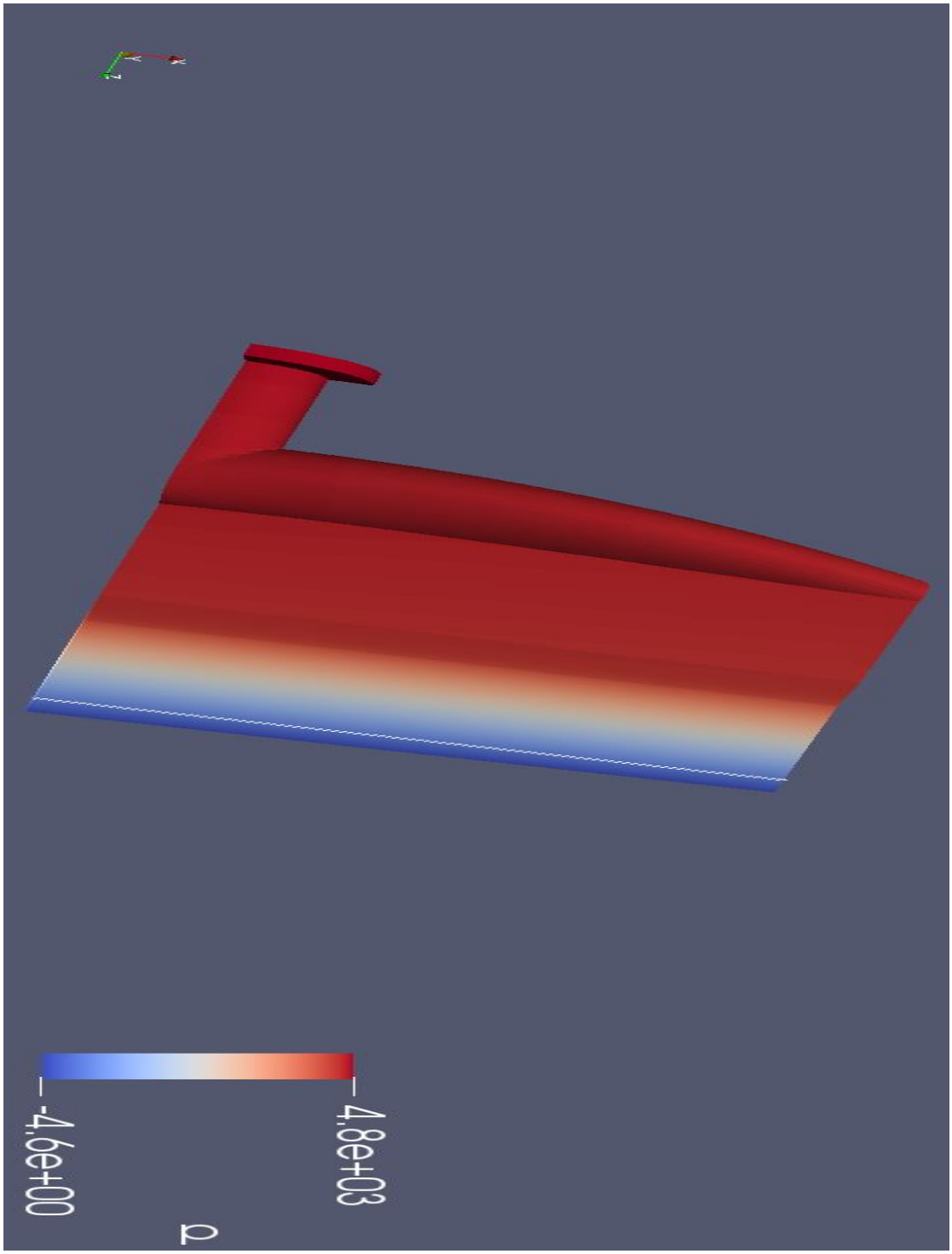

Figure G.4 Évolution de la pression dans une géométrie fidèle au profilé réel.

ANNEXE H PROFILÉ AVEC PINCES

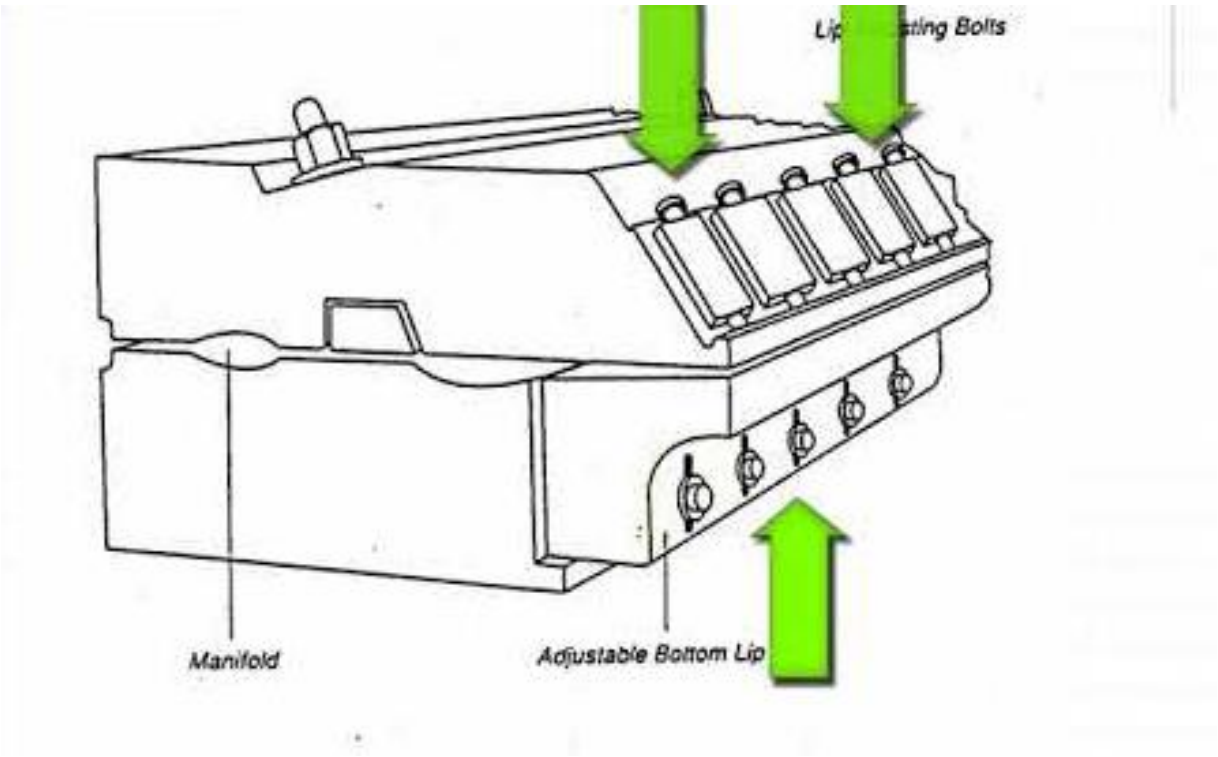

Figure H.5 Schéma d'un profilé avec pince [66].