

---

# Fluides viscoélastiques : modélisation numérique et mesures expérimentales

Marie-Claude Heuzey\* — André Fortin\*\* — John Dealy\*\*\*

\* *Département de génie chimique  
École Polytechnique de Montréal  
C.P. 6079, Succ. Centre-Ville  
Montréal, Canada, H3C 3A7*

\*\* *GIREF, Département de Mathématiques et de statistique  
Université Laval  
Québec, Canada, G1K 7P4*

\*\*\* *Département de génie chimique,  
Université McGill, 3610 rue Université,  
Montréal, Canada, H3A 2B2*

---

*RÉSUMÉ. L'incorporation de lois de comportement viscoélastique pour la modélisation de transformation des polymères s'avère difficile, et de ce fait des modèles inélastiques sont presque exclusivement utilisés lors des simulation d'écoulements d'importance industrielle. Lors de cette étude, nous avons analysé la performance d'un modèle viscoélastique différentiel, le modèle de Phan-Thien/Tanner, dont les prédictions ont été comparées aux données expérimentales d'un écoulement complexe et aux prédictions d'un modèle strictement visqueux (Carreau-Yasuda). Les lois de comportement sont incorporées à une formulation mixte d'éléments finis de type "Elastic Viscous Split Stress" (EVSS) modifiée. L'importance de l'utilisation d'un modèle viscoélastique pour la simulation d'un tel écoulement est commentée*

*ABSTRACT. The incorporation of a viscoelastic constitutive equation into computer models for polymer processing poses many problems, and for this reason inelastic models are used almost exclusively to represent rheological behavior for flow simulation in the plastics industry. In this work, we analyzed the performance of a differential viscoelastic model, Phan-Thien/Tanner, whose predictions have been compared to experimental results in a complex flow and to the predictions of a strictly viscous model (Carreau-Yasuda). The models are implemented in a modified Elastic Viscous Split Stress (EVSS) mixed finite element formulation. The importance of using a viscoelastic model for the simulation of such a flow is discussed.*

*MOTS-CLÉS : Fluides viscoélastiques, éléments finis, perte de charge, contraction, biréfringence.  
KEY WORDS : Viscoelastic fluids, finite element, pressure drop, contraction, birefringence.*

---

## 1. Introduction

Les polymères fondus présentent généralement un caractère viscoélastique lors des procédés de transformation industriels, et l'élasticité devient particulièrement importante dans les géométries comportant une contraction ou une expansion abrupte dans la direction de l'écoulement. Toutefois, l'incorporation de lois de comportement viscoélastique pour la modélisation des procédés de transformation des polymères pose de nombreuses difficultés, et de ce fait des modèles inélastiques ont presque exclusivement été utilisés lors des simulations d'écoulements d'intérêt industriel.

Deux approches ont servi à la formulation des lois de comportement viscoélastique pour les polymères fondus et en solution. La première est basée sur des concepts de mécanique des milieux continus et inclut des modèles tels que Giesekus [GIE 82], Leonov [LEO 76], Phan-Thien/Tanner [PHA 77] et K-BKZ [BER 63, KAY 62]. Une fraction importante des travaux sur l'analyse numérique de l'écoulement viscoélastique des polymères fondus est basée sur l'utilisation de modèles intégraux de type K-BKZ (voir [BAA 98]). Pour ce qui est des modèles de type différentiel, Phan-Thien/Tanner (PTT) et Giesekus sont les plus couramment utilisés, bien que le modèle de Leonov prédise des valeurs limites plus réalistes des viscosités en élongation que le modèle de Giesekus [LAR 88], et ne contienne pas de paramètres non linéaires. Le modèle de Giesekus comprend un paramètre contrôlant la non-linéarité, alors que PTT en inclut deux. Ce dernier a la propriété d'ajuster indépendamment les prédictions des propriétés en cisaillement et en élongation, mais cause des oscillations artificielles lors de l'initiation des écoulements en cisaillement [CAR 96].

La seconde méthode pour formuler les lois de comportement viscoélastique est basée sur la dérivation de théories moléculaires et l'utilisation de la mécanique statistique. Une approche numérique récente pour simuler les écoulements viscoélastiques est la « formulation micro-macro » basée sur des théories cinétiques, où des simulations browniennes de molécules de polymères sont couplées à la modélisation de l'écoulement macroscopique. Des progrès remarquables ont été atteints avec cette approche dans le cas des polymères en solution [OTT 95], mais elle demeure encore prohibitive en termes de temps de calcul pour les polymères fondus [MCL 99].

Lors de cette recherche, nous avons examiné la performance du modèle PTT en termes de convergence numérique et de prédiction d'un écoulement complexe. La géométrie utilisée est une contraction abrupte plane qui permet la manifestation du comportement viscoélastique des polymères fondus. Les prédictions du modèle ont été comparées aux observations expérimentales obtenues à l'aide d'un polyéthylène haute densité.

## 2. Le modèle sélectionné

Dans cette étude, nous travaillerons uniquement avec un modèle différentiel, à savoir le modèle de Phan-Thien/Tanner. Ce modèle a la réputation de bien reproduire le

comportement en cisaillement et en élongation [LAR 88]. Pour les polymères fondus, le modèle PTT s'écrit :

$$\lambda \frac{\xi}{2} \overset{\nabla}{\tau} + \lambda \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \overset{\Delta}{\tau} + \tau \exp\left(\frac{\lambda \epsilon}{\eta} \text{tr}(\tau)\right) = 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{u}) \quad [1]$$

où  $\tau$  est le tenseur des extra-contraintes,  $\mathbf{D}(\mathbf{u})$  est le tenseur du taux de déformation,  $\mathbf{u}$  est le champ de vitesse,  $\eta$  est la viscosité et  $\lambda$  est le temps de relaxation. La combinaison des dérivées contravariante :

$$\overset{\nabla}{\tau} = \mathbf{u} \cdot \nabla \tau - (\nabla \mathbf{u} \cdot \tau + \tau \cdot \nabla \mathbf{u}^T) \quad [2]$$

et covariante :

$$\overset{\Delta}{\tau} = \mathbf{u} \cdot \nabla \tau + (\nabla \mathbf{u}^T \cdot \tau + \tau \cdot \nabla \mathbf{u}) \quad [3]$$

est la dérivée de Gordon-Schowalter [GOR 72] et est contrôlée par le paramètre  $\xi$ . Enfin,  $\epsilon$  est un paramètre non linéaire. Fortin et Béliveau [FOR 98] ont obtenu des résultats fort intéressants à l'aide de ce modèle pour différents types d'écoulements.

Pour mieux apprécier l'importance de l'utilisation d'un modèle viscoélastique, nous effectuerons également des simulations à l'aide d'un modèle purement visqueux, soit le modèle de Carreau-Yasuda [YAS 81] :

$$\tau = \eta_0 \left(1 + (2\lambda^2 \Pi_D)^{\frac{s}{2}}\right)^{\frac{m-1}{s}} \quad [4]$$

où  $\eta_0$  est la viscosité à taux de cisaillement nul, qui peut être déduite du spectre discret,  $\lambda$  est un temps caractéristique,  $m$  est l'indice de pseudoplasticité lié à la pente de la courbe de viscosité à haut taux de cisaillement et  $s$  est un deuxième indice de pseudoplasticité contrôlant la transition entre le plateau newtonien et la région pseudoplasticité.  $\Pi_D$  est le second invariant du tenseur  $\mathbf{D}$  :

$$\Pi_D = 2\mathbf{D}_{ij} \mathbf{D}_{ij}$$

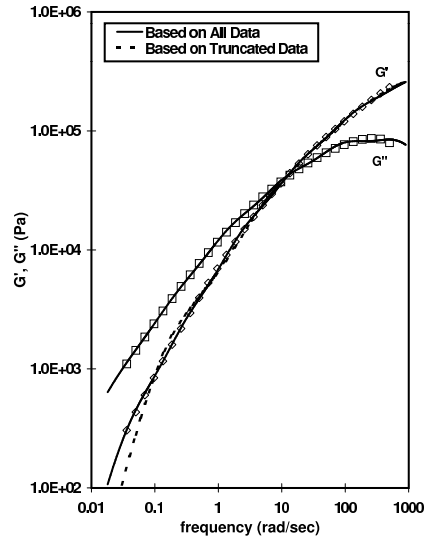
### 3. Identification des paramètres du modèle

