



HAL
open science

Identification par analyse inverse du comportement mécanique des polymères solides : applications aux sollicitations multiaxiales et rapides

Yannick Tillier

► **To cite this version:**

Yannick Tillier. Identification par analyse inverse du comportement mécanique des polymères solides : applications aux sollicitations multiaxiales et rapides. Sciences de l'ingénieur [physics]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 1998. Français. NNT : . pastel-00001558

HAL Id: pastel-00001558

<https://pastel.hal.science/pastel-00001558>

Submitted on 10 Mar 2006

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

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

THESE

Présentée à

L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DES MINES DE PARIS

Par

Yannick TILLIER

Ingénieur IST

En vue de l'obtention du titre de

DOCTEUR EN SCIENCES ET GENIE DES MATERIAUX

**IDENTIFICATION PAR ANALYSE INVERSE DU
COMPORTEMENT MECANIQUE DES POLYMERES
SOLIDES ; APPLICATIONS AUX SOLLICITATIONS
MULTIAXIALES ET RAPIDES**

Soutenue le 09 mars 1998, devant le Jury composé de :

Messieurs	J.-M. HAUDIN	Président
	C. G'SELL	Rapporteur
	G. GARY	Rapporteur
	A. GAVRUS	Examineur
	E. GANDIN	Examineur
	Y. GERMAIN	Examineur
Mesdames	N. BILLON	Examineur
	E. MASSONI	Examineur

**IDENTIFICATION PAR ANALYSE
INVERSE DU COMPORTEMENT
MECANIQUE DES POLYMERES
SOLIDES ; APPLICATIONS AUX
SOLLICITATIONS MULTIAXIALES ET
RAPIDES**

par Yannick TILLIER

Directeurs de thèse : Docteur N. BILLON & Docteur E. MASSONI
CEMEF

Les constructeurs de structures polymères doivent leur assurer la tenue que leur utilisation impose (résistance au choc). De façon à remplacer les tests « vraie matière / vraie grandeur » coûteux et laborieux, il est courant d'utiliser des codes de simulation numériques, qui requièrent toutefois l'utilisation de lois de comportement fiables.

Le premier chapitre, consacré à l'établissement d'un bilan des lois de comportement les plus aptes à reproduire le comportement global des polymères solides, est suivi d'une étude des méthodes classiquement employées pour dépouiller les essais rhéologiques. Trois polymères différents (un polyéthylène semi-cristallin, un polycarbonate amorphe et un polypropylène copolymère) sont testés afin d'établir une certaine typologie de leurs réponses. Il en ressort que les hypothèses inhérentes aux méthodes de dépouillement analytiques ne sont valables que dans un domaine restreint de sollicitations (basses vitesses, sollicitations uniaxiales ...). La méthode d'identification par analyse inverse envisagée dans le chapitre III permet d'éviter la formulation d'hypothèses trop fortes. Elle repose sur l'utilisation d'un logiciel de simulation thermomécanique par éléments finis des essais rhéologiques, auquel est couplé un module d'optimisation (basé sur la méthode itérative de Gauss-Newton). Les paramètres sont obtenus en minimisant l'écart entre le calcul et l'expérience (fonction « coût »). Après une validation numérique (chapitre IV) de l'algorithme de minimisation utilisé (convergence et stabilité), la technique décrite est finalement appliquée avec succès à chacun des polymères étudiés (chapitre V), dans le cas d'essais de traction « moyennes vitesses ». L'écart entre les observables expérimentales et simulées diminue sensiblement par rapport aux méthodes de dépouillement classiques. L'emploi d'une fonction coût mixte (force + diamètre) permet en outre d'identifier simultanément la rhéologie en traction d'un polypropylène et le coefficient

tribologique caractérisant le glissement des éprouvettes dans les mors. Le logiciel met également en évidence les limites de la loi de comportement utilisée en traction, dans le cas d'essais multiaxiaux. Moyennant une modification de la loi, l'analyse inverse rend possible l'identification du comportement au choc du polymère à partir d'essais de poids tombant instrumenté. La possibilité d'extrapoler le comportement à d'autres conditions opératoires fait de ce logiciel un outil prédictif.

TABLE DES MATIERES

Introduction générale

Chapitre 1

Bibliographie : Les lois de comportement applicables aux polymères solides

1	Introduction	7
2	Généralités	9
3	Etude des polymères solides amorphes et semi-cristallins	11
3.1	Caractéristiques générales	11
3.2	La viscoélasticité	13
3.2.1	Lois de comportement à une dimension	14
3.2.2	Lois de comportement tensorielles	17
3.3	La limite élastique	18
3.3.1	Modélisations du comportement viscoplastique	19
3.3.2	Les critères de plasticité	32
3.4	L'écrouissage	38
3.4.1	Présentation	38
3.4.2	Modélisation de l'écrouissage	40
3.5	Lois de comportements « globales »	42
3.5.1	Introduction	42
3.5.2	Les lois de comportement « multiplicatives » unidimensionnelles	43
3.5.3	Les lois de comportement « additives » unidimensionnelles	46
3.5.4	Les lois de comportement « différentielles » unidimensionnelles	48
3.5.5	Généralisation tridimensionnelle des lois de comportement viscoplastiques	51
4	Conclusion	51

Chapitre 2

Essais rhéologiques et identifications classiques

1	Introduction	59
2	Matériaux utilisés	60
2.1	Polycarbonate	60
2.2	Polyéthylène	61
2.3	Polypropylène	62
3	Etudes expérimentales et identification des lois	63
3.1	Choix des différentes sollicitations	63
3.2	Etude thermique	63
3.2.1	Thermographie infrarouge d'un essai de traction	64
3.2.2	Résultats	65

3.3	L'essai de torsion	72
3.3.1	Instrumentation	72
3.3.2	Conditions opératoires	73
3.3.3	Dépouillement des essais de torsion	74
3.4	L'essai de Traction	82
3.4.1	Instrumentation	82
3.4.2	Principes de dépouillement des essais de traction	86
3.4.3	Traction « basses vitesses »	90
3.4.4	Traction « moyennes vitesses »	97
3.5	Essais d'impact multiaxial	108
3.5.1	Instrumentation	108
3.5.2	Principe de dépouillement des essais d'impact multiaxial	109
3.5.3	Conditions opératoires	111
3.5.4	Résultats	113
4	Conclusion	114

<p>Chapitre 3 <i>Identifications par méthodes inverses</i></p>

1	Introduction	119
2	Généralités	121
3	Identification des paramètres rhéologiques par analyse inverse	122
3.1	Choix de la fonction objectif	123
3.2	Généralités sur les algorithmes d'optimisation	125
3.3	Les méthodes de type gradient	126
3.3.1	Méthode de la plus grande pente	127
3.3.2	Algorithme du gradient conjugué	127
3.3.3	Algorithmes d'ordre deux : méthode de Newton	128
3.3.4	Méthodes spécifiques aux formulations de type « moindres carrés »	128
3.4	Traitement des contraintes	141
3.5	Algorithmes de recherche linéaire	142
3.5.1	La méthode de la section d'or	142
3.5.2	La méthode de l'interpolation parabolique	143
3.5.3	Critères d'arrêt	143
4	Conclusion	144

<p>Chapitre 4 <i>Identification des paramètres rhéologiques par l'analyse inverse d'un modèle éléments finis</i></p>

1	Introduction	149
1.1	La symétrie	150
1.2	Le cadre général de la loi de comportement	151
1.3	Les effets thermiques	151
1.4	Expérimental	152
2	Présentation des problèmes à résoudre	153
2.1	Formulation continue du problème mécanique	153
2.1.1	Les équations d'équilibre	154

2.1.2	Loi de frottement	158
2.2	Formulation continue du problème thermique	160
2.3	Synthèse sur la résolution du modèle direct	162
2.4	Présentation de FORGE2®	163
2.4.1	Formulation en vitesse	164
2.4.2	Discretisation par éléments finis	165
3	Validation du modèle direct	176
3.1	Validation mécanique	177
3.2	Validation thermique	179
4	Présentation du modèle inverse	183
5	Validation de l'algorithme de minimisation	189
5.1	Création de l'espace « expérimental » artificiel	190
5.2	Test de convergence	191
5.3	Test de stabilité	194
5.4	Influence de l'espace expérimental	196
5.5	Influence du maillage	198
6	Conclusions	199

Chapitre 5

Applications : de l'uniaxial au multiaxial ...

1	Introduction	203
2	Identification des coefficients d'un polyéthylène sollicité en traction	203
2.1	Caractéristiques du modèle direct utilisé	203
2.2	Résultats	204
3	Identification des paramètres rhéologiques du polypropylène	207
3.1	Préambule	207
3.2	Test de traction	209
3.3	Test de poinçonnement	214
3.4	Test de Poids Tombant Instrumenté	217
4	Conclusion	221

Chapitre 6

Perspectives

1	Introduction	225
2	Calcul de sensibilité par dérivations analytiques	225
3	Autres sollicitations	231

Conclusion générale

Annexe 1

Détermination du coefficient de transfert thermique global entre un matériau et son milieu environnant

1	<i>Introduction</i>	239
2	<i>Calcul du coefficient de transfert thermique global</i>	239
2.1	<i>Calcul du coefficient de transfert thermique par convection (h_c)</i>	239
2.2	<i>Calcul du coefficient de transfert thermique par rayonnement (h_r)</i>	241

Annexe 2

Comparaison de deux maillages sur l'évolution thermique d'une éprouvette de polycarbonate

Annexe 3

Application d'un logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur à l'essai de torsion sur les polymères

1	<i>Spécificités de TORRAO</i>	245
2	<i>Dépouillement de l'essai de torsion à l'aide de TORRAO</i>	246

TABLE DES ILLUSTRATIONS

<i>Numéro</i>	<i>Page</i>
FIGURE I - 1 : EVOLUTION DE LA CONTRAINTE NOMINALE ET DE LA CONTRAINTE VRAIE POUR LES MÉTAUX ET LES POLYMÈRES [8].....	10
FIGURE I - 2 : COURBES CONTRAINTE VRAIE - DÉFORMATION VRAIE DE DIVERS POLYMÈRES OBTENUES À 25 °C AVEC LA MÉTHODE VIDÉOMÉTRIQUE [8].....	11
FIGURE I - 3 : EVOLUTIONS TYPIQUES DE LA CONTRAINTE VRAIE EN FONCTION DE LA DÉFORMATION VRAIE POUR UN POLYMÈRE AMORPHE (1) ET POUR UN POLYMÈRE SEMI-CRISTALLIN (2).....	13
FIGURE I - 4 : DIFFÉRENTS MODÈLES ANALOGIQUES UNIAxiaux.....	15
FIGURE I - 5 : COMPORTEMENTS TYPIQUES DES POLYMÈRES.....	18
FIGURE I - 6 : CONFORMATIONS <i>CIS</i> ET <i>TRANS</i> DU MODÈLE DE ROBERTSON.....	21
FIGURE I - 7 : BOUCLES DE DÉSINCLINAISON DU MODÈLE D'ARGON.....	23
FIGURE I - 8 : REPRÉSENTATION DE LA GERMINATION (A), DE L'EXPANSION (B) ET DE LA COALESCENCE (C) DES MICRO-DOMAINES CISAILLÉS [38].....	26
FIGURE I - 9 : MODÈLE RHÉOLOGIQUE DES POLYMÈRES VITREUX [].....	28
FIGURE I - 10 : COMPARAISON DES COURBES EXPÉRIMENTALES CONTRAINTE ÉQUIVALENTE – DÉFORMATION ÉQUIVALENTE (AU SENS DE VON MISES) DU PEEK À 180 °C (EN POINTILLÉ), AVEC CELLES CALCULÉES PAR UN MODÈLE PRENANT EN COMPTE LES COMPORTEMENTS RESPECTIFS DES PHASES CRISTALLINE ET AMORPHE (TRAIT PLEIN) [].....	31
FIGURE I - 11 : REPRÉSENTATION [] DES CRITÈRES DE TRESCA ET DE VON MISES SOUS LA FORME (A) D'UNE SECTION DE NORMALE [111] ET (B) D'UNE SECTION DANS LE PLAN (σ_I, σ_{II}).....	35
FIGURE I - 12 : ALLURE DE L'ELLIPSE DE VON MISES EN CONTRAINTES PLANES LORSQUE LA DÉFORMATION AUGMENTE.....	36
FIGURE I - 13 : COMPARAISON DES CONTRAINTES AXIALES EN TRACTION ET COMPRESSION POUR UN POLYCARBONATE À 10^{-4} s^{-1} [47].....	37
FIGURE I - 14 : CRITÈRES DE PLASTICITÉ DE VON MISES MODIFIÉ [50].....	38
FIGURE I - 15 : MODÈLES DE RÉSEAU. (A) MODÈLE À TROIS SOUS-CHAÎNES. (B) MODÈLE À HUIT SOUS-CHAÎNES. (C) MODÈLE À SOUS-CHAÎNES MULTIPLES. (D) <i>APRÈS</i> [40].....	40
FIGURE I - 16 : SCHÉMA DU MODÈLE DE HAWARD ET THACKRAY ET COURBE CONTRAINTE VRAIE – DÉFORMATION VRAIE MONTRANT LES DIFFÉRENTES CONTRIBUTIONS DE CHAQUE ÉLÉMENT [].....	41
FIGURE I - 17 : EVOLUTION CARACTÉRISTIQUE DES DIFFÉRENTS TERMES ENTRANT DANS LA COMPOSITION DE LA LOI DE G'SELL.....	45
FIGURE I - 18 : DÉCOMPOSITION DE LA CONTRAINTE D'ÉCOULEMENT DU PMMA VITREUX EN UNE COMPOSANTE D'ACTIVATION σ^* ET UNE COMPOSANTE ORIENTATIONNELLE σ_r (D'APRÈS []).....	46
FIGURE I - 19 : (A) VITESSE DE DÉFORMATION TOTALE EN FONCTION DE LA DÉFORMATION LORS D'UN ESSAI DE TRACTION À VITESSE DE DÉFORMATION CONSTANTE, (B) DÉPENDANCE LINÉAIRE DE LA DENSITÉ DE DÉFAUTS EN FONCTION DE LA DÉFORMATION. EVOLUTION DE LA CONTRAINTE EFFECTIVE EN FONCTION DE LA DÉFORMATION POUR : (C) UN POLYMÈRE RIGIDE-PLASTIQUE, (D) UN POLYMÈRE ÉLASTOPLASTIQUE (D'APRÈS [7]).....	50
FIGURE II - 1 : DÉTERMINATION DE LA TEMPÉRATURE DE FUSION DU POLYÉTHYLÈNE PAR DSC.....	61
FIGURE II - 2 : SCHÉMA D'UN ESSAI DE TRACTION COUPLÉ À UN DISPOSITIF DE THERMOGRAPHIE INFRAROUGE.....	65
FIGURE II - 3 : CLICHÉS OBTENUS À L'AIDE DU DISPOSITIF DE THERMOGRAPHIE INFRAROUGE, À DIFFÉRENTS INSTANTS DE LA TRACTION D'UNE ÉPROUVETTE EN <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (VITESSE DE TRAVERSE DE 10 MM/MIN) : (A) AU COURS DE LA PREMIÈRE MINUTE (B), UNE MINUTE PLUS TARD (C), À LA RUPTURE (D) ; INCIDENCE DE LA CAMÉRA PAR RAPPORT À L'ÉPROUVETTE.....	66
FIGURE II - 4 : CLICHÉ (A) OBTENU APRÈS ROTATION DES EXTRÉMITÉS ROMPUES FACE À LA CAMÉRA ; INCIDENCE DE LA CAMÉRA PAR RAPPORT À L'ÉPROUVETTE (B).....	67
FIGURE II - 5 : EVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE DANS LE CAS DU <u>POLYCARBONATE</u> (A) ET DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (B) POUR TROIS VITESSES DE TRAVERSES DIFFÉRENTES (10, 30 ET 100 MM/MIN).....	67
FIGURE II - 6 : SCHÉMA DU PRINCIPE DE DÉPOUILLEMENT UTILISÉ POUR DÉTERMINER LA TEMPÉRATURE À CŒUR À L'INSTANT DE LA RUPTURE.....	68
FIGURE II - 7 : EVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE À CŒUR APRÈS RUPTURE (PHASE DE REFROIDISSEMENT) ET EXTRAPOLATION DE LA TEMPÉRATURE À RUPTURE DANS LE CAS (A) DU <u>POLYCARBONATE</u> ET (B) DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u>	68
FIGURE II - 8 : COMPARAISON DE L'AUTOÉCHAUFFEMENT MAXIMAL (EXTRAPOLÉ) ATTEINT AU CŒUR DES ÉPROUVETTES DE <u>POLYCARBONATE</u> ET DE <u>POLYÉTHYLÈNE</u>	69
FIGURE II - 9 : SUPERPOSITION DES ÉVOLUTIONS MÉCANIQUES ET THERMIQUES DANS LE CAS DU <u>POLYCARBONATE</u> (A) ET DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (B) POUR UNE MÊME VITESSE DE TRACTION (10 MM/MIN).....	69
FIGURE II - 10 : COMPARAISON DES COURBES CONTRAINTE VRAIE – DÉFORMATION VRAIE POUR UNE MÊME VITESSE DE DÉFORMATION FAIBLE ET CONSTANTE (10^{-3} s^{-1}), POUR LE <u>POLYCARBONATE</u> ET LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u>	71
FIGURE II - 11 : EVOLUTION DE (A) LA CONTRAINTE VRAIE EN FONCTION DE LA DÉFORMATION VRAIE ET (B) DE LA DÉFORMATION VRAIE EN FONCTION DU TEMPS POUR LE <u>POLYCARBONATE</u> ET LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> POUR UN ESSAI DE TRACTION MENÉ À VITESSE DE TRAVERSE CONSTANTE ET ÉGALE À 5 MM/MIN.....	71
FIGURE II - 12 : PROFIL ET DIMENSIONS D'UNE ÉPROUVETTE DE TORSION.....	73
FIGURE II - 13 : SEULE LA ZONE DESSINÉE EN TRAIT CONTINU EST PRISE EN COMPTE POUR L'IDENTIFICATION DE L'ESSAI DE TORSION.....	74
FIGURE II - 14 : DÉFINITION DES AXES DANS LE CAS DE L'ESSAI DE TORSION.....	74
FIGURE II - 15 : RÉSULTATS DU DÉPOUILLEMENT PAR LA MÉTHODE DE FIELDS & BACKOFEN POUR LA LOI DE NORTON-HOFF (IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DU <u>POLYCARBONATE</u> EN TORSION POUR TROIS VITESSES DE ROTATION – 10^{-4} , 10^{-3} ET 10^{-2} s^{-1} - ET UNE TEMPÉRATURE – 23 °C).....	77
FIGURE II - 16 : RÉSULTATS DU DÉPOUILLEMENT PAR LA MÉTHODE DE FIELDS & BACKOFEN POUR LA LOI DE G'SELL (IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DU <u>POLYCARBONATE</u> EN TORSION POUR TROIS VITESSES DE ROTATION – 10^{-4} , 10^{-3} ET 10^{-2} s^{-1} - ET UNE TEMPÉRATURE – 23 °C).....	78
FIGURE II - 17 : EVOLUTION DE LA GÉOMÉTRIE DE L'ÉPROUVETTE AU COURS DE L'ESSAI DE TORSION (<u>POLYÉTHYLÈNE</u>).....	79
FIGURE II - 18 : DÉPOUILLEMENT DE L'ESSAI DE TORSION (<u>POLYCARBONATE</u>) PAR LA MÉTHODE DE FIELDS & BACKOFEN AVEC PRISE EN COMPTE DE LA GÉOMÉTRIE AU COURS DU TEMPS. LES VITESSES SONT IDENTIQUES À CELLES DE LA FIGURE II - 16.....	79
FIGURE II - 19 : SCHÉMA DU PRINCIPE DU SYSTÈME « VIDÉOTRACTION ».....	82