#### 3.1. Le matériau

Le polymère utilisé dans le cadre de cette recherche est un polyéthylène haute densité (PEHD), DSM X1010. Il s'agit d'un matériau expérimental polymérisé à l'aide d'un catalyseur différent de celui entrant dans la fabrication des résines commerciales DSM pour le moulage-soufflage, connues sous le nom de Stamylan HD. Quelques caractéristiques du matériau sont présentées dans le tableau suivant :

Résine	Densité (g/cm <sup>3</sup> )	Indice d'écoulement (g/10 min)	Poids moléculaire ( $M_W$ ) (g/mol)	Polydispersité ( $M_W/M_n$ )
PEHD	0,957	1,15 (Test I5)	195 000	35,0

**Tableau 1.** Propriétés de la résine utilisée



**Figure 1.** Modules dynamiques ( $T = 200^{\circ}C$ )

### 3.2. Viscoélasticité linéaire

Le spectre discret des temps de relaxation a été déterminé par régression linéaire à partir des données en cisaillement oscillatoire [ORB 91]. Un minimum de six modes est nécessaire à une représentation adéquate des modules expérimentaux du PEHD étudié. Deux spectres discrets ont été calculés: le premier est basé sur la totalité des données expérimentales, alors que le second utilise un ensemble tronqué de données, dans lequel les mesures aux plus basses fréquences ( $\omega < 0,1$  rad/s) ne sont pas considérées. Cette procédure permet l'obtention de temps de relaxation plus courts, ce qui facilite la convergence numérique lors des simulations. Il a été vérifié que la troncation n'affecte pas les résultats des simulations (voir section 6). Les courbes des deux spectres calculés sont présentées à la figure 1, et les ensembles de paramètres  $[G_i, \lambda_i]$  sont résumés dans le tableau qui suit :

Mode	Ensemble complet		Ensemble tronqué	
	$G_i$ (Pa)	$\lambda_i$ (s)	$G_i$ (Pa)	$\lambda_i$ (s)
1	$1,31 \times 10^5$	$1,43 \times 10^{-3}$	$1,23 \times 10^5$	$2,00 \times 10^{-3}$
2	$1,09 \times 10^5$	$1,00 \times 10^{-2}$	$9,29 \times 10^4$	$1,00 \times 10^{-2}$
3	$4,81 \times 10^4$	$7,00 \times 10^{-2}$	$4,21 \times 10^4$	$5,00 \times 10^{-2}$
4	$1,66 \times 10^4$	$4,90 \times 10^{-1}$	$2,51 \times 10^4$	$2,50 \times 10^{-1}$
5	$3,08 \times 10^3$	$3,43 \times 10^0$	$3,54 \times 10^3$	$1,25 \times 10^0$
6	$5,98 \times 10^2$	$24,0 \times 10^0$	$2,95 \times 10^3$	$6,25 \times 10^0$

**Tableau 2.** Spectres complet et tronqué

### 3.3. Viscoélasticité non linéaire

La détermination expérimentale des paramètres non linéaires de modèles visco-élastiques représente un défi de taille. Certains paramètres s'obtiennent facilement à l'aide de mesures de viscosité en cisaillement, mais en ce qui a trait aux paramètres liés au comportement élongationnel ou aux contraintes normales, les données expérimentales disponibles s'avèrent souvent limitées. En particulier, il manque considérablement de données fiables concernant les contraintes normales à hauts taux de cisaillement et la réponse aux écoulements en élongation à hauts taux de déformation. Pour cette étude, les paramètres non linéaires ont été obtenus par lissage des mesures rhéologiques. La détermination de  $\xi$  provient des données en viscosité, et la détermination de  $\epsilon$  des données disponibles en première différence de contraintes normales et en élongation à faible taux de déformation.

Un des problèmes associés au modèle PTT lorsque  $\xi \neq 2$  est la présence d'un maximum dans la courbe taux de déformation vs. contrainte en cisaillement, ce qui est physiquement irréaliste [BER 95]. Crochet *et al.* [CRO 84] ont démontré qu'il est possible d'éviter ce problème en utilisant une composante visqueuse ( $\eta_s \neq 0$ ). Ainsi, la contrainte devient une fonction strictement croissante du taux de cisaillement si le rapport des viscosités rencontre la condition suivante :

$$\frac{\eta_s}{\eta} \geq \frac{1}{8} \quad [5]$$

avec  $\eta_s + \eta = \eta_0$ .

Toutefois, lorsqu'un spectre de relaxation est utilisé au lieu d'un mode simple, cette condition peut être relaxée. Cette hypothèse a été vérifiée en ajustant aux données expérimentales en cisaillement un paramètre additionnel,  $\alpha$ , qui contrôle le ratio des viscosités :

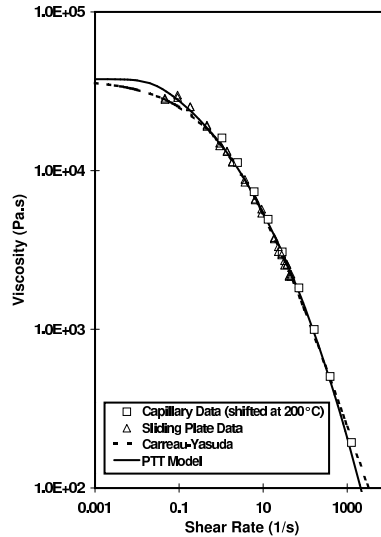
$$\alpha = \frac{\eta_s}{\eta_0}$$

Pour le polymère étudié,  $\alpha = 3,6 \times 10^{-4}$ , ce qui confirme que la condition donnée par l'inégalité 5 peut être ignorée lors de l'utilisation d'un spectre de temps de relaxation.

Les paramètres des modèles PTT et Carreau-Yasuda sont résumés dans le tableau ci-dessous. Pour le modèle PTT, les valeurs des  $G_i$  et  $\lambda_i$  sont présentées dans le tableau précédent.

Phan-Thien/Tanner	Carreau-Yasuda
$\xi = 1,82$	$\eta_0 = 37\,694 \text{ Pa}\cdot\text{s}$
$\epsilon = 0,32$	$\lambda = 0,48 \text{ s}$
	$m = 0,20$
	$s = 0,45$

**Tableau 3.** Paramètres des deux modèles



**Figure 2.** Viscosité ( $T = 200^{\circ}C$ )

Les courbes calculées de la viscosité, du coefficient de croissance de la contrainte en élongation et de la première différence de contraintes normales à l'aide des modèles PTT et Carreau-Yasuda (viscosité seulement) sont présentées aux figures 2, 3 et 4. La première différence de contraintes normales est aussi comparée à la relation empirique de Laun [LAU 86]. Plus de détails sur la caractérisation rhéologique du matériau et la détermination des paramètres des modèles peuvent être trouvés dans Heuzey [HEU 99].

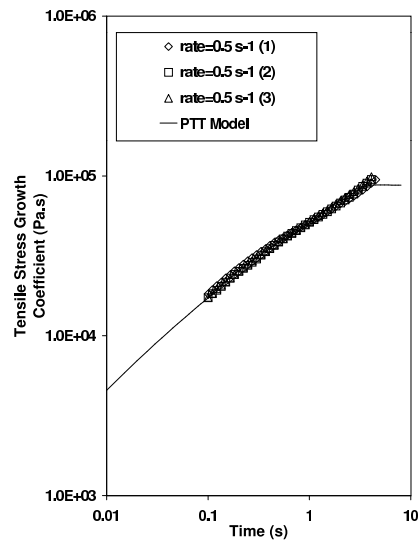
## 4. Description du problème

### 4.1. Formulation à 4 champs

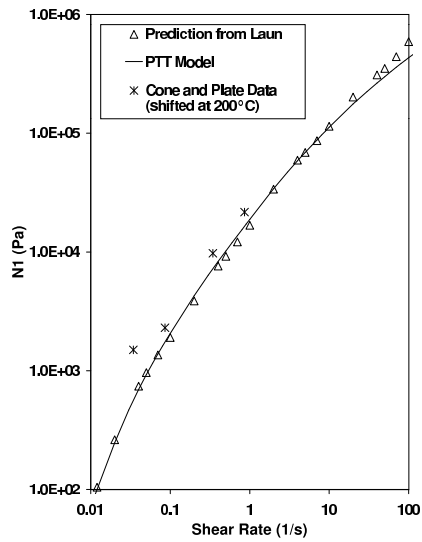
Pour les écoulements isothermes, on néglige la compressibilité et les forces volumiques de sorte que les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} &= 0 \end{aligned} \quad [6]$$

où  $\rho$  est la densité volumique et  $p$  la pression. Pour un fluide newtonien et si on néglige les termes d'inertie, ce système est le problème de Stokes classique. En l'absence de contribution visqueuse et dans le cadre d'une représentation multi-mode, le tenseur



**Figure 3.** Coefficient de croissance de la contrainte en élongation ( $T = 200^{\circ}C$ )



**Figure 4.** Première différence de contraintes normales ( $T = 200^{\circ}C$ )

des extra-contraintes peut s'écrire sous la forme :

$$\boldsymbol{\tau} = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\tau}_i \quad [7]$$

Un modèle rhéologique est alors requis pour fermer le système. Pour le modèle de Phan-Thien/Tanner, on a pour chaque mode :

$$\lambda_i \frac{\xi}{2} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_i + \lambda_i \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \Delta \boldsymbol{\tau}_i + \boldsymbol{\tau}_i \exp\left(\frac{\lambda_i \epsilon}{\eta_i} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_i)\right) = 2\eta_i \mathbf{D}(\mathbf{u}) \quad [8]$$

où  $\eta_i = \lambda_i G_i$ .

Le choix des discrétisations des différentes variables est toujours délicat. Guénette et Fortin [GUE 95] ont démontré que l'introduction explicite comme variable du tenseur de taux de déformation :

$$\mathbf{d} = \mathbf{D}(\mathbf{u})$$

facilitait ce choix. Cette technique est appelée EVSS (« *Elastic Viscous Stress Splitting* »). On peut alors écrire l'équation de conservation de la quantité de mouvement sous la forme :

$$-\nabla \cdot (2\alpha \mathbf{D}(\mathbf{u})) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla \cdot (2\alpha \mathbf{d}) \quad [9]$$

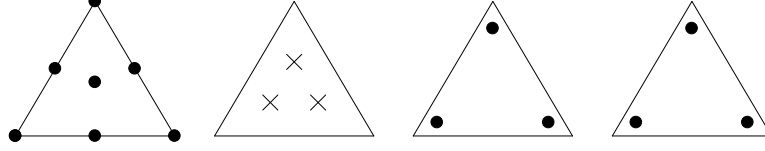
Le paramètre  $\alpha$  est *a priori* arbitraire mais  $\alpha = \eta_0$  semble un choix optimal. L'ajout de ces deux termes ne modifie en rien l'équation de mouvement dans le cas continu. Cependant, nous verrons que cela a des conséquences lors de la discrétisation.

#### 4.2. Formulation faible

Pour obtenir la formulation faible du système, on multiplie chaque équation par une fonction test et on intègre sur le domaine  $\Omega$  en utilisant au besoin le théorème de la divergence. On discrétise ensuite les différentes variables. Dans le cas d'une formulation à 4 champs, on doit discrétiser les variables  $\mathbf{u}_h$ ,  $p_h$ ,  $\mathbf{d}_h$  et  $\boldsymbol{\tau}_h$ . Leur discrétisation respective doit respecter la généralisation de la condition inf-sup de Brezzi (voir [FOR 87] ou [BRE 91]) que l'on rencontre dans la formulation des problèmes mixtes et en particulier dans la formulation vitesse-pressure du problème de Stokes. On se réfère à [GUE 00] pour une revue plus complète des choix possibles de discrétisations de ces 4 champs. Dans ce travail, nous avons choisi des éléments triangulaires. Le duo vitesse-pressure est discrétisé en utilisant l'élément de Crouzeix-Raviart [CRO 73] qui consiste en une approximation quadratique en vitesse mais enrichie d'une bulle de degré 3 associée au barycentre de l'élément. La pression est quant à elle linéaire ( $P_1$ ) mais discontinue d'un élément à l'autre (voir la figure 5).

On utilise également des discrétisations linéaires et discontinues pour les tenseurs  $\mathbf{d}_h$  et les différents modes du tenseur  $\boldsymbol{\tau}_h$ . L'utilisation d'une approximation discontinue présente de nombreux avantages au niveau de la résolution mais nous oblige





**Figure 5.** *Discrétisations de  $\mathbf{u}_h$ ,  $p_h$ ,  $\mathbf{d}_h$  et  $\boldsymbol{\tau}_h$*

à utiliser la méthode de Lesaint-Raviart [LES 74] aussi nommée méthode Galerkin discontinue. Nous renvoyons à Fortin et Béliveau [FOR 98], Fortin-Béliveau-Heuzey-Lioret [FOR 00] et Fortin-Zine [FOR 92] pour une description plus complète de cette méthode et son application aux fluides viscoélastiques.

Le problème consiste alors à trouver  $(\mathbf{u}_h, p_h, \mathbf{d}_h, \boldsymbol{\tau}_{i_h}) \in V_h \times Q_h \times \Sigma_h \times \Sigma_h$  tels que pour tout  $(\mathbf{v}_h, q_h, \boldsymbol{\Phi}_h, \boldsymbol{\Psi}_h) \in V_h \times Q_h \times \Sigma_h \times \Sigma_h$

$$\int_{\Omega} (2\alpha \mathbf{D}(\mathbf{u}_h) : \mathbf{D}(\mathbf{v}_h) - p_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h) dx = \int_{\Omega} (2\alpha \mathbf{d}_h - \boldsymbol{\tau}_h) : \mathbf{D}(\mathbf{v}_h) dx \quad [10]$$

$$\int_{\Omega} q_h \nabla \cdot \mathbf{u}_h dx = 0 \quad [11]$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{d}_h : \boldsymbol{\Phi}_h dx = \int_{\Omega} \mathbf{D}(\mathbf{u}_h) : \boldsymbol{\Phi}_h dx \quad [12]$$

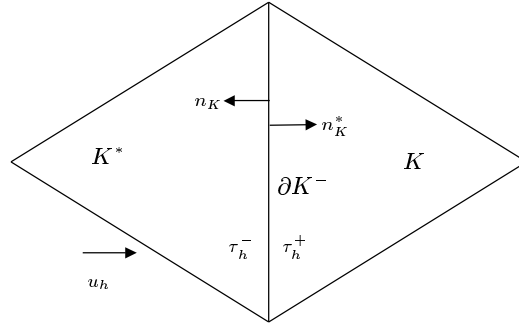
$$\sum_K \left( \int_K \left\{ \lambda_i \left( \frac{\xi}{2} \boldsymbol{\tau}_{i_h}^{\nabla} + \left( 1 - \frac{\xi}{2} \right) \boldsymbol{\tau}_{i_h}^{\Delta} \right) + \exp \left( \frac{\epsilon \lambda_i}{\eta_i} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_{i_h}) \right) \boldsymbol{\tau}_{i_h} \right\} : \boldsymbol{\Psi}_h dx \right. \\ \left. - \lambda_i \int_{\partial K_-} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n}_K [\boldsymbol{\tau}_{i_h}] : \boldsymbol{\Psi}_h ds \right) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad [13]$$

Dans l'équation (13),  $\partial K_-$  est la frontière entrante de l'élément  $K$  que l'on définit par :

$$\partial K_- = \{x \in \partial K \mid \mathbf{u}_h(x) \cdot \mathbf{n}_K(x) < 0\}$$

où  $\mathbf{n}_K$  est le vecteur normal unitaire à la frontière  $\partial K$  de l'élément. Le terme  $[\boldsymbol{\tau}_{i_h}] = \boldsymbol{\tau}_{i_h}^+ - \boldsymbol{\tau}_{i_h}^-$  dénote le saut de la variable  $\boldsymbol{\tau}_{i_h}$  sur la frontière en raison de l'utilisation d'une approximation discontinue de cette variable (voir la figure 6).