FIGURE II - 20 : GÉOMÉTRIE DES ÉPROUVETTES OBTENUES À PARTIR DE JONCS EXTRUDÉS (DE TYPE « SABLIER » (A) ET CYLINDRIQUES (B)), À PARTIR DE PLAQUES INJECTÉES (C).....	84
FIGURE II - 21 : DÉFINITION DES AXES DANS LE CAS DU DÉPOUILLEMENT ANALYTIQUE DE L'ESSAI DE VIDÉOTRACTION.....	87
FIGURE II - 22 : COURBES CONTRAINTE VRAIE <i>1/3</i> DÉFORMATION VRAIE - DIFFÉRENCES DE COMPORTEMENT ENTRE LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (A), LE <u>POLYCARBONATE</u> (B) ET LE <u>POLYPROPYLENE</u> (C) AUX BASSES VITESSES ET COMPORTEMENT DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u> AUX FAIBLES DÉFORMATIONS (D).....	92
FIGURE II - 23 : RÉSULTATS DU DÉPOUILLEMENT ANALYTIQUE POUR LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (A) ET POUR LE <u>POLYPROPYLENE</u> (B).....	94
FIGURE II - 24 : COMPARAISON ENTRE LES RÉSULTATS OBTENUS EN TRACTION AVEC EXTENSOMÈTRES SUR LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> ET LA LOI DE COMPORTEMENT POLYMÈRE SOLIDE IDENTIFIÉE APRÈS TRAITEMENT ANALYTIQUE DES DONNÉES EXPÉRIMENTALES DE VIDÉOTRACTION « BASSES VITESSES ».....	94
FIGURE II - 25 : RÉSULTATS DU DÉPOUILLEMENT ANALYTIQUE POUR LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> AVEC PRISE EN COMPTE DE LA THERMODÉPENDANCE.....	95
FIGURE II - 26 : ÉVOLUTION DU TERME DE DURCISSEMENT DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u> AVEC LA TEMPÉRATURE.....	96
FIGURE II - 27 : ÉVOLUTION DES PARAMÈTRES RHÉOLOGIQUES EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE (<u>POLYÉTHYLÈNE</u>) – R EST LE COEFFICIENT DE CORRÉLATION CORRESPONDANT AUX ÉQUATIONS DE DÉPENDANCE EN TEMPÉRATURE.....	96
FIGURE II - 28 : COURBES CONTRAINTE VRAIE <i>1/3</i> DÉFORMATION VRAIE ISSUES DES EXPÉRIENCES DE VIDÉOTRACTION À VITESSE DE TRAVERSE CONSTANTE POUR LE <u>POLYCARBONATE</u> (23 °C) ET POUR LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> (23 °C).....	99
FIGURE II - 29 : COURBES (CONTRAINTE VRAIE <i>1/3</i> DÉFORMATION) VRAIE ISSUES DES EXPÉRIENCES DE VIDÉOTRACTION À VITESSE DE TRAVERSE CONSTANTE POUR LE <u>POLYPROPYLENE</u> ET POUR 3 TEMPÉRATURES.....	99
FIGURE II - 30 : MISE EN ÉVIDENCE DE LA THERMODÉPENDANCE DU DURCISSEMENT STRUCTURAL DU <u>POLYPROPYLENE</u>	100
FIGURE II - 31 : ÉVOLUTION DE LA VITESSE DE DÉFORMATION GÉNÉRALISÉE EN FONCTION DU TEMPS ET DE LA TEMPÉRATURE (<u>POLYPROPYLENE</u>).....	100
FIGURE II - 32 : ÉVOLUTION DU DIAMÈTRE MINIMAL DES ÉPROUVETTES « SABLIER » EN FONCTION DU TEMPS ET DE LA TEMPÉRATURE (<u>POLYPROPYLENE</u>).....	101
FIGURE II - 33 : SENSIBILITÉ DU DIAMÈTRE MINIMAL DES ÉPROUVETTES VIS-À-VIS DES PARAMÈTRES RHÉOLOGIQUES.....	103
FIGURE II - 34 : SENSIBILITÉ DE LA FORCE VIS-À-VIS DES PARAMÈTRES RHÉOLOGIQUES.....	105
FIGURE II - 35 : COMPARAISON ENTRE ESSAIS DE TRACTION « MOYENNES VITESSES » (0,5 2,5 ET 10 MM/MIN) ET SIMULATIONS AVEC LES PARAMÈTRES « BASSES VITESSES » (<u>POLYÉTHYLÈNE</u>).....	106
FIGURE II - 36 : COMPARAISON ENTRE EXPÉRIENCES (TRACTION « MOYENNES VITESSES ») ET SIMULATIONS (PARAMÈTRES RHÉOLOGIQUES IDENTIFIÉS EN TRACTION « MOYENNES VITESSES ») (<u>POLYÉTHYLÈNE</u>).....	107
FIGURE II - 37 : PRINCIPE D'UN TEST D'IMPACT MULTIAxiaL.....	111
FIGURE II - 38 : SIMULATION DES ESSAIS DE POINÇONNEMENT SUR DES PLAQUES DE <u>POLYPROPYLENE</u> DE 2 MM D'ÉPAISSEUR AVEC LES COEFFICIENTS DE TRACTION « BASSES VITESSES ».....	113
FIGURE II - 39 : SIMULATION DES ESSAIS DE POIDS TOMBANT INSTRUMENTÉ SUR DES PLAQUES DE <u>POLYPROPYLENE</u> DE 5 MM D'ÉPAISSEUR AVEC LES COEFFICIENTS DE TRACTION « BASSES VITESSES ».....	113
FIGURE III - 1 : COMPARAISON DES MODÈLES DIRECT ET INVERSE.....	121
FIGURE III - 2 : REPRÉSENTATION SCHEMATIQUE DU MODÈLE DIRECT DANS LE CAS D'UN TEST RHÉOLOGIQUE.....	138
FIGURE IV - 1 : CONFIGURATION MÉCANIQUE D'UN SYSTÈME PIÈCE-OUTIL (A) – APPLICATION À UNE ÉPROUVETTE (B) DE TRACTION ET (C) D'IMPACT.....	154
FIGURE IV - 2 : CONTACT MATIÈRE-OUTIL.....	159
FIGURE IV - 3 : CONFIGURATION THERMIQUE D'UN SYSTÈME PIÈCE-OUTIL.....	160
FIGURE IV - 4 : ÉLÉMENTS 2D ISOPARAMÉTRIQUES DE TYPE P2P0.....	166
FIGURE IV - 5 : ÉLÉMENT DE CLASSE C ⁰ [].	167
FIGURE IV - 6 : SCHEMA DE CRANK-NICHOLSON.....	174
FIGURE IV - 7 : ALGORITHME DU SOLVEUR DE FORGE2®.....	175
FIGURE IV - 8 : COMPARAISON DES FORCES EXPÉRIMENTALES ET SIMULÉES À L'AIDE DE FORGE2® POUR LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> ET LE <u>POLYCARBONATE</u> (ESSAIS À VITESSE DE TRAVERSE CONSTANTE).....	178
FIGURE IV - 9 : COMPARAISON DES PROFILS EXPÉRIMENTAUX (¹) ET SIMULÉS (²) POUR UN ESSAI DE TRACTION À 30 MM/MIN SUR DU <u>POLYCARBONATE</u>	179
FIGURE IV - 10 : ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE SIMULÉE POUR UN ESSAI DE TRACTION SUR DU <u>POLYCARBONATE</u> À 30 MM/MIN.....	179
FIGURE IV - 11 : LA SIMULATION RÉVÈLE LA PRÉSENCE D'UN GRADIENT THERMIQUE DE 4°C À L' « INSTANT DE LA RUPTURE » LORS DE L'ÉTRAGE D'UN <u>POLYCARBONATE</u> À 30 MM/MIN.....	180
FIGURE IV - 12 : INFLUENCE DU COEFFICIENT D'ÉCHANGE THERMIQUE GLOBAL SUR L'ÉVOLUTION DE LA TEMPÉRATURE (TRACTION DU <u>POLYCARBONATE</u> À 100 MM/MIN).....	182
FIGURE IV - 13 : SCHEMA D'IDENTIFICATION GLOBAL.....	183
FIGURE IV - 14 : DIDACTICIEL SUR L'ALGORITHME DE MINIMISATION.....	184
FIGURE IV - 15 : ALGORITHME DE MINIMISATION « OPTIMISÉ ».....	188
FIGURE IV - 16 : PRINCIPE D'ÉTUDE DE LA CONVERGENCE D'UN LOGICIEL D'IDENTIFICATION.....	189
FIGURE IV - 17 : ÉVOLUTION DE LA FONCTION COÛT AU COURS DES ITÉRATIONS D'IDENTIFICATION.....	192
FIGURE IV - 18 : ÉVOLUTION DES PARAMÈTRES AU COURS DE L'IDENTIFICATION.....	192
FIGURE IV - 19 : RÉSULTAT DU TEST DE CONVERGENCE EN TERMES D'ÉVOLUTION DE LA FORCE EN FONCTION DU DÉPLACEMENT.....	193
FIGURE IV - 20 : RÉSULTAT DU TEST DE STABILITÉ POUR UNE PERTURBATION DE L'ESPACE EXPÉRIMENTAL DE L'ORDRE DE 3 % ET POUR TROIS VITESSES DE TRACTION (20, 50 ET 100 MM/MIN).....	195
FIGURE IV - 21 : RÉSULTAT DU TEST DE STABILITÉ POUR UNE PERTURBATION DE L'ESPACE EXPÉRIMENTAL DE L'ORDRE DE 10 % ET POUR TROIS VITESSES DE TRACTION (20, 50 ET 100 MM/MIN).....	195
FIGURE IV - 22 : (A) MAILLAGE AYANT SERVI À L'IDENTIFICATION – (B) MAILLAGE AYANT SERVI À LA CRÉATION DE L'ESPACE EXPÉRIMENTAL.....	198
FIGURE V - 1 : MAILLAGE D'UN QUART DE LA PARTIE UTILE DE L'ÉPROUVETTE ; LES OUTILS SONT « ACCOLÉS » À LA PARTIE UTILE.....	204
FIGURE V - 2 : COMPARAISON DES COURBES OBTENUES PAR DÉPOUILLEMENTS CLASSIQUES (DES COURBES « MOYENNES VITESSES ») ET PAR R.A.O. POUR DES ESSAIS DE TRACTION « MOYENNES VITESSES » (2,5, 5 ET 10 MM/MIN) SUR DU <u>POLYÉTHYLÈNE</u> À 23°C.....	205
FIGURE V - 3 : RÉSULTATS DE SIMULATIONS INITIALISÉES AVEC DES PARAMÈTRES IDENTIFIÉS PAR R.A.O. À L'AIDE D'UNE FONCTION COÛT MIXTE : (A) FORCE <i>1/3</i> DÉPLACEMENT ET (B) RAYON <i>1/3</i> DÉPLACEMENT (<u>POLYÉTHYLÈNE</u>).....	207
FIGURE V - 4 : CONFIGURATION DE L'ÉPROUVETTE UTILISÉE POUR L'IDENTIFICATION DU TEST DE TRACTION.....	209
FIGURE V - 5 : COMPARAISON DE LA PENTE INITIALE ENTRE LE <u>POLYÉTHYLÈNE</u> ET LE <u>POLYPROPYLENE</u>	210
FIGURE V - 6 : ÉVOLUTION DE LA FORCE AU COURS DES ITÉRATIONS D'OPTIMISATION.....	211
FIGURE V - 7 : ÉVOLUTION DU RAYON MINIMAL AU COURS DES ITÉRATIONS D'OPTIMISATION.....	211

FIGURE V - 8 : COMPARAISON DES EXPÉRIENCES DE TRACTION AVEC ET SANS GLISSEMENT DES ÉPROUVETTES DE POLYPROPYLENE DANS LES MORS.....	213
FIGURE V - 9 : IDENTIFICATION DES COEFFICIENTS DU POLYPROPYLENE EN TRACTION (0,5, 2,5 ET 10 MM/MIN) SUR LA BASE D'ESSAIS « PROPRES » (SANS GLISSEMENT DANS LES MORS) À TEMPÉRATURE AMBIANTE.....	213
FIGURE V - 10 : CONFIGURATION DE L'ÉPROUVETTE UTILISÉE POUR L'IDENTIFICATION DU TEST DE POINÇONNEMENT.....	214
FIGURE V - 11 : IDENTIFICATION DES COEFFICIENTS RHÉOLOGIQUES DU POLYPROPYLENE EN POINÇONNEMENT (LOI G'SELL MODIFIÉE) – COMPARAISON AVEC LES RÉSULTATS DE LA LOI G'SELL ET LES COEFFICIENTS IDENTIFIÉS EN TRACTION.....	215
FIGURE V - 12 : ISOVALEURS DE TEMPÉRATURE EN POIDS TOMBANT INSTRUMENTÉ DANS LE CAS DU POLYPROPYLENE.....	216
FIGURE V - 13 : SIMULATION D'UN ESSAI DE POIDS TOMBANT INSTRUMENTÉ AVEC LES COEFFICIENTS IDENTIFIÉS EN POINÇONNEMENT (LOI DE G'SELL MODIFIÉE).....	217
FIGURE V - 14 : IDENTIFICATION DU COMPORTEMENT DU POLYPROPYLENE EN IMPACT [PLAQUES DE 5 MM D'ÉPAISSEUR, 2 HAUTEURS DE CHUTES DIFFÉRENTES (15,24 KG/1 M ET 15,24 KG/5M)] À 23 °C.....	218
FIGURE V - 15 : RÉSULTATS DES DIFFÉRENTES EXTRAPOLATIONS SIMULÉES EN POIDS TOMBANT INSTRUMENTÉ SUR DU POLYPROPYLENE À TEMPÉRATURE AMBIANTE – PLAQUES DE 5 MM D'ÉPAISSEUR.....	219
FIGURE V - 16 : RÉSULTATS DES DIFFÉRENTES EXTRAPOLATIONS SIMULÉES EN POIDS TOMBANT INSTRUMENTÉ SUR DU POLYPROPYLENE À TEMPÉRATURE AMBIANTE – PLAQUES DE 2 MM D'ÉPAISSEUR.....	220
FIGURE V - 17 : SIMULATION DIRECTE AVEC LES COEFFICIENTS DU POLYPROPYLENE IDENTIFIÉS EN IMPACT AVEC UN β DE 1720 K – CONDITIONS DE SIMULATIONS : PLAQUES DE 5 MM D'ÉPAISSEUR, UNE SEULE HAUTEUR DE CHUTE ET DEUX MASSES (15,24 KG/1 M ET 25,24 KG/1M) À 23 °C.....	221
FIGURE A3 - 1 : COMPARAISON DES PROFILS DE TEMPÉRATURE OBTENUS À UN INSTANT T_1 DE 3,6 S À PARTIR DE DEUX MAILLAGES DIFFÉRENTS POUR UN ESSAI DE TRACTION À 1 MM/S D'UNE ÉPROUVETTE EN <u>POLYCARBONATE</u>	243
FIGURE A3 - 2 : COMPARAISON DES PROFILS DE TEMPÉRATURE OBTENUS À UN INSTANT T_2 DE 18 S À PARTIR DE DEUX MAILLAGES DIFFÉRENTS POUR UN ESSAI DE TRACTION À 1 MM/S D'UNE ÉPROUVETTE EN <u>POLYCARBONATE</u>	244
FIGURE A4 - 1 : ISOVALEURS DE LA TEMPÉRATURE À L'INTÉRIEUR DE LA ZONE UTILE DE L'ÉPROUVETTE EN <u>POLYCARBONATE</u> (OBTENUE À L'AIDE DU LOGICIEL TORRAO) SANS TENIR COMPTE DU TRANSFERT THERMIQUE AVEC LES MORS (A) ET DANS LES CONDITIONS THERMIQUES RÉELLES (B) – À 23°C ET POUR UNE VITESSE DE ROTATION DE $5 \cdot 10^{-1}$ TR/MIN.....	248
FIGURE A4 - 2 : PRISE EN COMPTE DES ÉPAULEMENTS LORS DE L'IDENTIFICATION PAR TORRAO.....	248
FIGURE A4 - 3 : ISOVALEURS DE TEMPÉRATURE (A) ET DE DÉFORMATION (B) DANS LE CAS D'UNE ÉPROUVETTE DE <u>POLYCARBONATE</u> COMPLÈTE (ZONE UTILE + ÉPAULEMENTS) À 23°C ET POUR UNE VITESSE DE ROTATION DE $5 \cdot 10^{-1}$ TR/MIN.....	249
FIGURE A4 - 4 : ISOVALEURS DES VITESSES RADIALES (A) ET LONGITUDINALES (B) DONNÉES PAR LE LOGICIEL TORRAO.....	250

REMERCIEMENTS

Ce mémoire est le résultat d'un peu plus de trois années de recherche effectuées au Centre de Mise en Forme des Matériaux (CEMEF) de l'Ecole des Mines de Paris à Sophia Antipolis. Cette thèse, qui se situe à la rencontre de deux cultures, s'est déroulée au sein des groupes de recherche « Thermo-Mécanique et Plasticité » et « Cristallisation et Etudes Structurales », respectivement dirigés par M. Michel BELLET et par M. Jean-Marc HAUDIN, ce dernier m'ayant en outre fait l'honneur de présider le jury de thèse.

Un double merci également à mes sympathiques directeurs de thèse, Mesdames Noëlle BILLON et Elisabeth MASSONI qui ont su diriger cette thèse avec intérêt et compétence, et qui ont su me conseiller tout en laissant l'autonomie nécessaire à l'épanouissement d'un chercheur.

Je remercie sincèrement Messieurs Christian G'SELL et Gérard GARY d'avoir accepté de juger ce travail en qualité de rapporteurs.

J'adresse tous mes remerciements également à Messieurs Ezio GANDIN et Yves GERMAIN, travaillant respectivement pour les sociétés SOLVAY S.A. et ELF-ATOCHEM, pour leur soutien à la fois scientifique et financier. Leur implication dans ce travail a joué un rôle déterminant dans ce travail.

Un grand merci également à Monsieur Adinel « analyse inverse » GAVRUS, pour l'aide qu'il m'a apportée tout au long de ce travail et pour avoir accepté de participer au jury.

Je tiens également à remercier toutes les personnes dont la présence et parfois l'aide m'ont été précieuses. Je pense notamment à Gilbert « essais mécaniques » FIORUCCI et à mes compagnons de « galère », en commençant par Marie-Laure « Guadeloupe » BISILLIAT, Olof « le suédois » HERVIEU, Andres « en stress » RODRIGUEZ-VILLA, Elisabeth « Bethou » PICHELIN, Laurence « salolulu » GASTON, Gaby « XRayMan » MONGE, Stéphane « Euh ... » MARIE, Daniel « Quentin's Father » VIEILLEDENT, Olivier « Olive » SEYVET, Roland « le Belge » LOGE, Chantal « faut arroser les plantes » BAHLOUL-MASSIP, Robert « l'autre Belge qu'a pas arrosé les plantes ! » KNOCKAERT, et les autres ...

Je ne saurais enfin oublier Eve, Maël et mes parents pour leur soutien tout au long de cette merveilleuse expérience.

Introduction générale

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'une collaboration avec les sociétés ELF-ATOCHEM* et SOLVAY S.A.** et a pour but principal d'améliorer les moyens d'identification du comportement mécanique des polymères solides, lors de sollicitations multiaxiales et rapides (impact). Les polymères envisagés sont des matériaux à usages structuraux. Les résultats de l'étude devront être compatibles avec les codes de calcul couramment employés dans l'industrie actuellement.

L'utilisation de pièces ou de structures polymères est désormais assez fréquente dans de nombreuses applications industrielles (aéronautique, automobile, électroménager, flaconnage). Ces pièces ou structures doivent assurer la tenue que leur utilisation impose. Dans ce cadre, deux démarches sont envisageables : la démarche empirique qui consiste à réaliser la pièce et à la tester et une démarche plus prédictive basée par exemple sur l'utilisation de codes de calcul. En effet, la technique des éléments finis permet de reproduire à la fois les pièces et les sollicitations réelles. Il est donc possible de remplacer les tests, « vraie matière » ou « vraie grandeur », par des simulations numériques. On peut ainsi espérer gagner du temps, de la précision, de la fiabilité et de la souplesse. Il s'agit alors de caractériser le matériau et de modéliser toute pièce et toute sollicitation potentielles pour juger, *a priori*, de la pertinence du développement. La qualité des prédictions est, dans ce cas, directement fonction de la qualité de la caractérisation des matériaux.

Les essais mécaniques en grandes déformations sont de ce fait couramment utilisés aujourd'hui, par les producteurs de résines afin de déterminer les propriétés d'usage de leurs polymères solides. Mais cette caractérisation doit mettre en œuvre des moyens expérimentaux pertinents. Les contraintes et déformations locales n'étant pas directement mesurables, il faut disposer d'outils pour relier les forces aux contraintes et les déplacements aux déformations *sans ambiguïté*, tout en contrôlant l'ensemble des autres paramètres (température, vitesse ...). Dans l'état actuel des moyens de dépouillement, l'expérimentateur doit mettre en place une panoplie d'essais simples (ou bien instrumentés), isothermes (donc lents) et à vitesse de déformation contrôlée, chacun d'entre eux induisant un état de contrainte (ou de déformation) simple (de préférence uniaxial) et homogène (ou permettant un suivi local des déformations à l'aide de moyens vidéo ou extensométriques). Par contre, dans leur ensemble, ces tests doivent activer tous les processus que l'on cherche à modéliser.

* Centre d'Etude de Recherche et Développement CERDATO 27470 SERQUIGNY

** Direction Centrale des Recherches, rue de Ransbeek 310 – B-1120 BRUXELLES - BELGIQUE

Malheureusement, la corrélation entre ces essais de laboratoire simples et les performances réelles des structures reste peu satisfaisante, en particulier lors de sollicitations rapides (impact par exemple) ou complexes, du fait du comportement spécifique des polymères (dépendance en vitesse, température, ...).

En parallèle, existent nombre de tests normalisés, visant à reproduire des sollicitations plus réalistes. Dans leur version initiale, ces tests autorisaient exclusivement la détermination d'une énergie de rupture. Toutefois, grâce au développement des techniques d'instrumentation modernes, et principalement grâce à l'introduction de capteurs à hautes performances, ces nouvelles techniques permettent d'accéder non seulement à l'énergie de rupture, mais également à des courbes représentant par exemple l'évolution de la force en fonction du déplacement de l'« impacteur ». Ces évolutions renferment une information quant au comportement du matériau, qui demeure difficile à extraire. Par exemple, une sollicitation rapide n'est pas isotherme. Pourtant, ces tests sont de nature à activer des processus proches de ceux rencontrés dans une utilisation réelle. On peut alors être tenté d'identifier la rhéologie sur ces tests en espérant que cela conduira à une meilleure modélisation des structures.

Notre objectif est donc d'apporter aux techniques expérimentales actuelles l'outil complémentaire rendant cette exploitation possible. Il s'agit donc de développer une méthode d'identification des paramètres rhéologiques au cours d'une sollicitation multiaxiale et à grande vitesse, représentative d'une situation d'impact.

Nous chercherons d'abord à améliorer l'identification telle qu'elle se pratique à l'heure actuelle. Nous nous placerons pour cela, dans un premier temps, dans un cadre théorique et physique de lois de comportement usuelles. Notre approche consistera à lever les contraintes ou hypothèses nécessaires à l'exploitation manuelle d'essais mécaniques, même simples et à autoriser l'utilisation de grandeurs mesurables (force et non plus contrainte par exemple). Ceci amènera à :

- un gain de temps ;
- une simplification de l'appareillage nécessaire à la mesure ;
- un gain de précision lié à la disparition d'hypothèses simplificatrices ;
- l'élargissement de la fenêtre expérimentale accessible en autorisant l'exploitation d'essais plus complexes et plus rapides qu'à l'ordinaire.

Une utilisation immédiate de ce travail sera la détermination plus précise du comportement et la possibilité d'envisager des conditions proches de l'utilisation réelles des matériaux. Cela permettra

de « nourrir » les codes de calcul de structure avec des grandeurs plus pertinentes et ainsi d'accroître leur fiabilité.

Une utilisation à plus long terme sera, par la possibilité d'explorer des sollicitations complexes, une aide à l'établissement de nouvelles lois de comportement de plus en plus pertinentes, la méthodologie développée étant suffisamment évolutive pour prendre en compte les progrès réalisés dans ce domaine.

Ce travail se situe donc au confluent de trois domaines :

- le domaine des lois de comportement des polymères solides (domaine encore largement ouvert) ;
- le domaine des techniques expérimentales ;
- le domaine du développement numérique de techniques d'identification.