La variable  $\mathbf{d}_h$  est une projection de  $\mathbf{D}(\mathbf{u}_h)$  dans l'espace discret  $\Sigma_h$ . Il n'y a donc pas égalité entre ces deux variables une fois qu'elles sont discrétisées. En effet, avec les discrétisations utilisées,  $\mathbf{D}(\mathbf{u}_h)$  est un polynôme de degré 2 dans l'élément qui est par la suite projeté sur un polynôme de degré 1 car  $\mathbf{d}_h$  est linéaire sur chaque élément.



**Figure 6.** *Frontière entrante de  $K$*

## 5. Algorithmes de résolution

Le système global 10-13 est de taille considérable, plus particulièrement dans le cas multi-mode. Une méthode de Newton requièrerait le calcul et l'assemblage d'une matrice de taille gigantesque. C'est pourquoi une approche découplée est préférable.

Cela nécessite cependant la résolution de trois types de problèmes :

- calcul de  $\mathbf{u}_h$  et  $p_h$  ( $\boldsymbol{\tau}_h$  et  $\mathbf{d}_h$  étant supposés connus) ;
- résolution de l'équation constitutive pour un champ de vitesse  $\mathbf{u}_h$  fixé ;
- projection  $\mathbf{d}_h = \mathbf{D}(\mathbf{u}_h)$ , pour  $\mathbf{u}_h$  donné.

Nous allons décrire dans ce qui suit les principales étapes de la résolution et surtout comment on effectue le couplage de ces trois problèmes.

### 5.1. Le problème de Stokes

Si on suppose  $\boldsymbol{\tau}_h$  et  $\mathbf{d}_h$  connus, les équations 10-11 constituent un problème de Stokes classique en formulation vitesse-pression. Pour le résoudre, nous utilisons l'algorithme d'Uzawa [FOR 85a]. Cette technique est en fait une méthode de gradient sur le problème dual en pression et garantit la satisfaction de la contrainte d'incompressibilité à la précision machine. De plus, les deux degrés de liberté associés au barycentre des éléments sont condensés suivant une technique décrite dans Fortin et Fortin [FOR 85b]. Les systèmes linéaires résultants sont ensuite résolus par une méthode de factorisation  $LU$ .

### 5.2. La méthode de Lesaint-Raviart

Grâce à l'utilisation d'une approximation discontinue, on peut résoudre l'équation 13 élément par élément. Cela permet d'aborder beaucoup plus facilement les mo-

dèles multi-mode, car il n'y a pas de systèmes globaux à assembler. La seule difficulté réside dans le dernier terme de l'équation 13 faisant intervenir le saut de la variable  $\tau_{i_h}^-$  sur la frontière entrante  $\partial K_-$  de l'élément  $K$ . Deux stratégies sont alors possibles. On peut numéroter les éléments de sorte que lors de la résolution sur l'élément  $K$ , on ait déjà résolu sur les éléments adjacents à la frontière entrante.

Nous avons plutôt choisi de prendre la valeur de la variable  $\tau_{i_h}^-$  sur les éléments adjacents à l'itération précédente dans un schéma de nature plus explicite. De cette manière, on peut parcourir les éléments et résoudre sans ordre spécial. Pour une approximation linéaire ( $P_1$ ), on doit alors résoudre un système non linéaire de dimension 9 sur 9 sur chaque élément. Une méthode de Newton est utilisée pour linéariser.

### 5.3. La projection

Le problème 12 ne pose aucune difficulté particulière. Ici encore, on résout élément par élément. Il a toutefois été reporté que l'utilisation d'une approximation continue pour la variable  $d_h$  donnait des résultats supérieurs (voir Baaijens [BAA 98]). Cela se fait cependant au prix d'une résolution globale de cette équation et nous avons préféré garder la possibilité d'une résolution locale. On a cette fois un système linéaire de dimension 9 sur 9 à résoudre sur chaque élément.

### 5.4. Couplage des différents systèmes

Le couplage des trois systèmes précédents est effectué par une méthode de Newton-Krylov décrite dans Fortin-Zine [FOR 92]. On retrouvera les détails dans Heuzey [HEU 99]. Nous rappellerons seulement l'idée de base de la méthode. Le système 10-13 peut être vu comme un vaste système non linéaire de la forme :

$$\mathbf{R}(U) = 0$$

où  $U = (\mathbf{u}_h, p_h, \mathbf{d}_h, \tau_{i_h})$ . Pour appliquer la méthode de Newton, partant d'un estimé  $U_n$  de la solution, il faut calculer et éventuellement assembler la matrice jacobienne  $J(U_n)$  qui sera de très grande taille. On devra ensuite résoudre une suite de problèmes linéaires de la forme :

$$J(U_n)\Delta U = -\mathbf{R}(U_n) \quad U_{n+1} = U_n + \Delta U \quad [14]$$

On évite le calcul explicite de ces matrices en recourant à des méthodes de type Newton-Krylov. En effet, les méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires ne requièrent pas la matrice  $J(U_n)$  elle-même mais seulement le produit de cette matrice avec différentes directions de descente  $V$ . On a de plus :

$$J(U_n)V \simeq \frac{\mathbf{R}(U_n + tV) - \mathbf{R}(U_n - tV)}{2t}$$

Si  $t$  est suffisamment petit ( $\simeq 10^{-6}$ ), le produit ne nécessite que le calcul de deux résidus. Pour accélérer la convergence de l'algorithme, on applique un préconditionneur de type bloc Jacobi au système 14 au moyen des sous-problèmes décrits aux paragraphes 5.1, 5.2 et 5.3. On utilise alors la méthode GMRES pour la résolution du système global ainsi préconditionné.

## 6. La contraction abrupte

### 6.1. Conditions expérimentales

Les mesures en extrusion ont été effectuées à l'aide d'une filière à parois transparentes en Pyrex. La filière, qui est alimentée en continu par une extrudeuse Kaufmann PK 25 de type mono-vis, consiste en un large réservoir dans lequel la pression et la température peuvent être mesurées. La partie finale de la filière est amovible afin d'accommoder diverses géométries. Plus de détails à ce sujet sont donnés dans Beaufils *et al.* [BEA 89]. La configuration utilisée dans le cadre de ce travail est une contraction abrupte 8:1. La géométrie et les dimensions de la filière sont présentées à la figure 7. Les expériences ont été conduites à  $200 \pm 2^\circ \text{C}$  et à des débits massiques variant entre 0,21 et 2,6 kg/h, ce qui correspond à des taux de cisaillement apparent à la paroi du canal de 4,6 à  $56 \text{ s}^{-1}$ . Les parois transparentes de la filière ont permis l'évaluation du profil de vitesse par vélocimétrie laser-Doppler et la mesure de biréfringence.

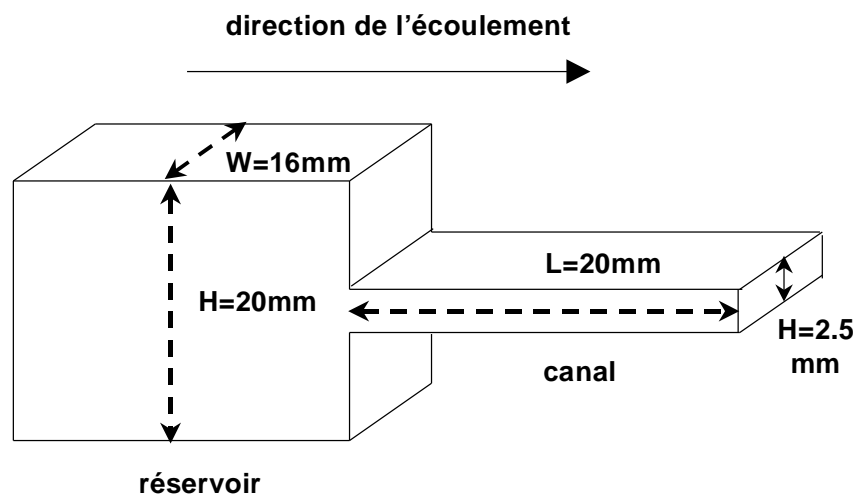
Pour la vélocimétrie laser-Doppler, nous avons utilisé le système bi faisceau Flow-lite de Dantec, version mono-dimensionnelle. La composante horizontale de la vitesse ( $u_x$ ) a été évaluée à six positions fixes en  $x$  (trois dans le réservoir et trois dans le canal) en fonction de  $y$ . Ces positions sont présentées au tableau suivant et à la figure 8. Seulement la moitié de la géométrie est montrée, étant donnée la symétrie de la filière par rapport à l'axe  $y$ . Pour les mesures de biréfringence, une source de lumière diffuse monochromatique de sodium a été utilisée. Deux plaques de quart d'onde ont été insérées de chaque côté de la filière afin d'obtenir uniquement les franges isochromatiques.

Position	Réservoir	Filière
1	-14 mm	2,0 mm
2	-6,5 mm	10,0 mm
3	-3,0 mm	17,0 mm

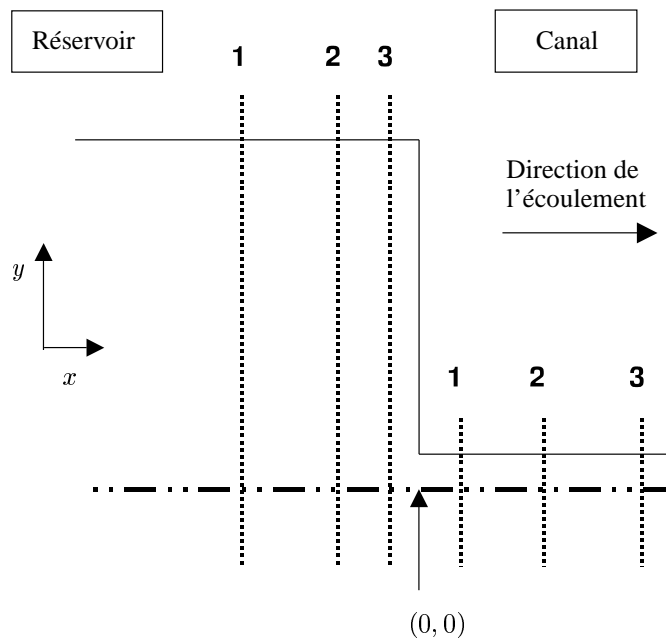
**Tableau 4.** Positions des mesures

### 6.2. Méthode numérique

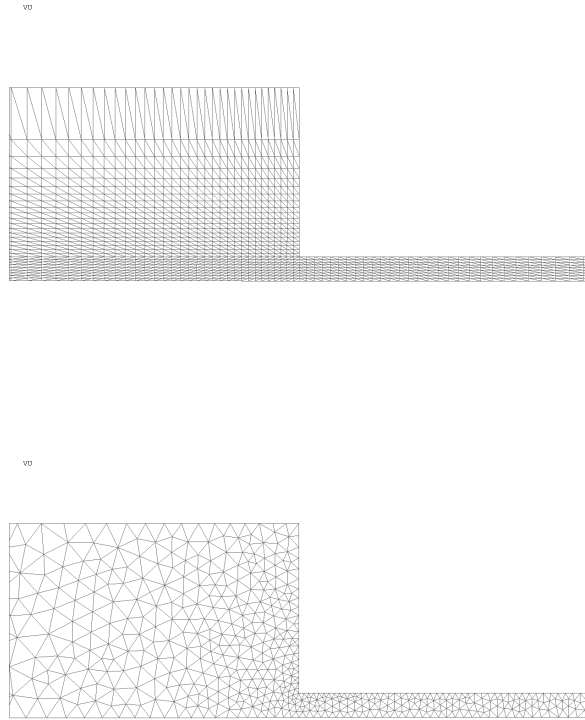
Nous avons utilisé deux maillages pour les simulations numériques de manière à nous assurer de l'indépendance des résultats sur la discrétisation. Les deux maillages



**Figure 7.** Contraction : réservoir et filière



**Figure 8.** Positions  $x$  des mesures dans le réservoir et la filière

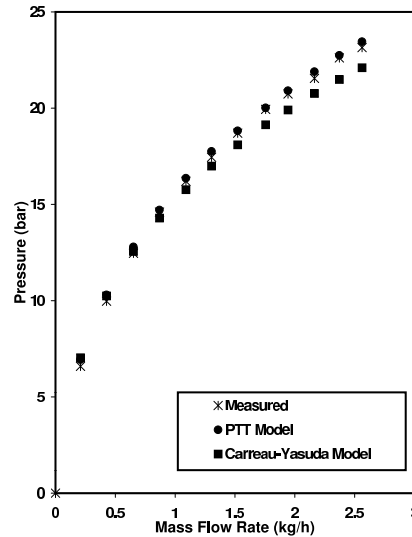


**Figure 9.** *Les maillages utilisés*

sont présentés à la figure 9 où l'on constate que l'un d'eux est structuré tandis que l'autre ne l'est pas. Les caractéristiques de ces maillages sont présentées au tableau suivant. On remarque que le maillage structuré est beaucoup plus fin que le maillage non structuré bien que ce dernier soit plus adéquat pour capter la zone de recirculation dans le coin supérieur droit du réservoir.

Maillage	PLAN1	PLAN2
Type	Non structuré	Structuré
Nombre d'éléments	1277	2976

**Tableau 5.** *Caractéristiques des maillages*



**Figure 10.** *Perte de charge mesurée et calculée*

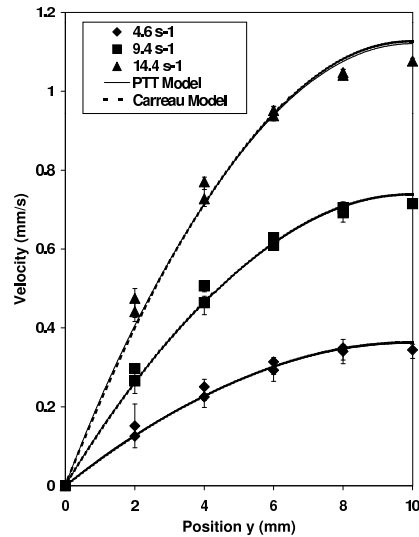
La simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques est souvent difficile en raison de problèmes de convergence des schémas numériques. Ces problèmes de convergence sont liés à la présence de points singuliers (le coin réentrant par exemple), à des maillages inappropriés, à des temps de relaxation très longs, etc. Nous avons cependant été en mesure d'obtenir des solutions convergentes pour tous les débits expérimentaux (12 au total).

### 6.3. *Perte de charge totale*

Pour chaque débit, la perte de charge totale calculée a été comparée à celle donnée par le capteur de pression situé dans le réservoir, près de la contraction. Cette perte de charge est définie par :

$$\Delta P_{\text{calculée}} = P_{\text{réservoir}} - P_{L=20\text{mm}}$$

où  $P_{\text{réservoir}}$  est la pression dans le réservoir et  $P_{L=20\text{mm}}$  est la pression en sortie de filière. Nous comparons à la figure 10 les résultats des simulations avec les mesures expérimentales. Les valeurs calculées à l'aide du modèle PTT surestiment légèrement les valeurs mesurées tandis que le modèle visqueux de Carreau-Yasuda les sous-estime légèrement à hauts taux de cisaillements. Les résultats sont cependant satisfaisants. Puisque l'écoulement est principalement en cisaillement, même le modèle visqueux donne des résultats acceptables.