Dans ce but, notre travail se décompose en cinq étapes. Tout d'abord, une étude bibliographique (*Chapitre I*) est consacrée au recensement des lois de comportement les plus aptes à reproduire le comportement global des polymères solides. Nous mettons ensuite en évidence les limitations des méthodes d'identification classiques employées à l'heure actuelle (*Chapitre II*), en nous appuyant d'une part sur un dispositif de thermographie infrarouge et d'autre part sur des essais rhéologiques de complexité croissante et se rapprochant peu à peu de l'utilisation finale. Nous présentons alors (*Chapitre III*) la stratégie générale de formulation et de résolution d'un problème d'identification, basé sur une méthode de type analyse inverse. La suite du document (*Chapitre IV*) s'articule autour de la présentation :

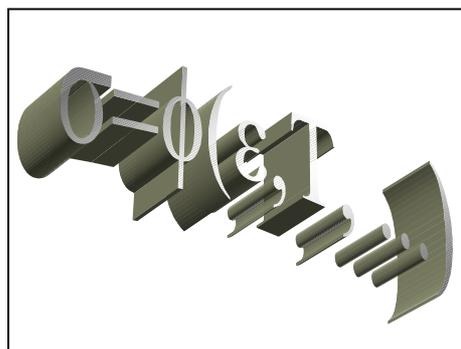
- du modèle thermo-mécanique constituant le cœur du code de simulation par éléments finis utilisé pour reproduire les essais rhéologiques (modèle direct) ;
- du calcul de sensibilité paramétrique constituant le cœur du module d'optimisation (modèle inverse).

A chacun de ces stades, nous nous attachons à sensibiliser le lecteur quant aux précautions d'emploi que suppose l'utilisation de la méthode d'identification par analyse inverse que nous avons développée.

Une série de tests numériques (test de convergence, test de stabilité, influence de divers facteurs sur les résultats de l'identification) permet de valider numériquement notre approche et de vérifier la faisabilité de la méthode.

Plusieurs applications du logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur sur des polymères réels (traction basse vitesse, traction moyenne vitesse, poinçonnement et Poids Tombant Instrumenté) permettent par ailleurs de montrer l'apport d'une telle approche par rapport aux méthodes de dépouillement classiques (*Chapitre V*). Nous évoquons enfin quelques perspectives sur lesquelles ce travail a débouché (*Chapitre VI*).

**BIBLIOGRAPHIE : LES LOIS DE
COMPORTEMENT APPLICABLES AUX
POLYMERES SOLIDES**



1	Introduction	7
2	Généralités	9
3	Etude des polymères solides amorphes et semi-cristallins	11
3.1	Caractéristiques générales	11
3.2	La viscoélasticité	13
3.2.1	Lois de comportement à une dimension	14
3.2.2	Lois de comportement tensorielles	17
3.3	La limite élastique	18
3.3.1	Modélisations du comportement viscoplastique	19
3.3.2	Les critères de plasticité	32
3.4	L'écrouissage	38
3.4.1	Présentation	38
3.4.2	Modélisation de l'écrouissage	40
3.5	Lois de comportements « globales »	42
3.5.1	Introduction	42
3.5.2	Les lois de comportement « multiplicatives » unidimensionnelles	43
3.5.3	Les lois de comportement « additives » unidimensionnelles	46
3.5.4	Les lois de comportement « différentielles » unidimensionnelles	48
3.5.5	Généralisation tridimensionnelle des lois de comportement viscoplastiques	51
4	Conclusion	51

1 Introduction

Les méthodes modernes de calcul, par éléments finis, semblent désormais aptes à considérer la non-linéarité du comportement des matériaux dans le cadre de la Mécanique des Milieux Continus et à envisager des situations de plus en plus complexes. Cela se réalise au travers de calculs itératifs (ou pas à pas), longs et coûteux. Mais en préliminaire et pour assurer la validité de ces calculs, il est indispensable d'introduire un comportement de matériau aussi réaliste que possible et prenant en compte l'ensemble des processus physiques susceptibles d'intervenir.

Dans le but de simuler le comportement d'un matériau vis-à-vis d'une sollicitation particulière, il est envisageable, sur le principe, de fournir directement aux logiciels de simulation, des courbes expérimentales obtenues à l'aide d'un essai rhéologique approprié : il suffit pour cela de les discrétiser en un ensemble de points expérimentaux entre lesquels l'ordinateur calculera les valeurs intermédiaires par interpolation [1]. Toutefois, il semble plus intéressant d'exprimer le comportement d'un matériau sous la forme d'une loi mathématique qui puisse être ajustée à l'aide d'un nombre limité de coefficients caractéristiques. Ce jeu de paramètres constitue ainsi la « carte d'identité » du matériau. Cela permet, en outre, une discussion physique de l'évolution de ces coefficients avec les données structurales du matériau. Une telle relation mathématique est appelée loi de comportement.

On distingue généralement trois grands types de formulation des lois de comportement des matériaux [2] :

- l'approche microscopique qui tente de modéliser les mécanismes de déformation et de rupture aux échelles atomique et/ou moléculaire et/ou cristalline. Cette approche suppose que le comportement macroscopique est le résultat d'une intégration ou d'une moyenne des variables microscopiques à l'échelle de l'élément de volume de la mécanique. Ce dernier est un volume suffisamment petit pour que les dérivées partielles des équations de la Mécanique des Milieux Continus aient un sens (pour les polymères, il est raisonnable de choisir un élément de volume de l'ordre de 1 mm^3 , les hétérogénéités, c'est-à-dire les molécules, allant de $10 \text{ }\mu\text{m}$ à $0,05 \text{ }\mu\text{m}$) ;
- l'approche thermodynamique qui introduit un milieu continu homogénéisé équivalent au milieu réel et qui représente les phénomènes physiques microscopiques par des variables internes macroscopiques ;

- l'approche fonctionnelle qui conduit à des lois héréditaires de type intégral faisant intervenir des fonctions caractéristiques des matériaux, exprimées elles-aussi en termes de variables macroscopiques (fonction fluage, fonction relaxation).

Aucune de ces trois approches ne permet des identifications directes : les variables microscopiques sont difficilement mesurables ; les potentiels thermodynamiques sont pratiquement inaccessibles aux mesures ; les variables internes, par définition, ne sont pas directement observables, ce qui pose des problèmes tant d'ordre théorique qu'expérimental.

C'est pourquoi on rencontre couramment dans la littérature des lois de comportement basées sur la méthode phénoménologique globale qui consiste à étudier l'élément de volume de matière au travers des relations de cause à effet qui existent entre les variables physiquement accessibles constituant les entrées et les sorties du processus étudié. On détermine ainsi les réponses du matériau à des entrées spécifiques et l'on se restreint à des grandeurs mesurables.

De nombreux auteurs [1, 3, 4, 5, 6] font ressortir que les variables capables de définir la rhéologie d'un matériau et qui sont physiquement accessibles de l'élément de volume sont celles que l'on peut déduire simplement des quatre grandeurs mesurables classiques de la mécanique : déplacement, force, temps et température. Il s'agit de :

- la déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$;
- la vitesse de déformation $\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$;
- la contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$;
- la température T ;
- la pression hydrostatique p ;
- et éventuellement, le temps ou le nombre de cycles.

Une équation « minimale » (au sens de son aptitude à décrire le comportement rhéologique de manière raisonnablement complète) aura alors la forme suivante

$$\underline{\underline{\sigma}} = f(\underline{\underline{\varepsilon}}, \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}, p, T) \quad (\text{I - 1})$$

Elle constituera l'équation d'un matériau dans la mesure où le paramètre de déformation $\underline{\underline{\varepsilon}}$ caractérise de manière convenable l'état structural du matériau. En réalité, cette propriété n'est vérifiée qu'en première approximation car pour une valeur fixée de $\underline{\underline{\varepsilon}}$, la structure d'un polymère

thermoplastique peut évoluer du fait de la relaxation des chaînes (si l'échantillon est soumis à un recuit prolongé à longueur constante par exemple). Cependant, il a été montré [7] qu'en traction, cette restriction ne se pose que pendant des périodes transitoires très limitées (par exemple après une période où la vitesse de déformation plastique est brutalement modifiée - saut de vitesse, reprise après maintien prolongé à déformation constante, etc. -). D'une manière générale, on peut donc considérer que la déformation est un bon indicateur de l'état structural du matériau car elle est liée à la texture d'orientation adoptée par les chaînes pendant la déformation. Par ailleurs, une loi de comportement doit prendre en compte, en toute rigueur, tous les paramètres caractérisant la sollicitation. La rhéologie des polymères étant complexe, on préfère généralement réduire le nombre de paramètres intervenant dans la loi de comportement. Comme nous le verrons plus loin, certains auteurs préfèrent en effet définir leur loi de comportement à une température donnée, plutôt que d'y expliciter directement un terme thermodépendant.

Le but de ce chapitre est d'établir un bilan des lois de comportement les plus aptes à reproduire le comportement global des polymères solides. Force est de constater que les lois de comportement sont presque aussi nombreuses que les rhéologues et (ou) les numériciens qui ont travaillé sur le problème. La raison en est qu'il est très difficile de trouver une loi de comportement qui permette, avec les moyens actuels, à la fois d'expliquer les nombreuses observations expérimentales et d'effectuer des simulations numériques dans des géométries plus complexes. Nous présentons ici les principales théories (physiques ou phénoménologiques) proposées pour représenter le comportement complexe des polymères ainsi que les lois de comportement auxquelles elles ont conduit.

2 Généralités

Malgré de grandes différences de nature et de structure entre les métaux (et alliages) et les polymères (et composites), on observe paradoxalement de grandes similitudes dans leurs comportements macroscopiques. Ainsi, avec des ordres de grandeur différents, les termes d'élasticité, de viscosité, de déformation plastique, d'écrouissage, de rupture fragile, de rupture ductile, s'appliquent à tous ces matériaux. C'est ce qui justifie *a priori* l'approche globale de la *mécanique des matériaux* : à l'aide des concepts de la Mécanique des Milieux Continus, de la thermodynamique et de la rhéologie, elle permet de construire des modèles ne dépendant pas dans leurs fondements de la nature des matériaux. Ainsi, il n'est pas rare que des méthodes d'analyses des propriétés mécaniques mises au point pour les métaux soient appliquées aux polymères.

Toutefois, si le comportement rhéologique des matériaux semblent mettre en jeu des phénomènes macroscopiques équivalents, ils se distinguent par les phénomènes élémentaires mis en jeu ainsi que par leur ampleur. C'est le cas par exemple pour la façon dont ils développent ou pas une striction (instabilité plastique observée en traction simple au delà d'une certaine déformation critique).

Expérimentalement, ce phénomène, qui se produit souvent au centre de l'éprouvette, se manifeste par une concentration locale de la déformation plastique. Pour un métal, cet amincissement local s'accroît de plus en plus jusqu'à conduire à la rupture de l'échantillon. Au contraire, pour certains polymères, l'amincissement de la striction se stabilise et on observe alors une propagation des épaulements de la striction.

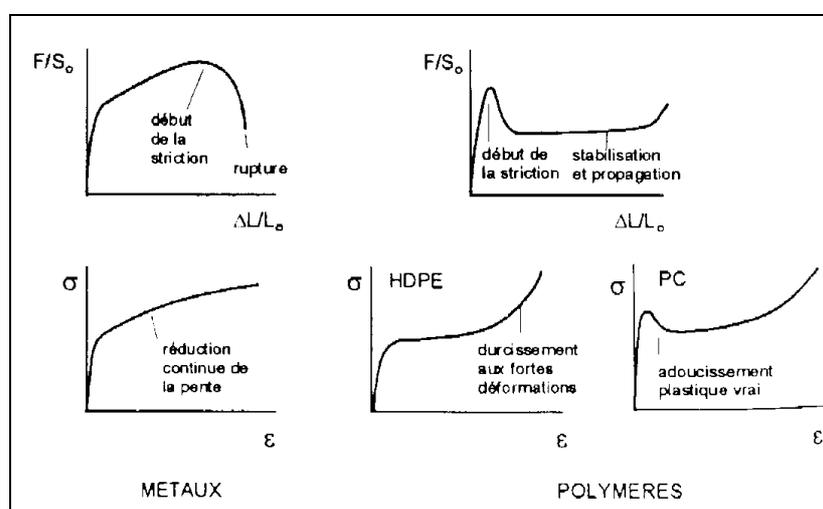


Figure I - 1: Evolution de la contrainte nominale et de la contrainte vraie pour les métaux et les polymères [8].

Cette différence se traduit schématiquement [8] par une évolution différente de la contrainte de Cauchy σ^1 en fonction de la déformation logarithmique ε^2 dans un essai de traction simple à vitesse de déformation vraie $\dot{\varepsilon}$ constante (Figure I - 1). La principale différence entre ces deux types de matériaux réside donc dans cette reprise de l'écroutissage caractéristique des polymères auxquels nous limiterons cette étude.

Ce simple exemple montre que si l'on peut transposer les concepts développés sur les matériaux métalliques, il est en outre impossible de transposer les lois de comportement en intégralité, d'autant qu'il existe certaines disparités de comportement à l'intérieur même de la famille des

¹ contrainte « vraie » $\sigma = F/S(t)$, $S(t)$ étant la section de l'éprouvette à l'instant t .

² déformation « vraie » $\varepsilon = 2 \ln(S_0/S(t))$, S_0 étant la section initiale de l'éprouvette.

polymères. Les courbes de la Figure I - 2 montrent en effet la variété des comportements de divers polymères ductiles à la température ambiante.

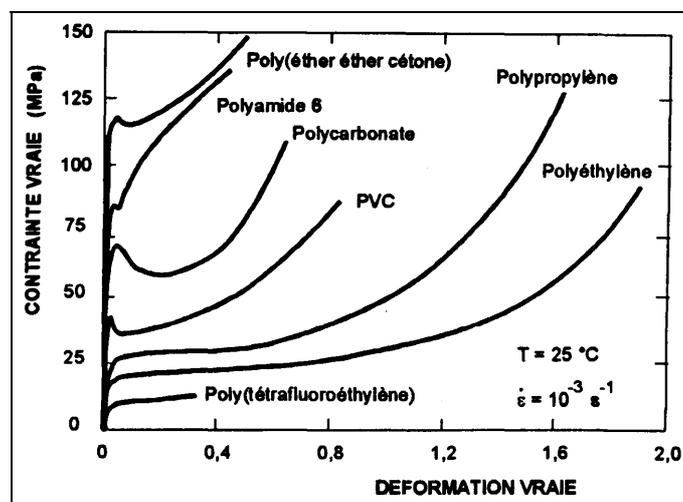


Figure I - 2 : Courbes contrainte vraie - déformation vraie de divers polymères obtenues à 25 °C avec la méthode vidéométrique [8].

3 Etude des polymères solides amorphes et semi-cristallins

3.1 Caractéristiques générales

Dans un grand nombre de polymères, l'arrangement spatial des macromolécules ne présente aucun ordre à grande distance, ou tout au plus une microcristallinité extrêmement imparfaite comme dans le PVC. Ces polymères sont considérés en première approximation comme ayant une structure amorphe. Seules les distances entre atomes proches voisins présentent une certaine régularité (ordre à courte distance). Afin d'augmenter l'entropie de conformation, les chaînes tendent à former des pelotes irrégulières. Les différentes macromolécules sont intimement enchevêtrées les unes dans les autres. Les matériaux qui ont cette structure présentent différents types de comportement en fonction de la température :

- à basse température, le polymère est vitreux, rigide, parfois fragile, avec un module d'Young de l'ordre de 1000 MPa ;
- au dessus de la température de transition vitreuse T_g , le comportement mécanique devient viscoélastique puis caoutchoutique avec un module de l'ordre de 1 MPa, le matériau pouvant subir des allongements hyperélastiques considérables ;
- à des températures encore plus élevées, l'agitation thermique est telle que la diffusion des chaînes devient très aisée. Le comportement est alors celui d'un fluide visqueux ou viscoélastique.

Les polymères dont les chaînes macromoléculaires sont les plus régulières adoptent une structure semi-cristalline. Afin de minimiser l'énergie de conformation, les chaînes se replient sur elles-mêmes pour former des segments réguliers qui s'empilent selon un réseau cristallin de plus forte densité que le polymère amorphe. Cette structure se forme au cours du refroidissement depuis l'état liquide. En raison de la viscosité du polymère fondu et des nombreux défauts des macromolécules, la cristallisation ne peut être ni totale ni parfaite. La structure présente en fin de refroidissement une juxtaposition de cristallites et de zones amorphes résiduelles. Le comportement mécanique de cette classe de matériau présente donc deux températures caractéristiques : la température de transition vitreuse de la phase amorphe et la température de fusion T_m de la phase cristallisée. On a donc :

- en dessous de T_g un polymère rigide de module d'Young voisin des polymères amorphes vitreux ;
- entre T_g et T_m un matériau plus souple (module de l'ordre de 700 Mpa) à cause de la phase amorphe caoutchoutique mais avec une bonne résistance grâce à la présence des cristallites ;
- au dessus de T_m , un fluide visqueux ou viscoélastique.

Les courbes ① et ② de la Figure I - 3, qui illustrent respectivement le comportement fréquent à température ambiante et sous sollicitation uniaxiale lente d'un polymère amorphe et celui d'un polymère semi-cristallin font apparaître trois étapes principales :

- Etape I : Le début de la courbe présente une pente élevée quasi-linéaire à l'origine. Cette partie est appelée réponse viscoélastique [9]. Dans le cas de certains polymères amorphes (courbe ①), un crochet de traction se produit fréquemment à la fin du stade viscoélastique. Cet *adoucissement* est généralement absent chez les polymères semi-cristallins (courbe ②), pour lesquels la limite élastique présente une transition arrondie progressive.
- Etape II : La déformation devient irréversible. La striction se développe. Cette étape est associée en partie au déroulement des macromolécules sous l'effet de la déformation appliquée [10]. La striction se stabilise et le diamètre minimal de l'éprouvette ne diminue quasiment plus. Les épaulements de striction se propagent alors vers les extrémités de l'éprouvette. Cette propagation se traduit par une faible variation de la force alors que l'allongement relatif peut atteindre 1000 %.
- Etape III : Ce stade, qualifié de *durcissement structural* est vraisemblablement lié à l'orientation des chaînes selon la direction principale de déformation. Lorsque la striction s'est entièrement propagée, la déformation redevient homogène jusqu'à la rupture de l'éprouvette.

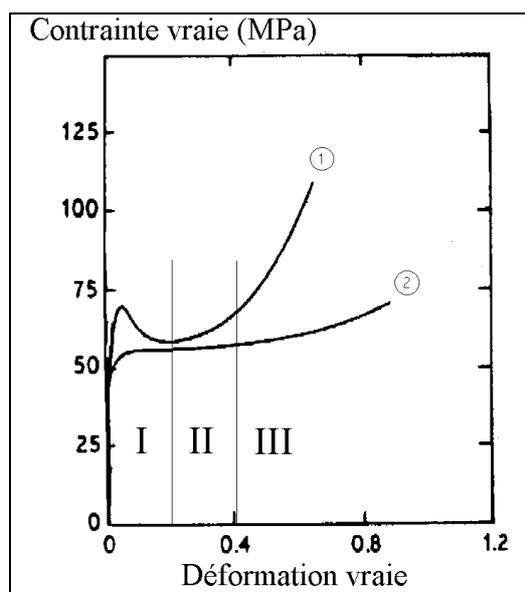


Figure I - 3 : Evolutions typiques de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie pour un polymère amorphe (1) et pour un polymère semi-cristallin (2).

3.2 La viscoélasticité

Les matériaux polymères présentent, sur une large gamme de températures, un comportement communément désigné par viscoélastique. On entend par là que leur comportement est intermédiaire entre celui d'un solide élastique qui, soumis à une contrainte, adopte instantanément une configuration déformée stable et un fluide qui, soumis à la même contrainte, s'écoulera indéfiniment. Dans le cas d'un solide élastique parfait, la déformation ε est par exemple proportionnelle à la contrainte σ (élasticité linéaire) :

$$\varepsilon = J\sigma \quad (\text{I - 2})$$

(J désignant la complaisance, égale à l'inverse du module). Pour un liquide visqueux idéal, c'est la vitesse de déformation $d\varepsilon(t)/dt$ est proportionnelle à la contrainte σ :

$$\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \frac{1}{\eta}\sigma \quad (\text{I - 3})$$

(η désignant la viscosité newtonienne du matériau).

Le comportement viscoélastique se traduit donc par une réponse réversible mais fonction du temps t (ou de la fréquence f de sollicitation ou encore de la vitesse de sollicitation). Il peut être subdivisé en un régime linéaire aux faibles contraintes, souvent assimilé en première approximation à de l'élasticité [11], suivi d'un second régime non-linéaire. Ce comportement viscoélastique,

essentiellement assuré par la phase amorphe dans les polymères semi-cristallins, semble posséder une contribution élastique instantanée liée à la distorsion des liaisons de Van-der-Waals et une composante retardée due à la relaxation de certaines conformations à haute énergie sous l'effet de réarrangements diffusionnels à courte distance [12]. Le cadre le plus large des études est restreint au domaine de la viscoélasticité linéaire, même si en pratique, cette condition de linéarité n'est satisfaite que dans le cas de très faibles déformations (typiquement $\epsilon \leq 0,01$). Au delà, même pour des déformations encore faibles, on note une non-linéarité significative, ainsi qu'un phénomène d'hystérésis si la contrainte est relâchée [13].

3.2.1 Lois de comportement à une dimension

Le formalisme de la viscoélasticité linéaire à une dimension est désormais bien établi (voir par exemple [14]). Il s'appuie sur la modélisation des milieux viscoélastiques par divers assemblages de ressorts et d'amortisseurs en série ou en parallèle. Le ressort de module E représente un milieu parfaitement élastique (Figure I - 4a). L'amortisseur de viscosité η représente un milieu parfaitement visqueux (et de plus, newtonien) (Figure I - 4b). Si la déformation du modèle est limitée par un ressort, ce modèle représente un solide viscoélastique ; dans le cas contraire, il représente un liquide viscoélastique. Ainsi, les liquide et solide viscoélastiques les plus simples sont constitués d'un ressort et d'un amortisseur respectivement en série (Figure I - 4c) et en parallèle (Figure I - 4d).

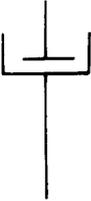
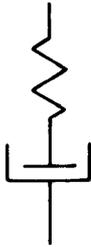
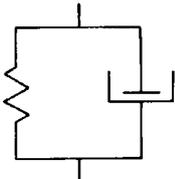
 <p>(a) Schématisation du corps élastique par un ressort</p> $\sigma = E\epsilon$	 <p>(b) Schématisation d'un corps visqueux par un amortisseur</p> $\sigma = \eta \frac{d\epsilon}{dt}$
 <p>(c) Schématisation d'un liquide (élément de Maxwell)</p> $\sigma + \frac{\eta}{E} \frac{d\sigma}{dt} = \eta \frac{d\epsilon}{dt}$	 <p>(d) Schématisation d'un solide (élément de Voigt)</p> $\sigma = E\epsilon + \eta \frac{d\epsilon}{dt}$

Figure I - 4 : Différents modèles analogiques uniaxiaux.

On assimile souvent les corps viscoélastiques linéaires à un milieu caractérisé par un module d'élasticité dépendant du temps. La réponse viscoélastique de **Maxwell** est alors donnée par :

$$E(t) = E_0 \exp(-t/\tau) \quad (\text{I - 4})$$

où le temps de relaxation caractéristique τ est supposé indépendant du temps et de la déformation. Mais un tel modèle ne peut rendre compte de la très longue durée des relaxations dans les polymères. On est alors amené à considérer une combinaison de processus de type Maxwell

$$E(t) = \int_0^{\infty} E_0(\tau) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) d\tau \quad (\text{I - 5})$$

où $E_0(\tau)$ représente le spectre de relaxation que de nombreux auteurs ont tenté d'associer à une série de mécanismes macromoléculaires.

Le principe de superposition de Boltzmann (les sollicitations imposées à des instants différents agissent indépendamment et les réponses sont additives) permet de considérer tous les types de sollicitation, par exemple une déformation à vitesse constante pour laquelle la relation contrainte – déformation serait donnée par

$$\sigma(\varepsilon) = \dot{\varepsilon} \int_0^{\infty} \tau E_0(\tau) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] d\tau \quad (\text{I - 6})$$

Toutefois, l'application pratique de cette approche nécessite la détermination délicate du spectre complet $E_0(\tau)$. C'est pourquoi d'autres approches ont été développées dans le but de limiter le nombre des paramètres ajustables. On a montré en particulier que l'équation de Kohlrausch

$$E(t) = E_0 \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^\beta\right] \quad (\text{I - 7})$$

décrit très bien la relaxation viscoélastique de nombreux polymères, avec seulement trois paramètres ajustables (E_0 , τ et β). Le formalisme de **Kohlrausch** a été appliqué à une résine polyuréthane [15]. Les résultats montrent que si l'approximation élastique n'est justifiée qu'en deçà d'une déformation de 0,2 %, celle de Kohlrausch l'est jusqu'à 1,5 % environ. Toutefois, après cette limite, on note que l'accord est moins bon. La courbe expérimentale s'infléchit nettement et l'ajustement n'est plus possible avec ce formalisme. Pour cette raison, certains auteurs [16, 17, 18]

introduisent une certaine non-linéarité dans l'équation phénoménologique de viscoélasticité, en faisant varier le terme préexponentiel E_0 avec la déformation ε . Cette procédure permet évidemment de reproduire les résultats expérimentaux avec fidélité, mais elle nécessite l'introduction de nouveaux paramètres.

Pour être complet, il faut signaler que certaines approches moléculaires basées sur les concepts d'haltères élastiques, de réseau caoutchoutique ou encore de reptation [19] permettent de retrouver des comportements viscoélastiques plus ou moins complexes. Les formalismes des lois sont souvent proches de ce que les mécaniciens proposent mais elles font intervenir une description « moléculaire » du matériau.

Parmi les approches non-linéaires proposées dans la littérature, certaines utilisent un formalisme de « pré-plasticité » pour décrire les phénomènes de relaxation jusqu'au voisinage de la limite élastique [20]. Ici, la déformation est décomposée en une composante élastique pure ε_e et une composante pré-plastique ε_p dont la cinétique est régie par l'équation

$$\sigma = \sigma^*(\dot{\varepsilon}_p, T) + \sigma_i(\varepsilon_p, T) \quad (\text{I} - 8)$$

où σ^* est la contrainte nécessaire pour activer le franchissement des barrières enthalpiques liées aux changements corrélés des conformations macromoléculaires qui contrôlent la déformation, et σ_i mesure l'effet des changements de microstructure qui s'opposent à l'écoulement des chaînes polymères.

Il existe donc un certain « arsenal » de lois viscoélastiques visant à reproduire le comportement des polymères à faible déformation. Expérimentalement, on constate souvent que le spectre de relaxation des polymères est large et que leur viscoélasticité est fortement « non linéaire ».

L'écart à la linéarité des courbes $\sigma(\varepsilon)$ aux faibles déformations doit en tout état de cause toujours être traité avec une grande prudence. En effet, des phénomènes d'endommagement peuvent se développer dans les polymères et produire une déformation macroscopique significative sans que le polymère ne soit pour autant l'objet d'une déformation viscoélastique ou pré-plastique notable [21].

D'un point de vue pratique, il est important de noter que deux coefficients sont au minimum nécessaires à la modélisation unidimensionnelle des faibles déformations des polymères (déformation en dessous de 0,1).

3.2.2 Lois de comportement tensorielles

Si la loi de comportement associée à l'élément analogique de Maxwell permet de rendre compte qualitativement, dans une configuration monodimensionnelle, des relations entre contrainte et déformation dans la direction de sollicitation, elle ne peut servir à décrire les propriétés observées dans les deux directions perpendiculaires. Ceci a conduit certains auteurs à généraliser le comportement de l'élément de Maxwell en l'écrivant sous une forme tensorielle. La transposition qui vient naturellement à l'esprit, consisterait à écrire la loi sous la forme

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} + \theta \frac{d\underline{\underline{\sigma}}}{dt} = 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \\ \text{avec } \theta = \frac{\eta}{E} \end{cases} \quad (\text{I - 9})$$

Cependant, la dérivée particulière d/dt n'est pas objective [22] (une grandeur objective est une grandeur indépendante du référentiel). Il est préférable d'utiliser une dérivation objective comme par exemple la dérivée convective $\delta/\delta t$ (dérivation par rapport à un repère dit *convecté*, c'est-à-dire qui se déforme en même temps que la matière). La loi de Maxwell s'écrit alors [22]

$$\underline{\underline{\sigma'}} + \theta \frac{\delta \underline{\underline{\sigma'}}}{\delta t} = 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (\text{I - 10})$$

où $\underline{\underline{\sigma'}}$ est le tenseur des contraintes défini à une pression p' arbitraire près. La loi de Maxwell donne à trois dimensions les mêmes résultats qu'à une dimension. On retrouve en particulier, très simplement, la notion de relaxation de la contrainte.

En conclusion, les modèles monodimensionnels sont très pratiques pour illustrer la viscoélasticité. Il est possible de les généraliser à trois dimensions en utilisant des outils mathématiques adéquats.

3.3 La limite élastique

Certains polymères ne présentent pas de limite élastique évidente. C'est le cas des polymères fragiles pour lesquels l'échantillon rompt au cours du stade viscoélastique, ou bien des élastomères, caractérisés par leur comportement hyperélastique. Lorsqu'une limite élastique se produit, en général pour une déformation de l'ordre de quelques pour cent [8], elle se manifeste :

- soit sous la forme d'un maximum local de la courbe représentant l'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie ;
- soit sous la forme d'un brusque changement de sa pente.

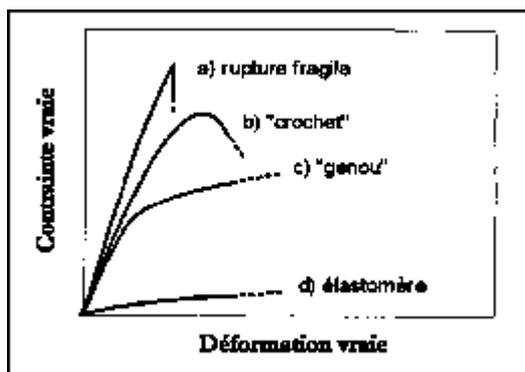


Figure I - 5 : Comportements typiques des polymères.

Le premier cas est appelé « crochet » (caractéristique de certains polymères amorphes), le second « genou » (polymères semi-cristallins en général ainsi que quelques polymères amorphes). L'amplitude du crochet est extrêmement sensible à l'histoire thermomécanique du matériau. En effet, il peut être entièrement supprimé par un cyclage plastique du matériau [23], tout en étant susceptible d'être restauré après un recuit à une température proche de la température de transition vitreuse T_g . Il est en outre très sensible à la vitesse de sollicitation, pouvant ainsi disparaître dans le cas d'essais très lents [24]. Cet adoucissement au seuil d'écoulement plastique ne peut être dû à un effet d'orientation et les causes de son apparition doivent être cherchées au niveau des modifications structurales plus fines. Ce maximum de contrainte est souvent choisi, par convention, comme seuil de plasticité. Dans le cas d'un genou, on choisit la limite élastique au point où la courbe s'écarte de la droite élastique initiale d'un pourcentage spécifié. Dans les deux cas, nous noterons σ_y la valeur de la limite élastique. De nombreux auteurs se sont intéressés à la limite élastique des polymères, tant en ce qui concerne ses aspects phénoménologiques (critères de plasticité) que son interprétation microstructurale.

En tout état de cause, une certaine ambiguïté subsiste au niveau de la limite élastique, la part de la déformation viscoélastique à recouvrance lente étant difficile à déterminer. La seule certitude est que, une fois passé le seuil que nous venons de définir, la déformation reste majoritairement irréversible à l'échelle du temps de l'essai.

3.3.1 Modélisations du comportement viscoplastique

De nombreux chercheurs ont tenté d'expliquer le phénomène de limite élastique chez les polymères. Nous allons décrire quelques approches par ordre de complexité croissante.

De nombreuses descriptions de la plasticité sont basées sur l'analyse d'**Eyring** [25] qui a été le premier à rendre compte des écoulements visqueux thermomécaniquement activés. Dans son

analyse, Eyring décrit l'écoulement des liquides en appliquant sa théorie de l'activation thermique au saut des molécules par dessus les « barrières » résultant de leur interaction. Il est admis dans cette description que toutes les molécules sont capables d'effectuer de tels sauts : une telle hypothèse n'est concevable qu'à température élevée pour laquelle on peut admettre que chaque molécule dispose d'une part, d'au moins un degré de liberté translationnel et, par ailleurs, a en position de premier voisin, au moins un site vacant (ce qui suppose un désordre suffisamment important). Les segments moléculaires étant considérés individuellement dans des positions d'équilibre, le passage d'une position à une autre suppose l'acquisition de l'énergie nécessaire au franchissement d'une barrière de potentiel ξ_0 . Sous l'effet de la contrainte, la hauteur de cette barrière est abaissée dans un sens et augmentée dans l'autre. La vitesse de déformation en cisaillement s'exprime alors sous la forme

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\xi_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{v_a \sigma_y}{kT}\right) \quad (\text{I - 11})$$

où le volume d'activation, v_a , est le produit d'une aire par la distance sur laquelle une unité structurale se déplace. k est la constante de Boltzman, T la température absolue et σ_y la contrainte d'écoulement. Aux grandes vitesses ou aux basses températures, cette équation peut s'écrire

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\xi_0 - v_a \sigma_y}{kT}\right) \quad (\text{I - 12})$$

La contrainte d'écoulement σ_y s'obtient alors à partir de l'équation (I - 12) :

$$\frac{\sigma_y}{T} = \frac{k}{v_a} \left(\frac{\xi_0}{kT} - \ln\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_0}\right) \right) \quad (\text{I - 13})$$

Ces équations permettent de déterminer la contrainte d'écoulement lors d'un écoulement plastique à vitesse de déformation imposée.

C'est à **Kauzmann** (d'après [40]) que revient l'idée d'appliquer, dès 1941, le même formalisme au cas de la déformation plastique des métaux. Il extrapole pour cela le concept d'activation thermique à un ensemble d'atomes se déplaçant de manière corrélée de façon à former une boucle de dislocation, défaut dont l'existence dans le cristal venait d'être postulée.

Plus tard, plusieurs études ont montré que l'équation d'Eyring, qui n'envisage qu'un seul processus moléculaire, est insuffisante pour décrire le comportement des polymères amorphes sur un large domaine de températures et de vitesses de déformation. **Bauwens** [26], entre autre, a alors préconisé de considérer la contrainte comme étant la somme de plusieurs contraintes associées à l'activation de plusieurs types de mouvements moléculaires impliqués dans le processus de déformation. En n'utilisant que deux processus qui correspondent aux mouvements associés aux relaxations β et α (qui correspondent à la prise de mobilité de différents éléments de la chaîne), l'évolution de la contrainte au seuil en fonction de la température et de la vitesse a ainsi pu être décrite avec succès.

Les travaux de **Bauwens-Crowet** [27] sont également basés sur cette approche d'activation thermique. Pour le PMMA (Polyméthyle méthacrylate), l'auteur a constaté que les courbes représentant l'évolution de σ_y/T en fonction de $\ln(\dot{\epsilon})$ sont sensiblement des droites dans deux domaines distincts de température et de vitesse de déformation. Dans chaque domaine on peut alors écrire

$$\frac{\sigma_y}{T} = \frac{k}{V_{\text{exp}}} \left[\ln \left(\frac{\dot{\epsilon}_p}{\dot{\epsilon}_0} \right) + \frac{Q}{kT} \right] \text{ soit } \dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_0 \exp \left(- \frac{Q - \sigma_y V_{\text{exp}}}{kT} \right) \quad (\text{I - 14})$$

qui correspond bien à une équation d'Eyring avec deux paramètres ajustables : l'énergie d'activation Q et le volume d'activation expérimental V_{exp} . Toutefois, dans ce travail, l'influence de la température sur la limite élastique n'est pas spécifiquement interprétée en termes de créations de dislocations, mais plutôt par l'activation de transitions viscoélastiques. Dans le domaine des basses températures (ou des grandes vitesses) le franchissement de barrières β et α est requis, tandis que dans l'autre domaine, seule l'activation de α nécessite une dépense d'énergie.

En 1966, **Robertson** [28] a analysé de manière analogue la déformation des polymères, non pas en termes de mouvements translationnels de molécules mais plutôt en considérant des changements conformationnels activés thermiquement. Son modèle suppose en effet que les segments de chaîne (les liaisons carbone-carbone) sont statistiquement distribués entre deux populations conformationnelles : la conformation *trans* (état de basse énergie) et la conformation *cis* (état de haute énergie). L'application d'une contrainte diminue la différence d'énergie entre les deux conformations. Elle augmente donc la population des *cis* au dépend des *trans* (Figure I - 6). Ceci confère au polymère un état microstructural que l'on trouverait à l'état fondu à une température θ_s (supérieure à la température de transition vitreuse T_g). Ces changements de conformations ont

d'ailleurs été mis en évidence expérimentalement par analyse infrarouge à transformée de Fourier sur du PVC [29] à température ambiante ainsi que sur du PS [30].

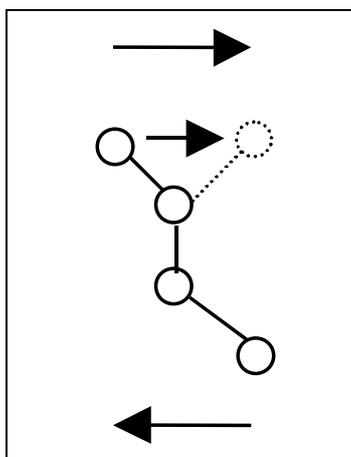


Figure I - 6 : Conformations *cis* et *trans* du modèle de Robertson.

L'augmentation de la contrainte σ a pour effet d'augmenter θ_s . L'écoulement plastique se produit lorsque la température θ_s correspond à une viscosité μ_s (déterminée par l'équation de Williams Landel et Ferry) égale à $\sigma/\dot{\gamma}$ ($\dot{\gamma}$ est la vitesse de déformation imposée). Ce modèle permet de retrouver quantitativement les contraintes d'écoulement plastique pour des températures proches de T_g . Bien que les événements mis en jeu soient strictement de nature intramoléculaire, ce modèle rend correctement compte du comportement au seuil de plusieurs polymères amorphes dans une gamme de températures proches de la température de transition vitreuse T_g et pour des vitesses suffisamment basses. Par contre, pour des températures inférieures à la température de transition vitreuse et des vitesses de déformation significatives, le modèle ne semble plus satisfaisant [31]. En effet, la cohésion du polymère est alors principalement due aux interactions intermoléculaires. C'est la raison pour laquelle, dans les années 1970, plusieurs auteurs ont commencé à examiner l'adéquation du concept de dislocation aux systèmes désordonnés tels que les polymères amorphes.

Bowden et al [32] firent partie des précurseurs de la théorie basée sur la déformation plastique en terme de nucléation thermomécaniquement activée de boucles de dislocations. Pour calculer l'énergie de la dislocation U , ces auteurs utilisent l'équation classique de la théorie des dislocations [33], où l'on retrouve un terme d'énergie élastique et un terme correspondant au travail de la contrainte appliquée τ :

$$U = 2\pi R \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \frac{2R}{\sqrt{3}b} - \pi R^2 \tau b \quad (\text{I - 15})$$

où G est le module de cisaillement, b le vecteur de Burgers (défini comme étant le déplacement - cisaillement - de l'endroit cisailé qui constitue le défaut) et R le rayon de la boucle de dislocation. Cette énergie dépend de R et présente un maximum U_c qui diminue lorsque l'on applique une contrainte. C'est cette barrière énergétique critique qui doit être franchie pour permettre la propagation de la dislocation, et donc la création d'une déformation plastique. La vitesse de déformation plastique est alors donnée par l'expression :

$$\dot{\gamma} = N v_D b R^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(\frac{U_c(\tau)}{kT}\right) \quad (I - 16)$$

où N est le nombre de sites actifs, v_D la fréquence de Debye et ΔS l'entropie du processus de nucléation. Ce modèle a permis de reproduire correctement l'évolution de la contrainte d'écoulement plastique en fonction de la température de plusieurs polymères. D'autres modèles ont été proposés à partir de ce concept de dislocation pour décrire la déformation dans une structure amorphe. **Li** [34] a d'ailleurs montré que ces dislocations sont sessiles (dislocations de « Somigliana ») : elles ne peuvent pas se déplacer par glissement et admettent des fluctuations de vecteur de Burgers le long de la ligne de dislocation.

Durant la même période, **Argon** [31] a développé un modèle de déformation des polymères solides où intervient un défaut autre que les dislocations : d'après l'auteur, la dynamique d'activation plastique serait contrôlée par la formation, thermomécaniquement activée, de paires (ou boucles) de « désinclinaison » (Figure I - 7).

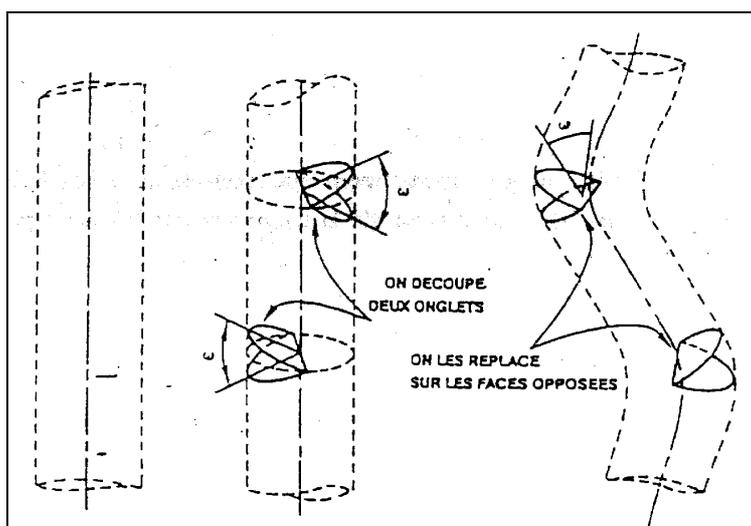


Figure I - 7 : boucles de désinclinaison du modèle d'Argon.

Dans ce modèle, les chaînes sont assimilées à des cylindres entourés d'une matrice élastique. Sous l'effet d'une contrainte, un domaine correspondant à un segment de chaîne d'environ 1 nm, subit un double décrochement (paires de désinclinaison) que l'on apparente à une double distorsion de la molécule. La résistance à la nucléation de ces défauts est due aux interactions intermoléculaires. L'augmentation d'énergie libre due à la formation de ces défauts ΔF est réduite à une enthalpie ΔG par le travail ΔW d'une contrainte τ appliquée :

$$\Delta G = \Delta F - \Delta W \quad (\text{I - 17})$$

L'enthalpie est fournie par les fluctuations thermiques. La formation des paires de désinclinaison, de nature essentiellement réversible, devient irréversible lorsque d'autres se forment parmi les molécules voisines. L'énergie élastique locale de la première paire est relaxée et la déformation stabilisée.

Le calcul de l'énergie d'activation de ce mécanisme de déformation a été établi à partir des travaux de **Li** [34] :

$$\Delta G = \frac{3\pi\mu\omega^2 a^3}{16(1-\nu)} \left[1 - 8,5(1-\nu)^{5/6} \left(\frac{\tau}{\mu} \right)^{5/6} \right] + 0,15\mu a^3 (\omega - 0,6)^2 \left(\frac{P}{\mu} \right) \quad (\text{I - 18})$$

où ω et a correspondent respectivement à l'angle de rotation d'un segment de molécule et à son rayon, μ est le module de cisaillement, τ la contrainte de cisaillement, ν étant le coefficient de Poisson et P , la pression hydrostatique.

Argon en a alors déduit la limite élastique en cisaillement

$$\sigma_y = s_0 \left[1 - \frac{16(1-\nu)}{3\pi\mu\nu_0} \cdot kT \cdot \ln \left(\frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}} \right) \right]^{6/5} \text{ avec } s_0 = \frac{0,077\mu}{1-\nu} \quad (\text{I - 19})$$

Cette équation présente l'avantage de ne contenir que deux paramètres ajustables qui sont ν_0 , le volume de la boucle de désinclinaison et $\dot{\gamma}_0$, le terme préexponentiel, qui a la dimension d'une vitesse de déformation. Le modèle d'Argon peut être considéré comme un cas particulier du modèle d'Eyring où l'énergie d'activation dépend du module. Ce modèle permet de retrouver que la plasticité des polymères est contrôlée par des mouvements de chaînes coopératifs et thermiquement activés. Mais aux températures inférieures à la température de transition vitreuse T_g ,

le module varie peu et le modèle d'Argon diffère peu de celui d'Eyring. Ce modèle permet de décrire correctement l'influence de la température, de la pression et de la vitesse de déformation sur la contrainte d'écoulement plastique à l'exception des températures proches de la température de transition vitreuse T_g . Il s'agit d'une approche intéressante pour prédire quantitativement la limite élastique, mais l'interprétation du crochet de traction reste qualitative [23]. Cette limitation a été levée en partie par **Boyce et al.** [35]. Ces derniers ont en effet eu l'idée d'exprimer le terme s_0 sous la forme d'une fonction empirique de la pression hydrostatique P :

$$\begin{cases} s_0 = s + \alpha P \\ \dot{s} = h \left(1 - \frac{s}{\sigma_{ss}(T, \dot{\gamma})} \right) \end{cases} \quad (\text{I - 20})$$

h étant la pente du radoucissement, c'est-à-dire la pente de la courbe contrainte vraie - déformation vraie après la limite élastique (phase décroissante en présence d'un crochet de traction) et σ_{ss} , la valeur vers laquelle tend la contrainte après le seuil de plasticité.