**Figure 11.** Profil de vitesse dans le réservoir : position 1

#### 6.4. Mesures de vitesse

Les profils de vitesse dans le réservoir pour les trois débits les plus faibles, ainsi que les résultats numériques aux positions 1, 2 et 3 sont présentés aux figures 11-13. Nous présentons seulement les résultats obtenus avec le maillage PLAN1, puisque les résultats sur l'autre maillage sont similaires. Quand l'écoulement est principalement en cisaillement (position 1 dans le réservoir et pour les trois positions dans la filière), les deux modèles donnent de bons résultats sur les profils de vitesse. Par contre, quand l'écoulement devient élongationnel comme c'est le cas aux positions 2 et 3 dans le réservoir, les deux modèles diffèrent de manière significative. L'accord avec les mesures expérimentales est également moins convaincant. Il y a également plus de dispersion dans les résultats expérimentaux puisqu'une légère différence  $\Delta x$  sur la position entraîne une grande différence en vitesse. Il va de soi que le modèle de Carreau-Yasuda sous-estime les vitesses dans les régions où l'écoulement est élongationnel.

#### 6.5. Mesures de biréfringence

L'utilisation de la biréfringence pour déterminer les composantes du tenseur des contraintes repose sur la validité de la loi de sensibilité optique (voir Janeschitz et Kriegl [JAN 69]) qui s'écrit :

$$n_{ij} = C\tau_{ij}$$



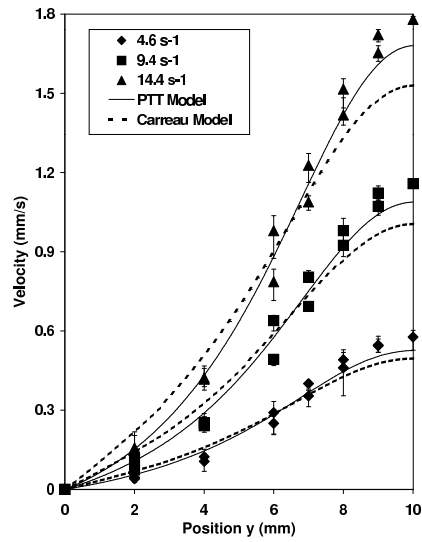


Figure 12. Profil de vitesse dans le réservoir : position 2

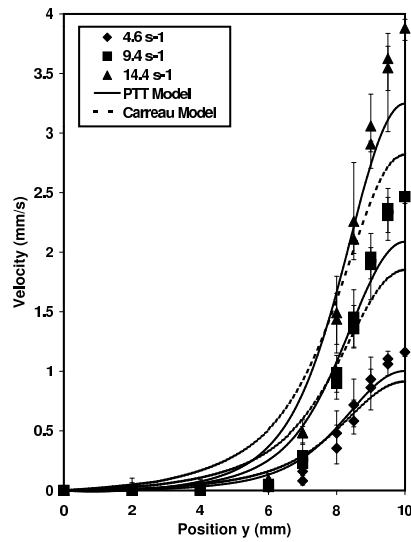
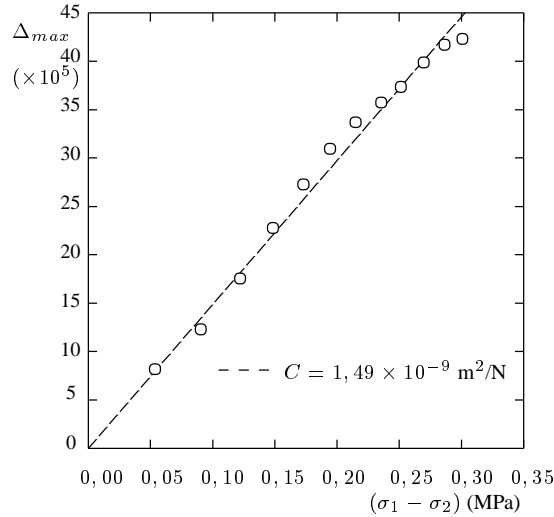


Figure 13. Profil de vitesse dans le réservoir : position 3

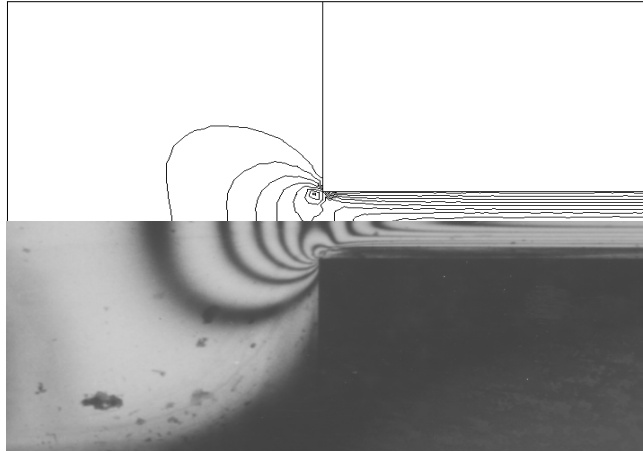


**Figure 14.** Relation entre  $((\sigma_1 - \sigma_2)_{calc})$  et  $\Delta_{max}$

où  $C$  est le coefficient de Brewster et  $n$  l'indice de réfraction. Pour comparer les franges de biréfringence expérimentales et celles calculées, on doit déterminer ce coefficient. On obtient une telle approximation en comparant les valeurs maximales de la première différence de contraintes normales calculée par éléments finis  $((\sigma_1 - \sigma_2)_{calc})$  avec la biréfringence maximale  $\Delta_{max}$  mesurée sur l'axe de symétrie. On détermine la biréfringence maximale  $\Delta_{max}$  en calculant le maximum de la spline passant par les données expérimentales correspondant aux différents débits. On obtient ainsi une relation linéaire entre  $((\sigma_1 - \sigma_2)_{calc})$  et  $\Delta_{max}$  telle qu'illustrée à la figure 14, ce qui démontre la validité de la loi et permet de déterminer  $C$  en calculant simplement la pente de cette courbe. Nous avons ainsi obtenu une valeur de  $1,49 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{N}$  pour le PEHD, valeur inférieure à celle reportée par Beraudo [BER 95] pour un PEBDL ( $2,1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{N}$ ), mais similaire à celle obtenue par Schoonen [SCH 98] ( $1,47 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{N}$ ) pour un polyéthylène basse densité.

On peut ensuite faire des comparaisons de deux types, l'une de nature qualitative et l'autre plus quantitative. Dans le cas qualitatif, la forme des franges de biréfringence et leurs positions relatives peuvent être comparées dans le domaine au complet. C'est ce que l'on peut voir sur les figures 15 et 16 pour les troisième et dernière valeurs de débits correspondant à des taux de cisaillement apparents ( $\dot{\gamma}_A$ ) respectifs de  $14,4 \text{ s}^{-1}$  et  $56,4 \text{ s}^{-1}$ . On ne présente ici que les résultats numériques obtenus avec le modèle PTT. On constate un bon accord qualitatif dans les deux cas. Ce modèle représente assez bien la forme et la position des franges à la fois dans le réservoir et la filière.