Escaig et al [36] ont introduit l'analyse thermodynamique de la plasticité des polymères solides à partir d'une démarche dérivée du travail de Kauzman bien établie en métallurgie physique. Dans leur approche, particulièrement adaptée aux polymères amorphes, le seuil d'écoulement macroscopique est aussi associé à la propagation de défauts de cisaillement. Le mouvement de ces défauts apparaîtraient sous l'action combinée de la contrainte et des fluctuations thermiques cohérentes, les obstacles locaux au mouvement étant caractérisés par une barrière d'énergie ΔG_0 . Les temps caractéristiques des réarrangements microstructuraux dans le solide vitreux (> 100 s) étant très grands vis-à-vis du temps de l'événement élémentaire de déformation (de 10^{-2} à 10^{-6} s), un état de quasi-équilibre thermodynamique peut être considéré.

Sous réserve de l'existence d'un mécanisme thermiquement activé unique, nous avons vu précédemment que le comportement au seuil d'écoulement d'un essai à vitesse de sollicitation constante pouvait être décrit par une loi du type :

$$\dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_0(\sigma_a, T) \exp \left[- \frac{\Delta G_a(\sigma_y, T)}{kT} \right] \quad (\text{I - 21})$$

Les dérivées partielles à pression, température et structure constantes de l'énergie libre d'activation ΔG_a fournissent des informations importantes sur la réponse non-élastique du

matériau. Les auteurs ont défini, entre autre, le volume d'activation V_a , qui ici est associé à l'*extension spatiale du phénomène élémentaire* thermiquement activé par :

$$V_a = - \left(\frac{\partial \Delta G_a}{\partial T} \right)_{P, T, \text{structure}} \quad (\text{I - 22})$$

A partir de cette analyse, les mesures expérimentales de ΔG_a effectuées sur plusieurs polymères ont mis en évidence deux types de comportement en déformation :

- Aux températures inférieures à une température critique T_c , ΔG_a est proportionnelle à T ; la description de la dynamique de la plasticité avec une équation d'Arrhénius classique, c'est-à-dire avec un terme préexponentiel constant, est alors effectivement possible. Dans cette zone de température, la déformation plastique est donc contrôlée par un mécanisme unique thermiquement activé. Récemment, **Lefebvre et al** [37] ont montré que pour des chaînes vinyliques et pour des réseaux époxydes, le volume d'activation était proportionnel au carré de la longueur d'un segment statistique s ($V_a \approx 1,9 * s^2$).
- Aux températures supérieures à T_c , l'énergie d'activation $\Delta G'_a$ est quasi-constante. La dynamique de plasticité ne peut désormais plus être contrôlée par un mécanisme unique. Les auteurs ont proposé des mécanismes à caractère diffusionnel contrôlés par des phénomènes de migration moléculaire. La vitesse de déformation est alors donnée par :

$$\dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_0 (\sigma_e)^n \exp\left(-\frac{\Delta G'_a}{kT}\right) \quad (\text{I - 23})$$

où σ_e est la contrainte effective thermiquement activée qui contribue au franchissement de l'obstacle local. Cette contrainte s'exprime sous la forme :

$$\sigma_e(T, \dot{\epsilon}_p) = \sigma_a - \sigma_i(\dot{\epsilon}_p) \quad (\text{I - 24})$$

où σ_a et σ_i correspondent respectivement à la contrainte appliquée et à la contrainte interne. Ce dernier terme traduit les interactions essentiellement élastiques qui résultent des interfaces de mauvais accolement à la frontière des zones cisailées (défaut d'empilement).

Ce modèle semble toutefois incapable de décrire correctement le comportement aux hautes vitesses de déformation, et ce, particulièrement dans le cas du polycarbonate.

Le modèle dit de **Perez** [38], initialement développé pour reproduire le comportement des polymères amorphes aux faibles déformations a ensuite été étendu pour rendre compte de leur comportement non-linéaire observé aux grandes déformations. Le modèle reprend de façon très élaborée l'interprétation de la limite élastique en termes de relaxation élémentaire. Cette théorie repose sur le fait que les polymères sont supposés résulter d'un arrangement désordonné d'unités structurales (portions de chaîne macromoléculaire). Celles qui présentent avec leurs voisines un excès d'enthalpie ou d'entropie étant appelées « défauts quasi ponctuels » (dqp). Il s'agit en fait de zones de perturbation locales des forces de Van-der-Waals où la mobilité moléculaire est plus grande. Le concept central revient à admettre que, sous l'effet de la contrainte appliquée et grâce aux fluctuations thermiques, la déformation non élastique résulte de la nucléation de micro-domaines cisailés (mdc) à l'intérieur de ces sites. Ce concept implique qu'un certain degré de mobilité moléculaire persiste en dessous de la température de transition vitreuse T_g du fait des dqp. La Figure I - 8 montre schématiquement les différentes étapes concevables :

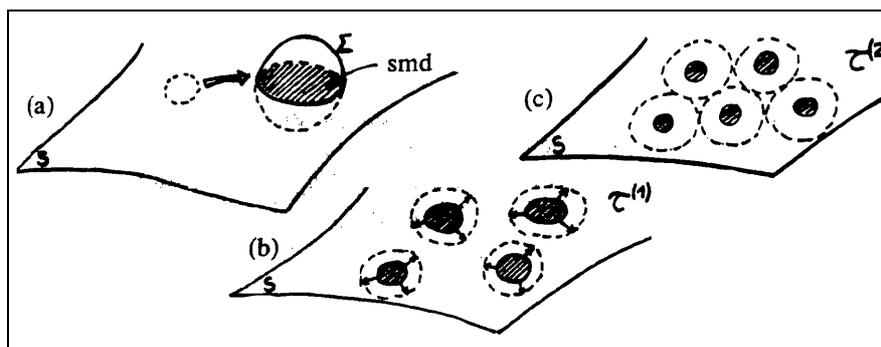


Figure I - 8 : Représentation de la germination (a), de l'expansion (b) et de la coalescence (c) des micro-domaines cisailés [38].

- (a) Un mouvement moléculaire collectif confiné dans le volume de matière limité par la surface Σ et activé thermomécaniquement conduit à la formation d'un cisaillement localisé. Ce cisaillement correspond à la zone hachurée sur la Figure I - 8, intersection entre Σ et la surface S où la composante de cisaillement de la contrainte est maximale.
- (b) La ligne bordant l'aire hachurée est, en toute rigueur, une boucle de dislocation conformément aux définitions classiques adoptées en mécanique des milieux continus. Toutefois, dans les milieux désordonnés (c'est le cas des polymères amorphes), le vecteur de cisaillement fluctue en orientation et en norme le long de la dislocation qui, de ce fait, n'est pas glissile (boucle de dislocation de Somigliana) ; l'expansion des boucles de dislocation ne se conçoit donc que de manière conservative :

- soit, par transport de matière, processus dominant à haute température (mécanisme de diffusion) ; le taux de diffusion dépend alors de la concentration en défauts.
- soit par l'effet de la contrainte mécanique à basse température ; le mouvement des lignes de dislocation s'effectuant alors vraisemblablement par formation de micro-boucles vers leur front d'avancée.

(c) Pour une certaine expansion des mdc, l'auteur envisage leur coalescence : les boucles de dislocations entourant les mdc sont annihilées et leur énergie élastique dissipée.

Les deux premières étapes donnent lieu à une déformation recouvrable. Si l'on supprime la contrainte, l'énergie élastique associée aux défauts linéaires diminue quand le système revient vers la situation antérieure. On parle ici d'anélasticité. La déformation liée à la troisième étape est quant à elle non-recouvrable. On parle alors de viscoplasticité.

A partir du nombre de défauts cisailés dans le temps, l'auteur a déterminé la déformation macroscopique associée à chaque processus. Il a ensuite déterminé la fonction complexe du module de cisaillement, ce qui lui a permis de décrire convenablement le comportement mécanique dynamique du polymère sous la forme d'un modèle rhéologique (Figure I - 9) :

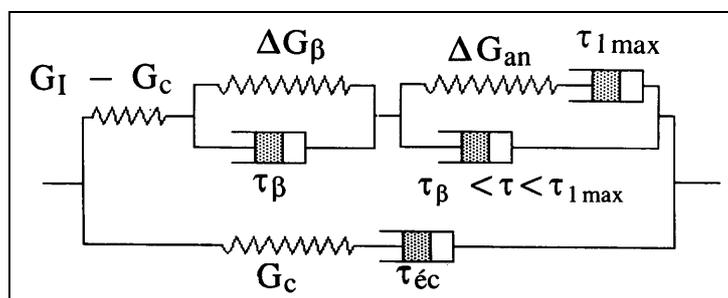


Figure I - 9 : Modèle rhéologique des polymères vitreux [39].

Cette théorie permet d'expliquer le comportement des polymères amorphes prédéformés, ces derniers présentant une concentration de défauts - c'est-à-dire un nombre de sites de nucléation des mdc - plus importante que dans leur état initial. Il en résulte une mobilité moléculaire accrue, phénomène par ailleurs observé par spectroscopie mécanique. L'écoulement plastique ainsi facilité explique la disparition du crochet après un traitement cyclique plastique du matériau. A l'inverse, des travaux ont montré que le vieillissement physique entraîne l'exacerbation du pic de contrainte ; ce phénomène est clairement lié à la diminution du nombre de défauts, ce qui impose d'appliquer une contrainte plus élevée pour assurer une vitesse de déformation donnée. Lors d'un recuit, les défauts sont annihilés et le polymère retrouve un état proche de celui d'origine.

En ce qui concerne les polymères semi-cristallins, de nombreux travaux expérimentaux ont conduit à une compréhension correcte, sur le plan qualitatif, des phénomènes complexes se produisant lors de leur déformation. **Peterlin** (d'après [40]) a proposé un modèle très général permettant de relier l'aspect macroscopique de la déformation (striction) aux différents mécanismes microstructuraux susceptibles d'intervenir sous l'influence d'une sollicitation uniaxiale. Ce modèle distingue trois régions de l'éprouvette :

- Dans la région où la striction ne s'est pas encore propagée, il y a d'abord glissement et séparation des lamelles, puis glissement et basculement des chaînes à l'intérieur des lamelles cristallines. Ces mécanismes préservent l'intégrité des lamelles et des sphérolites ;
- Dans la striction, il y a transformation de la morphologie lamellaire en une morphologie microfibrillaire, par fragmentation des cristaux avec dépliement des chaînes ;
- Après le passage de la striction, la déformation se poursuit par alignement des blocs cristallins résultant de la fragmentation selon l'axe de traction, et étirement de plus en plus important des molécules de liaison dans la phase amorphe.

Ces dernières années, une étape importante a été franchie grâce au développement de nouveaux modèles fondés sur les mécanismes élémentaires décrits précédemment, mais permettant une approche quantitative des processus de déformation. Ces modèles permettent de prédire la courbe contrainte – déformation, d'une part, et l'évolution des orientations cristallines, d'autre part. En effet, une approche correcte du problème devrait prendre en considération l'anisotropie structurale des matériaux, en particulier celle liée à la texture cristalline induite par la déformation. Pour cela **Dahoun et al.** [41] ont utilisé un modèle auto-cohérent, développé à l'origine par **Molinari et al.** Ce modèle décrit au niveau microscopique l'évolution de la texture cristalline jusqu'aux grandes déformations. Il donne, au niveau macroscopique, la courbe contrainte – déformation caractérisant le comportement mécanique. Le polymère est considéré comme un agrégat polycristallin formé de cristallites réparties au hasard (on néglige l'existence d'une morphologie sphérolitique). Le modèle est dit à « un site », ce qui signifie que les interactions entre une cristallite particulière et toutes les autres cristallites de l'échantillon sont assimilées à celles entre la cristallite considérée et un « milieu homogène équivalent ». Ce dernier a les propriétés du matériau macroscopique. Plusieurs autres hypothèses sont également posées :

- la phase cristalline est supposée avoir un comportement viscoplastique ;
- les lamelles cristallines sont supposées se déformer par glissement, parallèlement ou perpendiculairement aux chaînes ;

- le rôle de la phase amorphe est négligée dans une première approche.

Dans son modèle, Dahoun a décrit le comportement plastique d'une lamelle (pour un système de glissement donné s) par la loi puissance

$$\tau^s = \tau_0^s \left[\frac{\dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}_0} \right]^m \quad (\text{I - 25})$$

qui relie la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^s$ et la cission résolue τ^s associées à ce système ; τ_0^s et $\dot{\gamma}_0$ sont des grandeurs de référence, et m le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation. La loi d'interaction de chaque lamelle avec le milieu environnant s'écrit sous la forme

$$\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \left(\underline{\underline{\Gamma}}^{-1} + \underline{\underline{\mathbf{A}}}^0 \right) \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - \underline{\underline{\bar{\dot{\epsilon}}}} \right) \quad (\text{I - 26})$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ sont respectivement les tenseurs déviateurs des contraintes de Cauchy au niveau microscopique (lamelle) et au niveau macroscopique ; $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ est le tenseur des vitesses de déformation dans la lamelle et $\underline{\underline{\bar{\dot{\epsilon}}}}$ le tenseur des vitesses de déformation appliquées (au niveau macroscopique) ; $\underline{\underline{\Gamma}}$ est un tenseur d'interaction tenant compte de la forme de la lamelle (considérée ici comme un ellipsoïde aplati). Il en résulte que

$$\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\bar{\sigma}}} = \mu \underline{\underline{\mathbf{K}}} \left(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - \underline{\underline{\bar{\dot{\epsilon}}}} \right) \quad (\text{I - 27})$$

où le tenseur $\underline{\underline{\mathbf{K}}} = \left(\underline{\underline{\Gamma}}^{-1} / \mu + \underline{\underline{\mathbf{I}}} \right)$ dépend uniquement de la morphologie des lamelles.

Une fois fixés le tenseur des vitesses de déformation $\underline{\underline{\bar{\dot{\epsilon}}}}$ et le tenseur morphologique $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$, on peut calculer $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ par les relations

$$\begin{cases} \underline{\underline{\sigma}} = \mathbf{g}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}, \mu) \\ \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \mathbf{f}(\underline{\underline{\sigma}}) = \mathbf{f}(\mathbf{g}(\underline{\underline{\bar{\sigma}}}, \mu)) \end{cases} \quad (\text{I - 28})$$

où m et $\underline{\underline{\bar{\sigma}}}$ sont calculés de manière à satisfaire les conditions d'auto-cohérence :

$$\begin{cases} \langle \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \rangle = \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \\ \langle \underline{\underline{\underline{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \rangle = \underline{\underline{\underline{\sigma}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \end{cases} \quad (\text{I - 29})$$

où les expressions entre crochets indiquent des moyennes volumiques. Le taux de cisaillement microscopique $\dot{\gamma}^s$ et l'orientation des lamelles peuvent ensuite être déduits de la contrainte locale $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}$ à l'aide de la relation (I – 26).

Des textures simulées à l'aide de ce modèle ont permis de retrouver un certain nombre de caractéristiques expérimentales. Ainsi, en traction la texture de fibre est bien reproduite et, en cisaillement, on observe également la tendance à l'alignement des chaînes selon la direction du cisaillement. Toutefois, la non-prise en compte de la contribution de la phase amorphe à la déformation fait que le calcul sous-estime (surtout en cisaillement) largement le durcissement plastique. Le modèle auto-cohérent représentera d'autant moins la réalité que le taux de cristallinité est faible. Il a donc été nécessaire de développer un modèle prenant en compte spécifiquement la réponse de la phase amorphe, en combinaison avec la phase cristalline. A la température de sollicitation, la phase amorphe est caoutchoutique. Les modèles utilisés sont donc, en général, dérivés des théories de l'élasticité caoutchoutique (cf. 3.4.1) et plus précisément des théories statistiques de réseaux. Pour les polymères semi-cristallins, les nœuds du réseau sont à la fois les enchevêtrements et les cristallites. Les chaînes sont ainsi divisées en un certain nombre de sous-chaînes chacune reliant deux nœuds du réseau. Dahoun a proposé pour sa part de décrire le comportement mécanique global, en traction uniaxiale $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}})$ ou en cisaillement simple $\underline{\underline{\underline{\tau}}}(\underline{\underline{\underline{\gamma}}})$ sous la forme d'une combinaison du comportement plastique de la phase cristalline (indice c) et du comportement caoutchoutique de la phase amorphe (indice a), selon un modèle de Voigt :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}) &= v_c \underline{\underline{\underline{\sigma}}}_c(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}_c) + (1 - v_c) \underline{\underline{\underline{\sigma}}}_a(\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}_a) \\ \underline{\underline{\underline{\tau}}}(\underline{\underline{\underline{\gamma}}}) &= v_c \underline{\underline{\underline{\sigma}}}_c(\underline{\underline{\underline{\gamma}}}_c) + (1 - v_c) \underline{\underline{\underline{\tau}}}_a(\underline{\underline{\underline{\gamma}}}_a) \end{aligned} \quad (\text{I - 30})$$

où v_c est le taux de cristallinité en volume et où $\underline{\underline{\underline{\sigma}}}_c$ et $\underline{\underline{\underline{\tau}}}_c$ représentent les réponses de la phase cristalline à la contrainte globale, données par le modèle auto-cohérent à « un site ». Dans cette approximation, les deux phases en présence ont la même déformation, que l'on suppose égale à la déformation globale du matériau. Le modèle a été utilisé pour interpréter le comportement du PEEK à 180 °C. Comme le prouve la Figure I - 10, l'accord entre expérience et théorie est très bon.

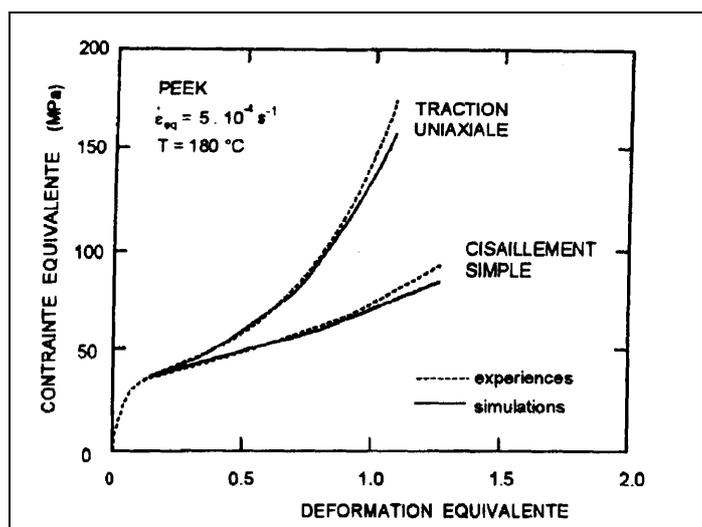


Figure I - 10 : Comparaison des courbes expérimentales contrainte équivalente – déformation équivalente (au sens de Von Mises) du PEEK à 180 °C (en pointillé), avec celles calculées par un modèle prenant en compte les comportements respectifs des phases cristalline et amorphe (trait plein) [42].

Grâce à ces nouveaux modèles, la prédiction des comportements macroscopiques à partir des processus microscopiques commence à devenir possible dans les cas relativement simples de chargements monotones et unidirectionnels. Toutefois, des recherches plus élaborées seront encore nécessaires pour modéliser des expériences complexes mettant en jeu des changements de régime plastique ou de microstructure en cours de déformation.

3.3.2 Les critères de plasticité

Si il est malgré tout facile d'identifier un seuil d'écoulement en sollicitation uniaxiale, il devient nécessaire de définir un « critère » dès lors que l'on désire traiter tous les cas de figure possibles. Le problème peut être formulé de la façon suivante : un tenseur de contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$ quelconque étant donné, il faut être capable de savoir si l'état de contrainte correspond au domaine élastique, ou au domaine plastique.

Pour résoudre le problème, on utilise généralement une fonction mathématique f appelée « critère de plasticité » et possédant les caractéristiques suivantes :

- si $f(\underline{\underline{\sigma}}) < 0$, la déformation est élastique ;
- si $f(\underline{\underline{\sigma}}) = 0$, le matériau se déforme plastiquement ;
- $f(\underline{\underline{\sigma}}) > 0$ étant impossible pour un comportement indépendant du temps et donc interdit.

Pour donner une forme à la fonction f , il faut prendre en compte des résultats expérimentaux. Le problème a tout d'abord été traité par von Mises et Tresca dans le cadre d'hypothèses simplificatrices :

- **Le milieu est supposé isotrope.**

Cette hypothèse, qui se traduit par l'équivalence des effets des contraintes principales sur le critère, permet de se placer dans le repère principal des contraintes. On peut donc écrire le critère de plasticité sous la forme générique suivante :

$$f(\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III}, \sigma_0) = 0 \quad (I - 31)$$

σ_0 étant la contrainte d'écoulement du matériau (seuil de plasticité en traction simple) et σ_I, σ_{II} et σ_{III} , les contraintes principales. Cette hypothèse nous permet également d'utiliser les invariants du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$: I_1, I_2 et I_3 , ainsi que ceux du déviateur des contraintes $\underline{\underline{s}}$ qui sont J_1, J_2 et J_3 .