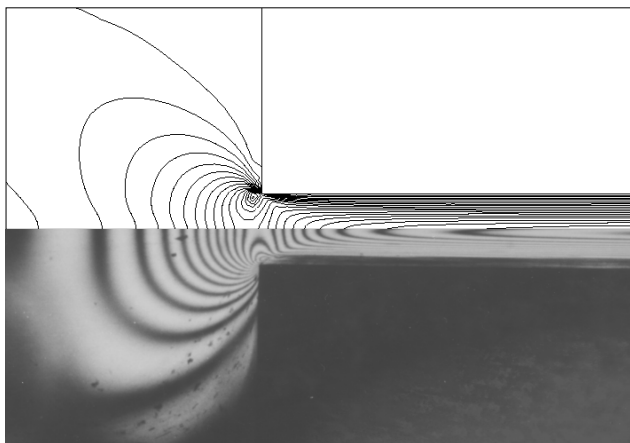
On peut comparer de manière plus quantitative en représentant les valeurs de biréfringence calculées et mesurées sur l'axe de symétrie. On présente les résultats à la



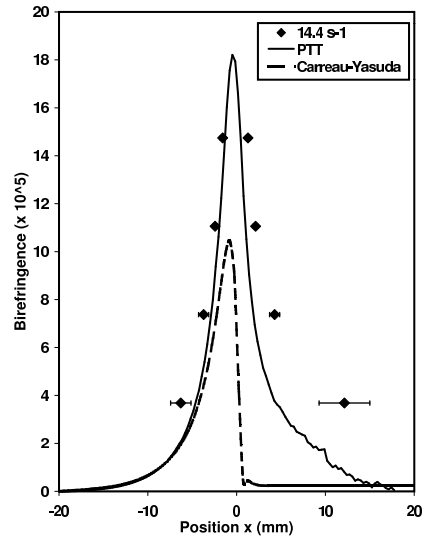
**Figure 15.** Franges de biréfringence :  $\dot{\gamma}_A = 14,4 \text{ s}^{-1}$

figure 17 pour le troisième débit. On constate immédiatement que le modèle purement visqueux ne peut pas modéliser la lente relaxation des contraintes près du point singulier et dans la filière. Le modèle PTT fait mieux, mais les contraintes relaxent trop vite dans la filière. La figure 18 illustre le cas du débit le plus élevé où l'on observe le même comportement.

On présente enfin à la figure 19 les résultats de biréfringence sur l'axe de symétrie calculés avec le spectre complet et le spectre tronqué. On ne remarque aucune

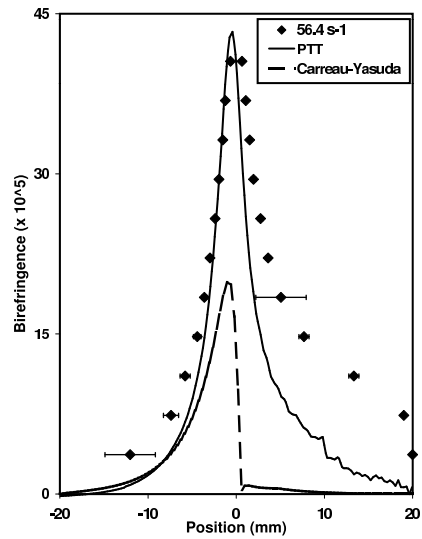


**Figure 16.** Franges de biréfringence :  $\dot{\gamma}_A = 56,4 \text{ s}^{-1}$

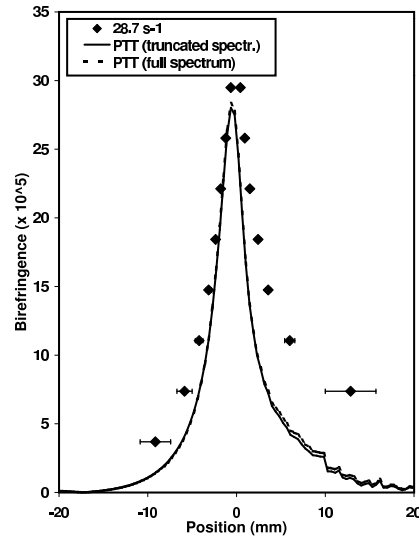


**Figure 17.** *Biréfringence sur l'axe de symétrie :  $\dot{\gamma}_A = 14,4 \text{ s}^{-1}$*

différence. Cela justifie l'utilisation d'un spectre tronqué qui rend les simulations numériques plus faciles en raison de temps de relaxation plus courts.



**Figure 18.** *Biréfringence sur l'axe de symétrie :  $\dot{\gamma}_A = 56,4 \text{ s}^{-1}$*



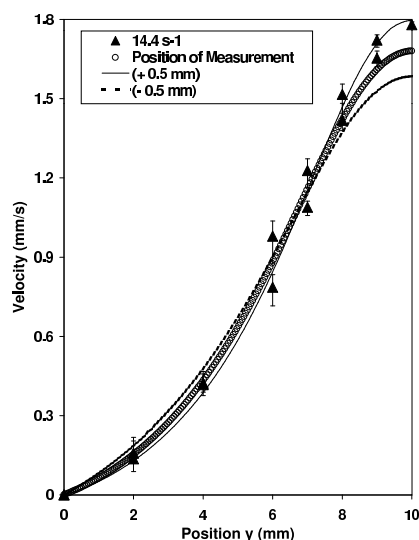
**Figure 19.** Biréfringence sur l'axe de symétrie :  $\dot{\gamma}_A = 28,7 \text{ s}^{-1}$  (spectres complet et tronqué)

## 6.6. Discussion

Les résultats des simulations dans la contraction abrupte sont bons dans l'ensemble, en particulier pour le modèle viscoélastique PTT. Les prédictions de perte de charge totale sont excellentes pour le modèle PTT, et adéquates pour le modèle de Carreau-Yasuda. Le modèle visqueux est aussi capable de donner de bonnes prédictions des vitesses, mais uniquement lorsque l'écoulement est principalement en cisaillement. Pour un écoulement de nature élongationnelle, le modèle viscoélastique est en meilleur accord avec les mesures expérimentales.

Remarquant les changements rapides de l'écoulement au voisinage de la contraction, nous avons procédé à une analyse de sensibilité pour évaluer l'effet d'un changement mineur  $\Delta x$  de la position  $x$  de mesure du champ de vitesse. Le champ de vitesse a donc été mesuré en prenant des écarts  $\Delta x = \pm 0,5 \text{ mm}$  de part et d'autre des positions 2 et 3 dans le réservoir. On constate aux figures 20 et 21 que les vitesses calculées sont maintenant en excellent accord avec les résultats numériques. Cela indique que les résultats numériques sont peut-être encore meilleurs que ce que l'on croyait au départ. Il semble qu'une toute petite erreur sur la position des mesures ait des conséquences importantes sur le champ de vitesse mesuré.

La relaxation trop rapide des contraintes prévue par le modèle PTT dans la filière a aussi été observée par Beraudo [BER 95] et Schoonen [SCH 98]. Il est difficile d'expliquer ce comportement. Le paramètre  $\epsilon$  qui contrôle l'élongation a été déterminé sur des mesures d'élongation uniaxiale et de plus, à de faibles taux d'élongation ( $\epsilon \leq 0,5 \text{ s}^{-1}$ ) alors que ce taux de déformation peut devenir beaucoup plus grand dans un

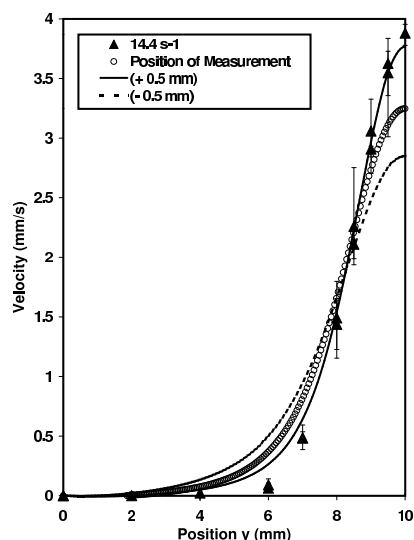


**Figure 20.** Profil de vitesse légèrement hors position: position 2 dans le réservoir

écoulement comme celui étudié ici. Par exemple, pour le plus haut taux de cisaillement apparent ( $56,4 \text{ s}^{-1}$ ), le taux d'élongation sur l'axe de symétrie atteignait une valeur de  $8 \text{ s}^{-1}$  près de la contraction. Malgré cette sous-estimation, le modèle viscoélastique demeure de beaucoup supérieur au modèle de Carreau-Yasuda pour la prédiction des contraintes dans la contraction.