- **Le milieu est supposé être insensible à la pression hydrostatique.**

Le critère peut alors être écrit en fonction du seul tenseur déviateur des contraintes $\underline{\underline{s}}$:

$$\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}} - p\underline{\underline{I}} \quad (I - 32)$$

$\underline{\underline{I}}$ étant le tenseur identité et p , la pression hydrostatique définie par

$$p = -\frac{1}{3} \text{tr}(\underline{\underline{\sigma}}) = -\frac{1}{3}(\sigma_I + \sigma_{II} + \sigma_{III}) \quad (I - 33)$$

Le critère se simplifie alors en

$$f(s_I, s_{II}, s_{III}, \sigma_0) = 0 \quad (I - 34)$$

- **Le comportement au seuil de plasticité est supposé identique en traction et en compression.**

Ceci permet de simplifier encore la forme du critère mais si, dans le cas de certains métaux, cette hypothèse est vérifiée, pour d'autres et plus généralement dans le cas des matériaux polymères, il n'est rien (« effet Bauschinger »).

3.3.2.1 Le critère de Tresca

Historiquement, il semble que ce soit le premier critère qui ait été proposé en mécanique des sols. Celui-ci suppose que le seuil de plasticité apparaît lorsque la contrainte de cisaillement maximale dépasse une valeur critique. Comme la contrainte de cisaillement est donnée par la différence des contraintes principales, on écrit :

$$f = \text{Max}_{i \neq j} (|\sigma_i - \sigma_j|) - \sigma_0 = 0 \quad (\text{I} - 35)$$

où i et j prennent les valeurs I, II et III.

Dans l'espace des contraintes principales, le critère de Tresca est représenté par un prisme droit à base hexagonale dont l'axe est la trissectrice du repère $(\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III})$.

3.3.2.2 Le critère de von Mises

Initialement développé pour rendre compte du comportement des métaux, le seuil de plasticité n'est plus lié ici à la contrainte de cisaillement maximale, mais à l'énergie de cisaillement. En effet, les déformations plastiques de ces matériaux sont les résultats de glissements, de cisaillements intracristallins gouvernés par les contraintes tangentielles. L'énergie de déformation est donnée par :

$$w_e = \int_0^\varepsilon \underline{\underline{\sigma}} : d\underline{\underline{\varepsilon}} \quad (\text{I} - 36)$$

On décompose chacune des quantités en leur partie sphérique et déviatorique

$$w_e = \int_0^\varepsilon \left[\underline{\underline{s}} + \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\sigma}}) \underline{\underline{I}} \right] : \left[d\underline{\underline{\varepsilon}}_D + \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}) \underline{\underline{I}} \right] \quad (\text{I} - 37)$$

L'énergie de déformation de cisaillement ou de distorsion vaut (avec μ coefficient de Lamé) :

$$w_D = \frac{1}{4\mu} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{s}} \quad (\text{I} - 38)$$

Le critère de von Mises exprime donc le fait que lorsque l'énergie de distorsion w_D atteint une valeur caractéristique du matériau, des déformations plastiques existent. On l'écrit sous la forme :

$$f(w_D, \sigma_0) = 0 \quad (\text{I - 39})$$

soit

$$\underline{s} : \underline{s} = \frac{2}{3} \sigma_0^2 \quad (\text{I - 40})$$

Si l'on introduit la contrainte équivalente au sens de von Mises sous la forme

$$\sigma_{\text{éq}} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{s} : \underline{s}} \quad (\text{I - 41})$$

on obtient alors pour le critère l'expression suivante

$$f = \sigma_{\text{éq}} - \sigma_0 = 0 \quad (\text{I - 42})$$

Dans l'espace des contraintes principales à trois dimensions, le critère de von Mises s'écrit donc

$$f = (\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2 - 2\sigma_0^2 = 0 \quad (\text{I - 43})$$

Il s'agit de l'équation d'un cylindre à base circulaire axé sur la trissectrice du repère $(\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III})$ et de rayon $R = \sqrt{2\sigma_0^2/3}$. En utilisant le déviateur des contraintes dans le repère principal, on obtient une autre forme du critère :

$$f_1 = s_I^2 + s_{II}^2 + s_{III}^2 - \frac{2}{3} \sigma_0^2 \quad (\text{I - 44})$$

Notons alors que $f=3f_1$. Si on introduit le deuxième invariant J_2 du tenseur des contraintes \underline{s} , on montre que l'équation (I - 44) est équivalente à

$$f_1 = J_2 - \frac{2}{3} \sigma_0^2 \quad (\text{I - 45})$$

Les deux critères précédents peuvent être représentés sur un même diagramme sous la forme d'une « section » ayant pour normale la direction [111] dans l'espace des contraintes principales (Figure I - 11a), ou encore sous la forme d'une « section » suivant le plan (σ_I, σ_{II}) de ce même espace (Figure I - 11b). On constate aisément sur ces diagrammes que la « surface de charge » correspondant au

critère de von Mises est une ellipse de révolution circonscrite à l'hexagone régulier que décrit le critère de Tresca.

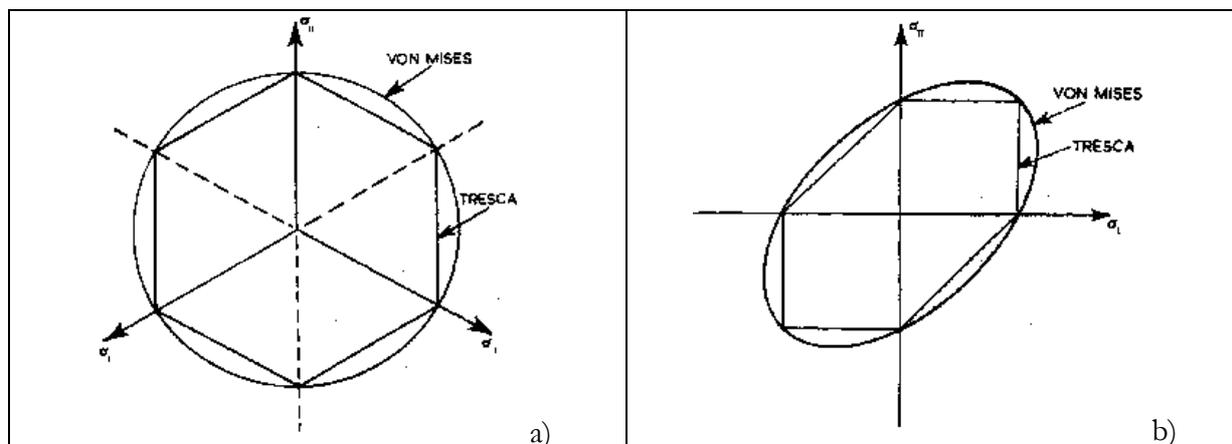


Figure I - 11 : Représentation [43] des critères de Tresca et de von Mises sous la forme (a) d'une section de normale [111] et (b) d'une section dans le plan (σ_I, σ_{II}) .

3.3.2.3 Amélioration des critères de plasticité de base

a) Croissance de la contrainte d'écoulement avec la déformation

Une amélioration immédiate des critères précédents a été de les étendre aux matériaux pour lesquels la contrainte d'écoulement croît avec la déformation. Pour cela, l'écriture du critère est identique à la différence près du terme σ_0 qui désormais est fonction de la déformation ($\sigma_0 = \sigma_0(\bar{\epsilon})$). Cet effet se traduit par une « dilatation » des frontières d'écoulement avec la déformation (Figure I - 12).

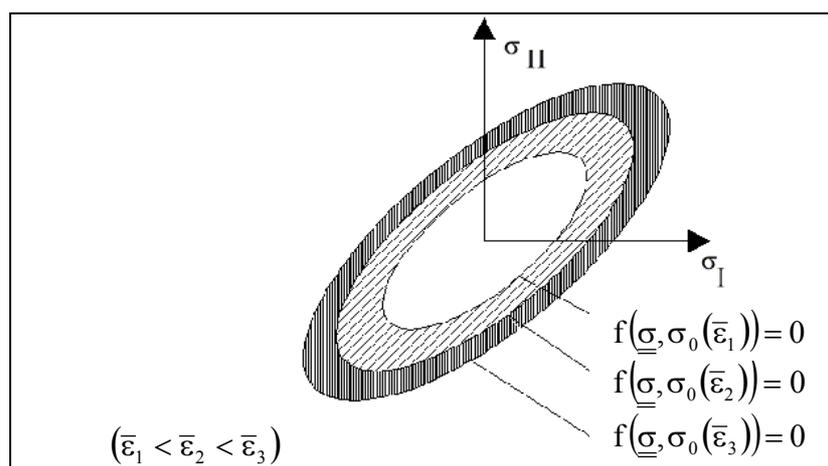


Figure I - 12 : Allure de l'ellipse de von Mises en contraintes planes* lorsque la déformation augmente.

* Définition des contraintes planes dans les axes principaux : $\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_I & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{II} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

b) Prise en compte de la pression hydrostatique

En réalité, il est bien connu que les polymères sont sensibles à la pression et à la contrainte hydrostatique. Cet effet est observé lorsqu'un polymère est sollicité sous des pressions variables. Le niveau de contrainte augmente avec la pression imposée [44]. Cet effet a aussi été mis en évidence par la différence de niveau de contrainte atteint selon le type de sollicitation [45, 46].

Ainsi, on observe que le niveau de contrainte atteint au seuil est plus élevé en compression qu'en traction [47]. Les polymères amorphes en dessous de leur température de transition vitreuse T_g semblent être les plus sensibles à cet effet.

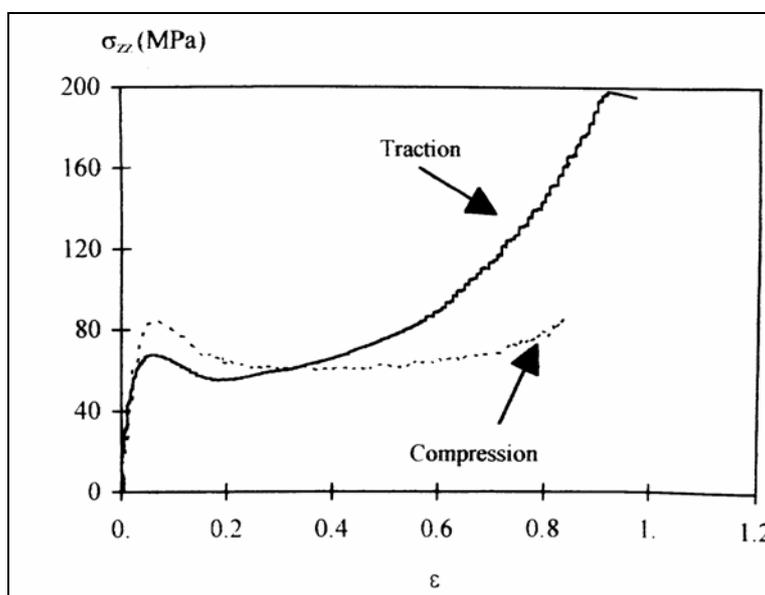


Figure I - 13 : Comparaison des contraintes axiales en traction et compression pour un polycarbonate à 10^{-4} s^{-1} [47].

L'application d'une pression hydrostatique p a pour effet de ralentir la dynamique des mouvements moléculaires associés aux différentes relaxations. Plusieurs auteurs (voir par exemple [48]) ont observé une augmentation des temps caractéristiques des relaxations principales et secondaires. Il semble aussi que la température de transition vitreuse [49], ainsi que le module [5], augmentent avec l'application d'une pression hydrostatique.

Une écriture des critères de Tresca et de von Mises « modifiés en pression » a alors été proposée [45]. Entre autre, d'après Sternstein [50], il apparaît qu'un critère de type von Mises modifié s'adapte bien à la plupart des polymères solides, sous la forme

$$f = \frac{1}{3} \left[(\sigma_I - \sigma_{II})^2 + (\sigma_{II} - \sigma_{III})^2 + (\sigma_{III} - \sigma_I)^2 \right]^{1/2} - \left(\tau_0 + \alpha \frac{\sigma_I + \sigma_{II} + \sigma_{III}}{3} \right) = 0 \quad (I - 46)$$

où τ_0 est ici la contrainte octaédrale critique à la limite élastique (observée en cisaillement pur) et α un paramètre ajustable. Comme le montre la Figure I - 14 dans le plan (σ_I, σ_{II}) , cette relation indique que la limite élastique en traction est inférieure à la limite élastique en compression. La surface de plasticité est l'ellipse de von Mises translatée selon la première diagonale de l'espace des contraintes principales $(\sigma_I, \sigma_{II}, \sigma_{III})$.

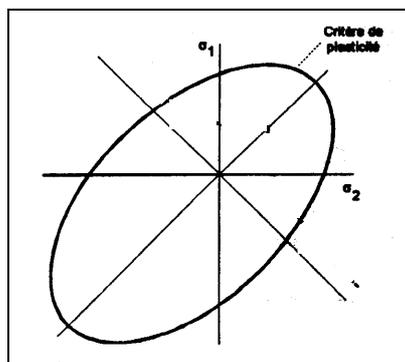


Figure I - 14 : Critères de plasticité de von Mises modifié [50].

Smith et Sidebottom (d'après [51]) proposent une alternative sous la forme du critère suivant :

$$f = \frac{C_D}{\sqrt{3}} \sqrt{J_2} - 3C_S p - \sigma_0 = 0 \quad (I - 47)$$

C_S et C_D étant des fonctions de la déformation du matériau.

3.3.2.4 Synthèse des critères de plasticité

Bowden [45] a montré que parmi ces principaux critères (développés initialement dans le cadre des métaux), celui de Tresca modifié en pression semblait mieux adapté à l'étude des polymères que celui de von Mises. Plus récemment, **Quinson** [52] a validé les critères de Tresca et von Mises modifiés en pression, pour trois polymères amorphes (PMMA, PS et PC) sollicités en traction et compression uniaxiales, bipoinçonnement et cisaillement simple. D'après l'auteur, le critère de von Mises modifié paraît plus adapté aux matériaux présentant des zones de déformation diffuses, alors que celui de Tresca modifié représente mieux les polymères dont la déformation se fait principalement par bandes de cisaillement. S'ils sont sensiblement équivalents, le critère de von Mises modifié semble être celui qui est le plus couramment utilisé, son expression analytique étant plus facile à utiliser. Il permet en outre d'éviter les points anguleux inhérents à la surface de charge de critère de Tresca.

3.4 L'écrouissage

3.4.1 Présentation

L'étude de l'évolution d'un polycarbonate avec la température a permis de montrer que l'amplitude du crochet de traction diminue à l'approche de la température de transition vitreuse et que le durcissement plastique tendait vers la courbe caractéristique du comportement hyperélastique aux environs de 150 °C.

Le fait que le comportement d'un verre amorphe se transforme progressivement en celui d'un polymère amorphe caoutchoutique tend à conforter l'idée que le durcissement structural des polymères vitreux est lié à l'orientation des macromolécules. En fait, il est courant d'admettre que l'écrouissage résulte de la diminution d'entropie au sein du « réseau » constitué par les chaînes orientées [10], réseau que l'on assimile à un réseau caoutchoutique.

Cette théorie est basée sur le concept selon lequel la résistance à l'écoulement dans le polymère serait composée de deux sources physiques distinctes : une résistance isotrope à la rotation des segments de chaîne, et une résistance anisotrope à l'alignement des chaînes elles-mêmes. Si la partie isotrope peut être reproduite à l'aide d'un scalaire, la réponse anisotrope nécessite l'emploi d'un tenseur [10] de façon à représenter la déformation par des segments de chaînes orientés dans les directions principales.

Les polymères sont ainsi représentés sous la forme d'un réseau tridimensionnel, les nœuds de réticulation se déplaçant de façon affine, identiquement à l'éprouvette prise dans sa globalité. Différentes topologies ont été proposées pour le réseau (Figure I - 15). Ainsi, dans le modèle classique de **Wang et Guth** (d'après [40]), on considère des mailles élémentaires cubiques à trois sous-chaînes par nœud. **Arruda et Boyce** [53] ont plus récemment critiqué ce modèle qui conduit à une surestimation du durcissement observé expérimentalement dans les élastomères. Ils ont alors suggéré d'adopter une maille à huit sous-chaînes équivalentes, plus proche de la répartition aléatoire de chaînes dans le matériau réel.

Enfin, **Wu et van der Giessen** [54] ont proposé un réseau idéal constitué d'une infinité de sous-chaînes interdépendantes, réparties de façon aléatoire. L'avantage de cette dernière méthode est de ne privilégier aucune direction.

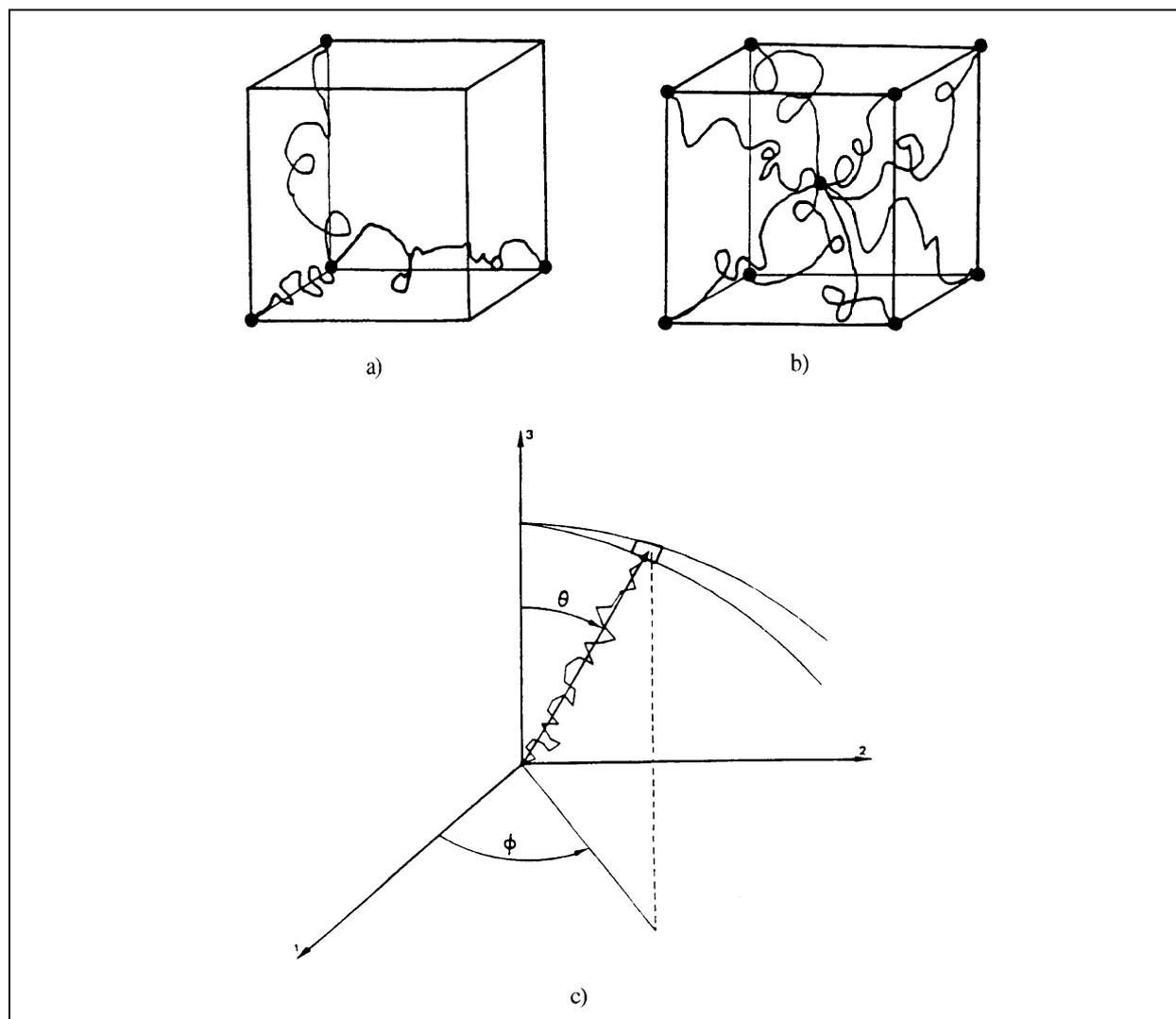


Figure I - 15 : Modèles de réseau. (a) Modèle à trois sous-chaînes. (b) Modèle à huit sous-chaînes. (c) Modèle à sous-chaînes multiples. (d'après [40]).

3.4.2 Modélisation de l'écrouissage

Haward et *al.* [55] ont été les premiers à incorporer la réponse élastique des caoutchoucs au sein d'une loi de comportement pour décrire l'écrouissage des polymères. Leur modèle suppose que le comportement du polymère vitreux en dessous de sa température de transition vitreuse peut être séparé en une composante visqueuse obéissant à une loi de type Eyring, et une composante élastique entropique due à la déformation du réseau de macromolécules. Le modèle est représenté par un amortisseur de Eyring qui reproduit la sensibilité à la vitesse de déformation ainsi que par un ressort de Langevin représentatif du durcissement structural. La statistique de Langevin permet, contrairement à la statistique Gaussienne, de respecter le fait qu'une chaîne ne peut s'allonger indéfiniment et donc, qu'ainsi, les conformations les plus étirées sont difficiles à atteindre.

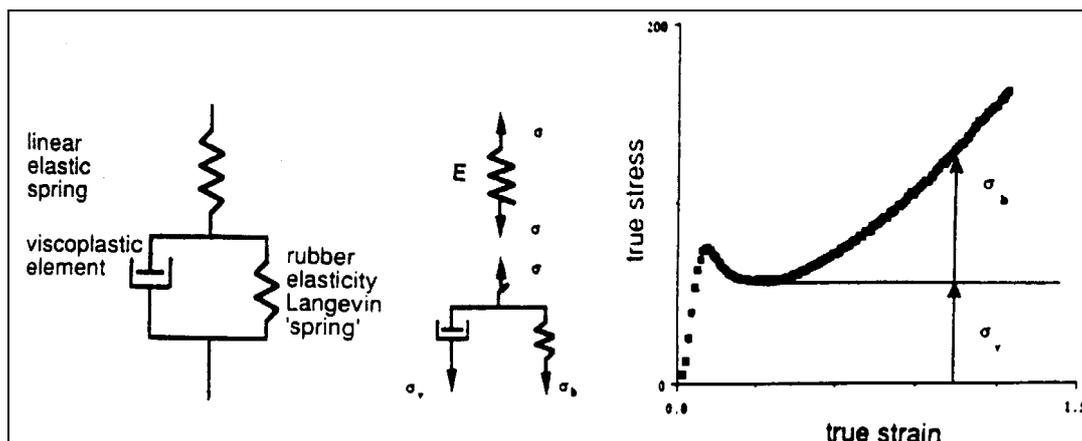


Figure I - 16 : Schéma du modèle de Haward et Thackray et courbe contrainte vraie – déformation vraie montrant les différentes contributions de chaque élément [56].

Du fait d'une transition entre les domaines de déformations élastique et plastique trop abrupte, d'autres approches ont été développées. La relation de base de l'élasticité caoutchoutique dans le cas d'un étirage uniaxial peut ainsi être exprimée sous la forme

$$\begin{cases} \sigma = \frac{f}{s} = 2C_1(\Lambda^2 - \Lambda^{-1}) \\ 2C_1 = \frac{\rho RT}{M_c} \end{cases} \quad (\text{I - 48})$$

où ρ est la masse volumique du polymère, M_c la masse molaire moyenne d'une chaîne, R la constante des gaz parfaits, s_0 la section initiale de l'éprouvette et Λ la déformation macroscopique ($\Lambda = s_0/s$). **Mooney** (d'après [40]) a rapidement constaté qu'aucun matériau polymère réel ne satisfaisait pleinement à l'ensemble des hypothèses nécessaires à l'établissement de cette relation. Il a ainsi proposé d'incorporer un second paramètre C_2 (qui exprime l'écart à l'« idéalité ») à la théorie, ce qui a conduit, la déformation s'effectuant à volume constant, à :

- dans le cas d'une sollicitation généralisée :

$$\sigma_x - \sigma_y = 2(\Lambda_x^2 - \Lambda_y^2)(C_1 + C_2\Lambda_z^2) \quad (\text{I - 49})$$

- dans le cas d'une traction uniaxiale selon x :

$$\sigma = 2C_1(\Lambda^2 - \Lambda^{-1}) \left(1 + \frac{C_2/C_1}{\Lambda} \right) \quad (\text{I - 50})$$

Rivlin (d'après [40]) a généralisé les résultats de Mooney, de sorte que les constantes C_1 et C_2 ont par la suite été appelées constantes de Mooney-Rivlin. Pendant le demi-siècle écoulé, de nombreux chercheurs ont tenté d'affiner ce modèle en restreignant autant que possible la part d'empirisme. L'ensemble des résultats présentés suggère que les variations de C_2 avec la structure et la composition peuvent être interprétées en termes de mobilité plus ou moins importante des nœuds du réseau, et d'imbrication ou de confinement des chaînes dont les domaines spatiaux accessibles aux différentes conformations se recouvrent très largement à l'état de repos.

3.5 Lois de comportements « globales »

3.5.1 Introduction

En toute généralité, nous venons d'analyser dans ce chapitre quelques aspects fondamentaux de la réponse mécanique des polymères à l'état solide.

Aux petites déformations, le comportement viscoélastique cède la place rapidement à un régime pré-plastique qui est très sensible à l'histoire thermomécanique du matériau. Les phénomènes transitoires liés au déclenchement de la plasticité semblent contrôlés à la fois par les mécanismes élémentaires de mobilité macromoléculaire et par des processus micromécaniques liés à l'activation de domaines cisailés.

Aux grandes déformations, les lois de comportement sont plus directement déterminées par l'orientation progressive du réseau de macromolécules, qui est fonction de la distribution des jonctions chimiques ou physiques (enchevêtrements) et de la morphologie cristalline. Il en résulte des propriétés spécifiques, telles que la recouvrance totale ou partielle de la déformation plastique lorsque le matériau est maintenu déchargé assez longtemps à une température assez élevée.

Chacune de ces parties peut être représentée par une ou plusieurs lois de comportement. Toutefois ces lois sont généralement exprimées dans le cas simple d'une sollicitation uniaxiale, leurs généralisations à un cas tridimensionnel nécessitant l'emploi de grandeurs équivalentes ou d'invariants de tenseurs, susceptibles de cacher certains effets liés par exemple à une anisotropie. Par ailleurs, de façon à limiter le nombre de paramètres à identifier ou encore pour des raisons de compatibilité avec un code de calcul éléments finis, on est parfois amené à négliger l'une des composantes de la déformation. Ainsi, il n'est pas rare dans une approche viscoplastique de négliger tout ou partie de la déformation élastique, en traitant l'ensemble de la déformation au sein d'un même formalisme. Ce type d'approximation risque donc de limiter le domaine de validité de la loi.

Les lois que nous allons étudier maintenant ont comme point commun de chercher à décrire le comportement des polymères solides dans leur globalité, même si elles peuvent à l'occasion être inspirées des précédentes. Nous passerons sous silence les lois dites « semi-analytiques » dont le principe simpliste consiste à approcher le comportement des polymères par des segments de droite dans les différentes zones de déformation [57]. Ces lois sont en général destinées à être utilisées par des codes de calcul inadaptés à des lois plus complexes.

Ainsi que nous l'avons constaté dans les paragraphes précédents, la rhéologie des polymères solides ductiles correspond à un comportement complexe élasto-visco-plastique. Dans la littérature, de nombreuses lois ont été proposées pour représenter un tel comportement. Elles reposent dans leur majorité sur un principe de séparation des variables. Elles sont constituées d'un terme F qui caractérise la sensibilité de la contrainte vis-à-vis de la déformation ϵ , d'un terme G caractérisant la sensibilité vis-à-vis de la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ et éventuellement d'un facteur d'échelle K_p .

Les lois de comportement peuvent être divisées en trois grandes catégories :

- Les lois « multiplicatives » du type : $\sigma(\epsilon, \dot{\epsilon}) = K_p \times F(\epsilon) \times G(\dot{\epsilon})$ (I - 51)
- Les lois « additives » du type : $\sigma(\epsilon, \dot{\epsilon}) = F(\epsilon) + G(\dot{\epsilon})$ (I - 52)
- Les lois « différentielles »

3.5.2 Les lois de comportement « multiplicatives » unidimensionnelles

On trouve de nombreuses lois de comportement multiplicatives [6] reliant la contrainte à la fois à la déformation et à la vitesse de déformation. Citons, par ordre chronologique, les lois (obtenues à partir de résultats de traction uniaxiale) de (d'après [6]) :

$$\text{Norton Hoff} \quad \sigma = K \dot{\epsilon}_p^m \quad (\text{I - 53})$$

$$\text{Hollomon [1945]} \quad \sigma = K \epsilon_p^n \dot{\epsilon}_p^m \quad (\text{I - 54})$$

$$\text{Marciniak [1970]} \quad \sigma = K (\epsilon_p + \epsilon_0)^n \dot{\epsilon}_p^m \quad (\text{I - 55})$$

$$\text{Green [1971]} \quad \sigma = K \epsilon_p^n (1 + \alpha \dot{\epsilon}_p^m) \quad (\text{I - 56})$$

$$\text{Wagoner [1985]} \quad \sigma = K (\epsilon_p + \epsilon_0)^n (\dot{\epsilon}_p / \dot{\epsilon}_0) \quad (\text{I - 57})$$

où ϵ_0 et $\dot{\epsilon}_0$ sont respectivement une déformation et une vitesse de déformation de référence, où m est le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation et où n est un coefficient d'écroutissage.

Ces lois, issues de la métallurgie, ont pour la plupart une origine phénoménologique et décrivent essentiellement le comportement plastique des matériaux. Elles ont parfois de ce fait quelques difficultés à reproduire correctement le durcissement structural des polymères qui ont un taux d'érouissage différent de celui des métaux [Figure I - 2]. Les polyméristes ont donc cherché des lois plus spécifiques capables de rendre compte de la non-saturation de la contrainte aux fortes déformations. Plusieurs approches ont été proposées. La première consiste à déterminer empiriquement une fonction qui rende bien compte des paramètres expérimentaux. C'est ainsi que **G'Sell et al.** [58] ont montré qu'il était souvent possible de rendre compte du comportement viscoplastique de la plupart des polymères à l'aide d'une fonction $F(\epsilon)$ de la forme

$$F(\epsilon) = V(\epsilon) \cdot C(\epsilon) \cdot H(\epsilon) \quad (\text{I - 58})$$

dans laquelle le terme $V(\epsilon)$ est représentatif de la forme du stade transitoire à la limite élastique, $C(\epsilon)$ d'un éventuel crochet et $H(\epsilon)$ du durcissement structural aux fortes déformations. En ce qui concerne le terme de dépendance en vitesse de déformation $G(\dot{\epsilon})$, les auteurs ont conservé une forme de type Norton Hoff (loi puissance).

Pour les polymères semi-cristallins à matrice caoutchoutique, la fonction $V(\epsilon)$ peut s'écrire en première approximation sous la forme (Figure I - 17a)

$$V(\epsilon) = [1 - \exp(-w \cdot \epsilon)] \quad (\text{I - 59})$$

Le produit du terme $C(\epsilon)$ et du terme précédent permet de prendre en considération un éventuel crochet de traction à condition d'introduire deux paramètres supplémentaires (Figure I - 17b) :

$$C(\epsilon) = [1 + a \cdot \exp(-b \cdot \epsilon)] \quad (\text{I - 60})$$

Quant au terme $H(\epsilon)$, il semble décrire correctement le durcissement structural aux grandes déformations des polymères soumis à un essai de traction uniaxial sous la forme (Figure I - 17c)

$$H(\epsilon) = \exp(h \cdot \epsilon^n) \quad (\text{I - 61})$$

où n a une valeur proche de 2 pour de nombreux polymères en traction (polyéthylène haute densité, polycarbonate, PMMA et polystyrène). D'autres chercheurs ont proposé une formulation différente pour décrire ce durcissement structural dans d'autres conditions de sollicitation. Ainsi, il

semble qu'un terme en $[\exp(h \cdot \epsilon)]$ (**Gopez** [59]) ou encore en $[1+h' \cdot \epsilon]$ (**Grenet** [60]) soit suffisant pour décrire l'écroissage de ces mêmes polymères soumis à des essais de cisaillement. Le durcissement y est en effet plus faible qu'en traction ou en compression (Figure I - 10). Pour des essais d'impact multiaxial, certains auteurs [61] ont proposé d'utiliser un terme de durcissement inversement proportionnel à la déformation de façon à rendre compte d'un adoucissement important observé dans certains polymères (polypropylène).

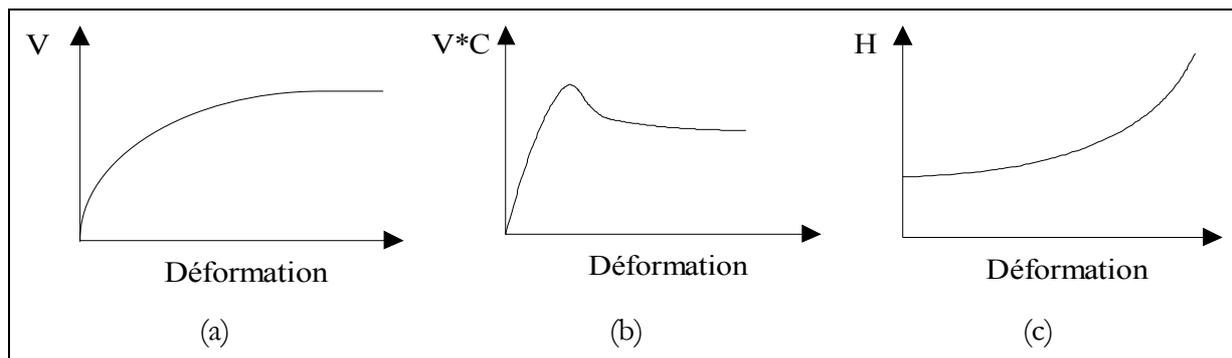


Figure I - 17 : Evolution caractéristique des différents termes entrant dans la composition de la loi de G'SELL.

En outre, pour prendre en compte les effets thermiques, **G'Sell** [7] a redéfini le facteur d'échelle K_p en y introduisant une loi de type Arrhénius :

$$K_p = K \cdot \exp(\beta/T) \quad (I - 62)$$

La loi de comportement complète (*loi de G'Sell* ou *loi polymère solide*) qu'il convient d'identifier s'exprime donc finalement sous la forme :

$$\sigma = K \cdot \exp(\beta/T) [1 - \exp(-w \cdot \epsilon)] [1 + a \cdot \exp(-b \cdot \epsilon)] \exp(h \cdot \epsilon^n) \dot{\epsilon}^m \quad (I - 63)$$

Le jeu de coefficients à déterminer est alors composé de :

- K : la consistance du matériau ;
- β : le coefficient de thermodépendance ;
- w : le coefficient viscoélastique ;
- a et b : les paramètres représentatifs d'un éventuel crochet de traction ;
- h et n : les coefficients caractéristiques du durcissement structural ;
- m : le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.

Toutes les zones de la courbes contrainte vraie – déformation vraie peuvent être décrites à l’aide de cette loi. Mais, un problème important réside dans l’absence d’unicité de solution : le terme crochet peut en effet interférer avec les coefficients caractéristiques du durcissement structural et rendre l’identification de ces paramètres impossible. C’est ce qui a incité certaines personnes à proposer une variante additive de la loi (I – 63).

3.5.3 Les lois de comportement « additives » unidimensionnelles

Comme le prouvent les modèles suivants, les lois additives sont généralement élasto-viscoplastiques. Le formalisme additif offre en effet une plus grande souplesse pour représenter un comportement complexe mais est par contre d’identification délicate. La contrainte est ici analysée en termes d’effet d’activation (ou enthalpique $\sigma_i(\varepsilon)$) et d’orientation (ou entropique $\sigma^*(\dot{\varepsilon})$) (I - 8).

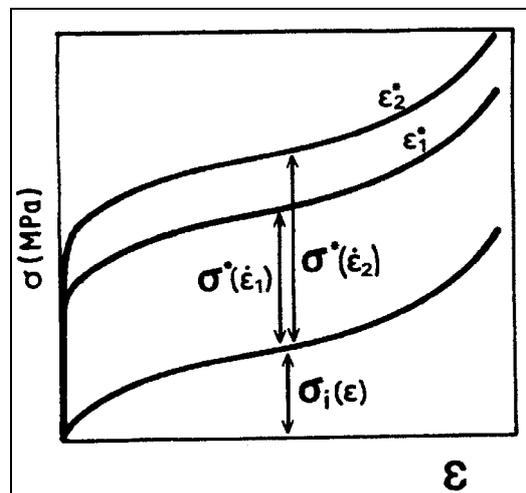


Figure I - 18 : Décomposition de la contrainte d’écoulement du PMMA vitreux en une composante d’activation σ_i et une composante orientationnelle σ^* (d’après [62]).

Le terme σ_i qui mesure en quelque sorte l’effet de la déformation plastique vraie accumulée dans le matériau depuis sa création agit comme une force qui tend à faire revenir la matière dans son état initial non déformé [63]. Parmi les expressions qui figurent dans la littérature et qui rendent compte de ce phénomène d’élasticité caoutchoutique, citons par exemple celle proposée par **Treloar** [64] pour sa simplicité, et qui n’est en fait qu’un cas particulier de l’équation (I – 48) :

$$\sigma_i(\varepsilon) = K[\exp(2\varepsilon) - \exp(-\varepsilon)] \quad (\text{I - 64})$$

Le second terme σ^* , traditionnellement appelé *contrainte effective*, qui reflète la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation peut quant à lui s’écrire sous la forme :

$$\sigma^*(\dot{\epsilon}) = -m \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0}\right) \quad (\text{I - 65})$$

L'équation complète suivante, proposée par **G'sell** [7] à partir de l'analyse effectuée par **Ward** [43]

$$\sigma = K[\exp(2\epsilon) - \exp(-\epsilon)] - m \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0}\right) \quad (\text{I - 66})$$

n'a pas permis de reproduire le terme crochet observé expérimentalement dans le cas d'un polycarbonate. Elle a néanmoins permis de reproduire le comportement d'un polyéthylène en traction [4].

Contrairement à la loi précédente, **Belcadi** [65] a proposé pour décrire le comportement d'un polycarbonate prédéformé à froid d'utiliser une loi avec seuil :

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_0 \cdot (\exp(\epsilon/\epsilon_c) - 1) \quad (\text{I - 67})$$

où $(1/\epsilon_c)$ représente la pente de la droite $(d\sigma/d\epsilon)$ en fonction de la contrainte vraie σ (cette pente caractérise la consolidation du matériau). σ_s est la contrainte au seuil d'écoulement plastique et le rapport $\sigma_0/\epsilon_c = (d\sigma/d\epsilon)_{\sigma=\sigma_s}$ correspond au taux de consolidation au seuil d'écoulement plastique. Cette loi ressemble à la loi de **Voce** (d'après [65]), initialement appliquée aux matériaux métalliques mais présente la différence fondamentale par rapport à celle-ci d'éviter le phénomène de saturation de la contrainte, grâce à la concavité de l'exponentielle croissante. L'auteur montre que le comportement uniaxial est décrit de façon satisfaisante avec cette loi, même si elle ne permet pas de modéliser correctement le crochet de traction. Par ailleurs, si le paramètre ϵ_c ne semble ni affecté par l'orientation ni par la prédéformation, il n'en est pas de même des paramètres σ_s et σ_0 , qui deviennent par conséquent des caractéristiques de l'anisotropie. On notera également que cette loi est définie pour une vitesse de déformation donnée. Voce (d'après [65]) avait toutefois prévue une dépendance en vitesse de la forme :

$$\beta = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \ln \dot{\epsilon}} \right)_\epsilon \quad (\text{I - 68})$$

En appliquant cette dépendance à la loi proposée par Belcadi, celle-ci devient :

$$\sigma = \sigma_s + \sigma_0 \cdot (\exp(\epsilon/\epsilon_c) - 1) + \beta \ln \dot{\epsilon} \quad (\text{I - 69})$$

Bisilliat [47] propose quant à elle une formulation élasto-viscoplastique à seuil dans laquelle la déformation plastique obéit à :

$$\sigma_p = K_s \left[1 + \theta \varepsilon_p \exp(-w \varepsilon_p^2) \right] + K \exp(\beta/T) \exp(h \varepsilon_p^2) \dot{\varepsilon}_p^m \quad (\text{I - 70})$$

où ε_p est la composante plastique de la déformation. Le formalisme permet de reproduire correctement le crochet de traction observé dans un polycarbonate.

3.5.4 Les lois de comportement « différentielles » unidimensionnelles

Certaines lois ont été formulées en s'appuyant sur l'analogie entre le comportement des milieux viscoélastiques et celui des modèles composés de diverses combinaisons de ressorts et d'amortisseurs montés en série ou en parallèle. C'est le cas du modèle proposé par **Vest Amoedo et al.** [66] qui utilisent un ressort pour modéliser le comportement élastique ainsi que trois éléments montés en parallèle :

- L'un permet de caractériser les liaisons intermoléculaires et est à l'origine du comportement au seuil de plasticité ;
- Un amortisseur d'Eyring permet de prendre en compte le comportement visqueux ;
- Un élément d'élasticité caoutchoutique de Mooney – Rivlin permet de décrire la composante liée à l'orientation des macromolécules aux fortes déformations.

La loi de comportement associée à ce modèle se présente sous la forme d'une équation différentielle :

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = E \cdot \left[1 - \frac{K}{\dot{\varepsilon}} \cdot \frac{\sinh \left(V \left(\frac{C_1 \sigma}{C_1 + \left(\frac{C_1 - C_1 \Phi_0}{\Phi_0} \right) \cdot e^{-C_1 \varepsilon}} - \beta (e^{2\varepsilon} - e^{-\varepsilon}) \right) \right)}{4kT} \right] \quad (\text{I - 71})$$

Cette équation nécessite une intégration numérique pour pouvoir être utilisée.

G'sell et al. [7] ont basé, quant à eux, leurs travaux sur le fait que la déformation plastique serait liée à l'amorçage et à la propagation de défauts, tout comme dans le cas du modèle de Perez. Sans chercher à en proposer la nature, les auteurs présument de leur existence en proposant un modèle dans lequel ils supposent que les défauts linéaires localisés (*ondes de plasticité*) se forment et se propagent sous l'action d'une contrainte effective σ^* . La déformation plastique aurait lieu à une certaine vitesse lorsqu'une densité critique de défauts serait atteinte. La vitesse de déformation plastique peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{\epsilon}_p = \rho(\sigma^*, \epsilon) \cdot v(\sigma^*) \cdot \bar{b} \quad (\text{I - 72})$$

où ρ correspond à la longueur de l'onde de plasticité par unité de volume, v sa vitesse moyenne de propagation et \bar{b} la distance moyenne caractéristique d'un cisaillement élémentaire causé par le passage de l'onde. Dans leur modèle, les auteurs suivent les hypothèses de GILMAN et JOHNSTON, à savoir que la vitesse de propagation des défauts peut changer instantanément avec la contrainte effective alors que la densité de défauts n'augmente que progressivement avec la déformation. G'sell a proposé, en première approximation, que dans le cas d'un solide rigide-plastique idéal, la densité de défauts présentait une augmentation linéaire jusqu'à un seuil critique correspondant à une déformation ϵ_c , ce qui peut se traduire sous la forme :

$$\rho(\epsilon) \begin{cases} 0 & \text{pour } \epsilon = 0 \\ \rho_1 \frac{\epsilon}{\epsilon_c} & \text{pour } 0 < \epsilon < \epsilon_c \\ \rho_1 & \text{pour } \epsilon > \epsilon_c \end{cases} \quad (\text{I - 73})$$

Ceci conduit, si l'on néglige la zone de déformation élastique à :

$$\begin{cases} \sigma \approx \sigma^* = \sigma_1^* + \left(\frac{v_a}{\mu} \right) \frac{kT}{v_a} \ln \left(\frac{\epsilon_c}{\epsilon} \right) & \text{pour } \epsilon < \epsilon_c \\ \sigma = \sigma_1^* & \text{pour } \epsilon > \epsilon_c \end{cases} \quad (\text{I - 74})$$

où σ_1^* représente la valeur de la contrainte effective après le passage de la zone transitoire et où μ correspond au volume d'activation de la phase de propagation. Les courbes obtenues à partir de ces équations présentent, comme on peut le voir sur la Figure I - 19c, l'adoucissement attendu. Celui-ci est plus ou moins accentué selon la valeur du rapport v_a/μ (qui gouverne l'influence de la phase d'activation par rapport à celle de propagation). Le début de la courbe n'est par contre pas représentatif de la réalité. C'est pourquoi une loi élastoplastique a été introduite en supposant que :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{el.} + \dot{\epsilon}_p$$

$$\text{avec } \dot{\epsilon}_{el.} = \frac{\dot{\sigma}}{E} = \frac{1}{E} \frac{d\sigma}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{dt} = \frac{\dot{\epsilon}_1}{E} \frac{d\sigma}{d\epsilon} \quad (I - 75)$$

$$\text{et } \dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_1 \exp\left(\frac{\mu(\sigma^* - \sigma_1^*)}{kT}\right) \cdot \frac{\epsilon}{\epsilon_c}$$

Cela conduit à l'équation différentielle suivante

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = E \left[1 - \exp\left(\frac{\mu(\sigma - \sigma_1(\epsilon) - \sigma_1^*)}{kT}\right) \cdot \frac{\epsilon}{\epsilon_c} \right] \quad (I - 76)$$

Cette équation différentielle ne peut malheureusement pas être résolue de façon analytique, mais une intégration numérique conduit à une courbe identique à celle représentée sur la Figure I - 19-d.