## 7. Conclusions

Lors de cette étude, nous avons évalué la performance d'une loi de comportement viscoélastique différentielle, le modèle de Phan-Thien/Tanner, à l'aide de simulations par éléments finis. Les prédictions du modèle ont été confrontées aux données expérimentales pour l'écoulement d'un polyéthylène haute-densité dans une géométrie plane, la contraction abrupte 8:1. Ces résultats ont aussi été comparés aux prédictions obtenues à l'aide d'un modèle strictement visqueux, le modèle de Carreau-Yasuda. Nous avons comparé la perte de charge totale dans la filière, les profils de vitesse dans la direction de l'écoulement ainsi que la biréfringence. Les résultats des simulations montrent clairement que dans les écoulements élongationnels, la prise en compte de la viscoélasticité est absolument nécessaire même si pour des quantités globales comme la perte de charge, la différence entre les modèles visqueux et viscoélastique n'est pas très importante. Les résultats présentés soutiennent l'importance de l'utilisation de modèles viscoélastiques pour une représentation réaliste des procédés de transformation comportant des caractéristiques d'écoulement similaires.



**Figure 21.** Profil de vitesse légèrement hors position: position 3 dans le réservoir

Enfin, nous avons aussi démontré que la troncation des temps de relaxation du spectre discret est possible sans amoindrir les résultats, facilitant ainsi la convergence numérique. Les temps de calcul nécessaires aux simulations sont de cette manière considérablement diminués, quoique toujours plus considérables que pour les modèles visqueux

#### Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier le Conseil national de recherches en sciences naturelles et en génie du Canada pour son soutien financier. Nous sommes aussi très reconnaissants envers Lucia Gavrus, Bruno Vergnes et Jean-François Agassant du CE-MEF (Écoles des Mines de Paris) pour nous avoir permis d'utiliser leurs installations à Sophia-Antipolis en France, et pour leur assistance lors des mesures dans la contraction plane.

#### 8. Bibliographie

- [BAA 98] BAAIJENS, F.P.T., « Mixed Finite Element Methods for Viscoelastic Flow Analysis: a Review », *J. Non-Newt. Fl. Mech.*, vol. 79, p. 361-385, 1998.
- [BEA 89] BEAUFILS P., VERGNES B., AGASSANT J.F., « Characterization of the Sharkskin Defect and its Development with the Flow Conditions », *Int. Polym. Process.*, vol. IV(2), p. 78-84, 1989.

- [BER 95] BERAUDO C., Méthodes éléments finis pour la simulation numérique d'écoulements de fluides viscoélastiques de type différentiel dans des géométries convergentes, Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Sophia Antipolis, France, 1995.
- [BER 63] BERNSTEIN B., KEARSLEY E.A., ZAPAS L.J., *Trans. Soc. Rheol.*, vol. 7, p. 391-410, 1963.
- [BRE 91] BREZZI F., FORTIN M., *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, Series in Computational Mechanics, Springer, New York, 1991.
- [CAR 96] CARROT C., GUILLET J., REVENU P., ARSAC A., « Experimental Validation of Non Linear Network Models », dans *Rheology of Polymer Melt Processing*, J.M. Piau and J.-F. Agassant (eds.), Elsevier Science, Amsterdam, 1996.
- [CRO 84] CROCHET M.J., DAVIES A.R., WALTERS K., *Numerical Simulation of Non-Newtonian Flows*, Ed. Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [CRO 73] CROUZEIX M., RAVIART P.A., « Conforming and Non-Conforming Finite Element Methods for Solving the Stationary Stokes Equation », *RAIRO, Anal. Num.*, vol. 7, (R3), p. 33-76, 1973.
- [FOR 98] FORTIN A., BELIVEAU A., « Injection Molding for Charged Viscoelastic Fluid Flow Problems », *PPS-14*, p. 327-328, Yokohama, Japon, 1998.
- [FOR 00] FORTIN A., BELIVEAU A., HEUZEY M.C., LIORET A., « Ten Years Using Discontinuous Galerkin Method for Polymer Processing Problems », dans *Discontinuous Galerkin Methods, Theory, Computation and Applications*, Éditeurs: B. Cockburn, G.E. Karniadakis, C.-W. Shu, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, vol. 11, p. 321-326, Springer, 2000.
- [FOR 92] FORTIN A., ZINE A., « An Improved GMRES Method for Solving Viscoelastic Fluid Flow Problems », *J. Non-Newt. Fl. Mech.*, vol. 42, p. 1-18, 1992.
- [FOR 85a] FORTIN M., FORTIN A., « A Generalization of Uzawa's Algorithm for the Solution of Navier-Stokes Equations », *Comm. Appl. Num. Meth.*, vol. 1, p. 205-208, 1985.
- [FOR 85b] FORTIN M., FORTIN A., « Experiments with Several Elements for Viscous Incompressible Flows », *Int. J. Num. Meth. Fl.*, vol. .5, p.911-928, 1985.
- [FOR 87] FORTIN M., PIERRE R., « On the Convergence of the Mixed Method of Crochet and Marchal for Viscoelastic Flows », *Int. J. Numer. Methods Fl.*, vol. 7, p.1035-1052, 1987.
- [GIE 82] GEISEKUS H., « A Simple Constitutive Equation for Polymer Fluids Based on the Concept of Deformation Dependent Tensorial Mobility », *J. Non-Newt. Fl. Mech.*, vol. 11, p. 69-109, 1982.
- [GOR 72] GORDON R.J., SCHOWALTER W.R., *Trans. Soc. Rheol.*, vol. 16, p. 79, 1972.
- [GUE 95] GUENETTE R., FORTIN M., « A New Mixed Finite Element Method for Computing Viscoelastic Flows », *J. Non-Newt. Fl. Mech.*, vol. 60, p. 27-52, 1995.
- [GUE 00] GUENETTE R., FORTIN A., PIERRE R., « On the Discrete EVSS Method », *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. 189, no. 1, p. 121-139, 2000.



- [HEU 99] HEUZEY M.C., Barriers to Progress in the Simulation of Viscoelastic Flows of Molten Plastics, Thèse de doctorat, Université McGill, Montréal, Canada, 1999.
- [JAN 69] JANESCHITZ-KRIEGL H., « Flow Birefringence of Elastico-Viscous Polymer Systems », *Adv. Polym. Sci.*, vol. 6, p. 191-193, 1969.
- [KAY 62] KAYE A., « Non-Newtonian Flow in Incompressible Fluids », *College of Aeronautics*, Cranfield, Note No. 134, 1962.
- [LAR 88] LAESON R., *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*, Butterworths, Boston, 1988.
- [LAU 86] LAUN H.M., *J. Rheol.*, vol. 30, p. 459, 1986.
- [LEO 76] LEONOV A.I., « Nonequilibrium Thermodynamics and Rheology of Viscoelastic Polymer Media », *Rheol. Acta*, vol. 15, p. 85-98, 1976.
- [LES 74] LESAINT P., RAVIART P.A., « On a Finite Element Method for Solving the Neutron Transport Equations », dans *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, C. de Boor (ed.), Academic Press, New York, p. 89-123, 1974.
- [MCL 99] MCLEISH T., « Topology of Polymers: Entangled Dynamics and Melt Flow », dans *Chemical Topology: Introduction and Fundamentals*, D. Bonchev and D.H. Rouvray (eds.), Gordon and Breach Science Publishers, 1999.
- [ORB 91] ORBEY N., DEALY J.M., « Determination of the Relaxation Spectrum from Oscillatory Shear Data », *J. Rheol.*, vol. 35(6), p. 1035-1049, 1991.
- [OTT 95] ÖTTINGER H.C., *Stochastic Processes in Polymer Fluids*, Springer, Berlin, 1995.
- [PHA 77] PHAN-THIEN N., TANNER R.I., « A New Constitutive Equation Derived from Network Theory », *J. Non-Newt. Fl. Mech.*, vol. 2, p. 353-365, 1977.
- [SCH 98] SCHOONEN J.F.M., Determination of Rheological Constitutive Equations using Complex Flows, Thèse de doctorat, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, The Netherlands, 1998.
- [YAS 81] YASUDA K.Y., ARMSTRONG R.C., COHEN R.E., *Rheol. Acta*, vol. 20, p. 163, 1981.