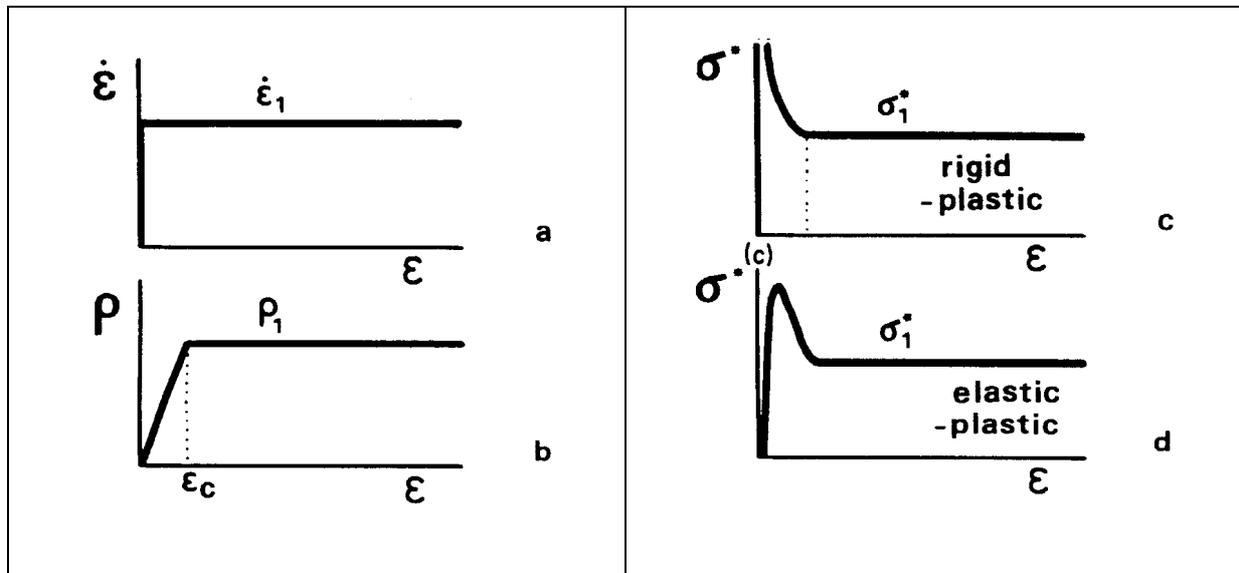


Figure I - 19 : (a) Vitesse de déformation totale en fonction de la déformation lors d'un essai de traction à vitesse de déformation constante, (b) dépendance linéaire de la densité de défauts en fonction de la déformation. Evolution de la contrainte effective en fonction de la déformation pour : (c) un polymère rigide-plastique, (d) un polymère élastoplastique (d'après [7]).

Cette loi permet de retrouver toutes les étapes de la courbe contrainte vraie – déformation vraie, c'est-à-dire la partie élastique, le crochet (en se basant sur l'hypothèse qu'une certaine quantité de défauts est nécessaire à l'amorçage de la plasticité) et la partie plastique (décrite à travers la contrainte interne, généralement issue de l'élasticité caoutchoutique).

Récemment, ces lois ont été appliquées à un polycarbonate en traction et en compression. Une fois levées certaines de leurs limitations (thermodépendance, durcissement ...), elles s'avèrent

relativement équivalentes et conduisent à de bons résultats sans être toutefois aptes à reproduire tous les modes de sollicitation, avec un jeu de paramètres unique [47].

3.5.5 Généralisation tridimensionnelle des lois de comportement viscoplastiques

La majorité des lois citées plus haut ont généralement été exprimées par leurs auteurs pour décrire les réponses des polymères à des sollicitations uniaxiales (traction, compression, cisaillement ...). La généralisation à trois dimensions de ces formulations passe en général par le choix de grandeurs équivalentes. C'est le cas par exemple de la déformation et de la vitesse de déformation qui sont prises en compte *via* les grandeurs équivalentes $\bar{\epsilon}$ et $\dot{\bar{\epsilon}}$, que l'on définit généralement, pour une particule située initialement en x_0 , par :

$$\bar{\epsilon}(x(x_0, t)) = \int_{t_0}^t \dot{\bar{\epsilon}}(x(x_0, \tau)) d\tau \quad (\text{I - 77})$$

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} (\underline{\dot{\underline{\epsilon}}} : \underline{\dot{\underline{\epsilon}}})} \quad (\text{I - 78})$$

De même, on choisit souvent de calculer la contrainte sous la forme de la contrainte équivalente au sens de von Mises (I – 41). Cela suppose que le matériau est insensible à la pression hydrostatique ce qui est rarement le cas pour les polymères. Par ailleurs, l'anisotropie induite dans le matériau est rarement prise en compte. La généralisation tridimensionnelle est donc loin d'être triviale.

4 Conclusion

Nous avons évoqué au cours de ce chapitre un certain nombre de théories, chacune d'entre elles ne permettant d'expliquer, dans le meilleur des cas, que certains aspects des comportements rencontrés dans les polymères solides. Parmi ces théories, plusieurs ont permis d'élaborer des lois de comportement. Mais pour la plupart, elles ne permettent de décrire qu'une fenêtre souvent restreinte du comportement des matériaux. Identifiées en conditions simples, elles sont impossibles à étendre à des situations plus complexes. Il est actuellement illusoire de penser trouver une loi mathématique unique capable de modéliser le comportement de tous les matériaux, pour tous les modes de sollicitation et dans n'importe quelles conditions. C'est pourquoi, l'expérimentateur doit encore prendre soin de caractériser son matériau suivant un mode de déformation aussi proche que possible de celui de l'application à laquelle il est destiné. Le chapitre II sera consacré à ce thème. En

outre, pour un même matériau et un même modèle, on est encore amené à définir plusieurs jeux de paramètres, chacun s'adaptant mieux à un domaine de variation ou à un type de chargement.

Trouver un formalisme de loi de comportement adapté à son cas de figure n'est pas le seul problème. En effet, un modèle donné ne peut s'identifier correctement que si l'on dispose de résultats d'essais en nombre suffisant, mettant en jeu une plage de variation importante de chacun des coefficients à identifier. L'identification d'une loi de comportement est donc une tâche difficile, qui n'obéit pas qu'à des règles rigoureuses, et qui doit souvent s'effectuer au cas par cas. Pourtant un modèle qui a l'ambition de devenir une loi doit avoir un caractère de généralité tel qu'identifié sur un nombre restreint d'expériences, il soit aussi représentatif d'autres types de sollicitations avec un caractère prévisionnel. Comme nous l'avons constaté au cours de ce chapitre, le prix à payer est le nombre de coefficients et les difficultés qui sont liées à ce nombre.

En conclusion, le choix d'une loi de comportement reposera sur au moins trois critères :

1. sa capacité à interpréter le comportement du matériau que l'on cherche à modéliser. Gardons à l'esprit ici, que si nous ne disposons pas d'une loi unique avérée, nous disposons d'approches **fondamentales partielles** très **instructives** et d'approches **globales approximatives** mais **efficaces**. Cette efficacité reste toutefois conditionnée par une identification correcte des paramètres ;
2. la facilité avec laquelle on pourra déterminer ses différents coefficients, à partir de mesures rhéologiques simples. **Agassant** [22] cite à cet égard le cas de la loi d'Oldroyd à huit constantes (loi de comportement viscoélastique), dont seulement deux ou trois coefficients pourront être mesurés à l'aide d'un dispositif expérimental ; les autres coefficients seront choisis de façon à ce que le calcul soit le plus proche possible des mesures, mais le passage à une autre géométrie sera sujet à caution ;
3. la possibilité, dans notre contexte, d'utiliser cette loi de comportement dans des modèles de simulation numérique.

Bibliographie du chapitre 1

-
- [1] **C. G'SELL and A. MARQUEZ-LUCERO**, « *Plastic Instability* », Paris : Presses de l'Ecole des Ponts et Chaussées, p. 159, (1985)
 - [2] **J. LEMAITRE et J.-L. CHABOCHE**, « *Mécanique des matériaux solides 2° Ed.* », Paris : DUNOD, (1988)

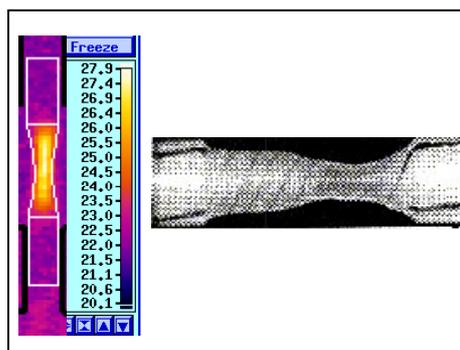
- [3] **C. G'SELL**, « *Instabilités de déformation pendant l'étirage des polymères solides* », Revue Phys. Appl., **23**, pp. 1085-1101, (1988)
- [4] **N. A. ALY-HELAL**, « *Etude et simulation du développement de la striction dans le polyéthylène haute densité* », Thèse Institut National Polytechnique de Lorraine, (1982)
- [5] **P. FERRANDEZ**, « *Adaptation de l'essai de bipoinçonnement à l'étude des polymères. Influence des conditions de cristallisation sur le comportement rhéologique et tribologique d'un polyéthylène haute densité* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1987)
- [6] **D. PRIADI**, « *Etude expérimentale et théorique des lois de comportement et de la striction de tôles d'acier pour la simulation de l'emboutissage* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1993)
- [7] **C. G'SELL et J. J. JONAS**, « *Yield and Transient Effects during the Plastic Deformation of Solid Polymers* », J. Mater. Sci., **16**, p. 1956, (1981)
- [8] **A. MOLINARI et C. G'SELL**, « *Instabilités plastiques dans les polymères* », dans « Introduction à la mécanique des polymères », C. G'SELL et J. M. HAUDIN (Eds), INPL, p. 321-344, (1995)
- [9] **C. G'SELL, H. EL BARI, J. PEREZ, J. Y. CAVAILLE and G. P. JOHARI**, « *Effect of Plastic Deformation on the Microstructure and Properties of Amorphous Polycarbonate* », Mater. Sci. Eng., A **110**, pp. 223 – 229, (1989)
- [10] **M. C. BOYCE and M. ARRUDA**, « *An Experimental and Analytical Investigation of the Large Strain Compressive and Tensile Response of Glassy Polymers. An Experimental and Analytical Investigation of the Large Strain Compressive and Tensile Response of Glassy Polymers* », Polym. Eng. Sci., Vol 30, N° 20, pp. 1288-1298, (1990)
- [11] **T. A. TERVOORT**, « *Constitutive modelling of Polymer Glasses ; Finite Non-linear Viscoelastic Behaviour of Polycarbonate* », Eindhoven : Eindhoven University of Technology, (1996)
- [12] **I. V. YANNAS and R. R. LUISE**, « *The Strength and Stiffness of Polymers* », Eds. A. E. Zachariades and R. S. Porter (Marcel Dekker, New-York), p. 255, (1983)
- [13] **N. BROWN**, « *Yield behavior of polymers* », in « Failure of Plastics », W. BROSTOW and CORNELIUSSEN, (Eds), pp. 98-118, Hanser : Munich, (1986)
- [14] **J. MANDEL**, « *Cours de Mécanique des milieux continus* », Annexe XXI, Paris : Gauthiers-Villard, (1966)
- [15] **Y. LETERRIER and C. G'SELL**, « *Viscoelastic Analysis of a Polyurethane Thermosetting Resin under Relaxation and at Constant Compression Strain Rate* », J. Mater. Sci., **23**, pp. 4209-4216, (1988)
- [16] **A. SOUISSI**, « *Description du comportement des métaux à chaud à l'aide d'une loi intégrale* », Thèse Paris VI, (1969)
- [17] **F. SIDOROFF**, « *Variables internes en viscoélasticité et viscoplasticité* », Thèse de Doctorat d'Etat Paris VI, (1976)
- [18] **R. A. SCHAPERY**, « *On the Characterization of Non-linear Viscoelastic Materials* », Journal Of Polymer Engineering Science, **9**, pp. 295-310, (1969)
- [19] **P.-G. DE GENNES**, « *Scaling Concepts in Polymer Physics* », Cornell University Press, Ithaca, N.Y., (1979)
- [20] **C. BULTEL, J. M. LEFEBVRE and B. ESCAIG**, « *On the Workhardening Rate of Glassy Polymers* », Polymer , **24**, pp. 476-480, (1983)

- [21] **Y. IMAY and N. BROWN**, « *Tensile Deformation of Polychlorotrifluoroethylene in He, N₂, Ar, O₂ and CO₂ environments* », *Polymer*, **18**, pp. 298-303, (1977)
- [22] **J. F. AGASSANT, P. AVENAS et J. P. SERGENT**, « *La mise en forme des matières plastiques : approche thermomécanique* », Technique et Documentation – Lavoisier : Paris, (1989)
- [23] **H. EL BARI**, « *Etude des mécanismes de la déformation en cisaillement simple des polymères vitreux* », Thèse Institut National Polytechnique de Lorraine, (1987)
- [24] **C. G'SELL**, « *Plastic Deformation of Glassy Polymers : Constitutive Equations and Macromolecular Mechanisms* », *Strength of Metals and Alloys*, Ed. H. J. Mc Queen et al, **3**, Pergamon Press Oxford, UK, pp. 1943-1982, (1986)
- [25] **H. EYRING**, « *Viscosity, Plasticity, and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates* », *J. Chem. Phys.*, **4**, pp. 283, (1936)
- [26] **J. C. BAUWENS**, « *Relation between the Compression Yield Stress of PVC and the loss peak in the β relaxation range* », *J. Polym. Sci.*, **33**, pp. 123-133, (1971)
- [27] **C. BAUWENS-CROWET**, « *The Compression Yield Behaviour of Polymethyl Methacrylate over a Wide Range of Temperatures and strain rates* », *J Mater. Sci*, **8**, pp. 968-979, (1973)
- [28] **R. E. ROBERTSON**, *J. Chem. Phys.*, **44**, p. 3950, (1966)
- [29] **M. THEODOROU and E. W. SUTER**, « *Shape of unperturbed linear polymers : polypropylene* », *Macromolecules*, **18**, n°6, pp. 1206-1214, (1984)
- [30] **Z. XU, B. JASSE and L. MONNERIE**, « *Fourier Transform Infrared Study of Conformational Changes occurring at the Yield Point in Uniaxially Drawn Polymers* », *J. Polym. Sci.*, **27**, pp. 355-368, (1989)
- [31] **A. S. ARGON and M. I. BESSENOV**, *Polym. Eng. Sci.*, **17**, p. 174, (1977)
- [32] **P. B. BOWDEN and S. RAHA**, « *A Molecular Model for Yield and Flow in Amorphous Glassy Polymers Making Use of a Dislocation Analogue* », *Phil. Mag.*, **29**, pp. 149-166, (1974)
- [33] **J. J. GILMAN**, *J. Appl. Phys.*, **44**, p. 675, (1973)
- [34] **J. C. M. LI**, « *Physical Chemistry of some Microstructural Phenomena* », *Metall. Trans. A*, **9**, pp. 1353-1380, (1978)
- [35] **M. C. BOYCE, D. M. PARKS and A. S. ARGON**, « *Large Inelastic Deformation of Glassy Polymers, Part 1 : Rate Dependent Constitutive model* », *Mech. Mater.*, **7**, p. 15, (1988)
- [36] **B. ESCAIG and J. M. LEFEBVRE**, « *Thermodynamic and Kinetic Analysis of Non-elastic Deformation in Polymeric Glasses* », *Revue de Physique Appliquée*, **13**, n° 6, pp. 285-292, (1978)
- [37] **J. M. LEFEBVRE and B. ESCAIG**, « *The Role of Molecule Mobility in the Yielding of Solid Polymers* », *Polymer*, **34**, pp. 518-528, (1993)
- [38] **J. PEREZ et J. M. LEFEBVRE**, « *Modélisation du comportement viscoélastique et plastique des polymères vitreux* », dans « *Introduction à la mécanique des polymères* », C. G'SELL et J. M. HAUDIN (Eds), INPL, pp. 289-318, (1995)
- [39] **J. PEREZ**, « *Physique et mécanique des polymères amorphes* », Technique & Documentation – Lavoisier : Paris, (1992)
- [40] **J. M. HAUDIN et C. G'SELL**, « *Mécanismes microscopiques de déformation des polymères semi-cristallins* », dans « *Introduction à la mécanique des polymères* », C. G'SELL et J. M. HAUDIN (Eds), INPL, pp. 251-273, (1995)

-
- [41] **A. DAHOUN, G. R. CANOVA, A. MOLINARI, M. J. PHILIPPE and C. G'SELL**, « *The Modelling of Large Strain Textures and Stress-Strain Relations of Polyethylene* », *Textures and Microstructures*, **14-18**, pp. 347-354, (1991)
- [42] **A. DAHOUN, C. G'SELL, A. MOLINARI and G. CANOVA**, « *Plastic Behavior and Deformation textures of poly(ether ether ketone) under Uniaxial Tension and Simple Shear* », in « *Use of Plastics and Plastic Composites : Materials and Mechanical Issues* », ASME, New-York, NY, pp. 57-76, (1993)
- [43] **I. M. WARD**, « *Review : The Yield Behaviour of Polymers* », *Journal of Materials Science*, **6**, pp. 1397-1417, (1971)
- [44] **K. MATSUSHIGE, S. V. RADCLIFFE and E. BAER**, « *The Mechanical Behavior of Poly(methyl methacrylate) under Pressure* », *J. Polym. Sci.*, **14**, pp.703-721, (1976)
- [45] **P. B. BOWDEN and J. A. JUKES**, « *The Plastic Flow of Isotropic Polymers* », *J. Mat. Sci.*, **7**, pp. 52-63, (1972)
- [46] **C. G'SELL, B. DUSAUSOY, M. ABOULFARAJ and J. M. HIVER**, « *Validity of the Accumulated True Strain in the Constitutive Equations of Glassy Polymers* », in « *Deformation, Yield and Fracture of Polymers* », The Institut of Materials, London, UK, (1994)
- [47] **M. L. BISILLIAT**, « *Comportement mécanique d'un polycarbonate à grande vitesse de sollicitation - Etude expérimentale et simulation* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1997)
- [48] **J. TATIBOUET and L. PICHE**, « *Ultrasonic Investigation of Semi-crystalline Polymers - Study of PET* », *Polymer*, **32**, pp. 3147-3151, (1991)
- [49] **J. VERDU**, « *Elasticité caoutchoutique* », dans « *Introduction à la mécanique des polymères* », C. G'SELL et J. M. HAUDIN (Eds), INPL, pp. 321-344, (1995)
- [50] **S. S. STERNSTEIN**, « *Yielding in Glassy Polymers* », in « *Polymeric Materials* », ASM, Metals Park, Oh, pp. 369-410, (1975)
- [51] **F. SCHMIT**, « *Approches mécaniques globale et locale de la rupture de polycarbonate* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1997)
- [52] **R. QUINSON**, « *Caractérisation et modélisation de la déformation non élastique des polymères amorphes à l'état solide* », Thèse Institut des Sciences Appliquée de Lyon, (1995)
- [53] **E. M. ARRUDA and M. C. BOYCE**, « *A Three-dimensional Constitutive Model for the Large Stretch Behavior of Rubber Elastic Materials* », *J. Mech. Phys. Solids*, **41**, pp. 389-412, (1993)
- [54] **P. D. WU and E. VAN DER GIESSEN**, « *On Improved 3-D non-Gaussian Network Models for Rubber Elasticity* », *Mech. Res. Comm.*, **19**, pp.427-433, (1992)
- [55] **R. N. HAWRAD and G. THACKRAY**, « *The Use of Mathematical Model to Describe Isothermal Stress-Strain Curves in Glassy Thermoplastics* », *Proc. Roy. Soc.*, **302**, pp. 453-472, (1968)
- [56] **P. D. WU and E. VAN DER GIESSEN**, « *On Neck Propagation in Amorphous Glassy Polymers Under Strain Tension* », *Intern. J. Plast.*, **11**, n° 3, pp. 211-235, (1995)
- [57] **R. P. NIMMER**, « *An Analytic Study of Tensile and Puncture Test Behavior as a Function of Large-Strain Properties* », *Polym. Eng. Sci.*, **27**, n°4, pp.263-269, (1987)
- [58] **C. G'SELL and J. JONAS**, « *Determination of the Plastic Behaviour of Solid Polymer at Constant True Strain Rate* », *J. Mater. Sci.*, **14**, pp.583-591, (1979)
- [59] **A. J. R. GOPEZ**, « *Etude de la déformation du polycarbonate en cisaillement simple* », Thèse Institut National Polytechnique de Lorraine, (1983)

- [60] **J. GRENET and C. G'SELL**, « *Observation and Modelling of Shear-Band Propagation in Glassy Polycarbonate* », *Polymer*, **31**, pp. 2057-2065, (1990)
- [61] **N. BILLON, L. MAURIN and Y. GERMAIN**, « *Characterization of Ductile Polymers at High Strain-Rates. Experimental and Theoretical Considerations* », 1st International Conference on Mechanics of Time Dependent Materials, Ljubljana, Slovenia, (1995)
- [62] **C. G'SELL**, « *Lois de comportements mécanique des polymères solides* », dans « *Introduction à la mécanique des polymères* », C. G'SELL et J. M. HAUDIN (Eds), INPL, pp. 321-344, (1995)
- [63] **D. G. FOTHERINGHAM and B. W. CHERRY**, *J. Mater. Sci.*, **13**, (1978)
- [64] **L. R. G. TRELOAR**, *Rep. Prog. Phys.*, **36**, p. 755, (1973)
- [65] **M. BELCADI**, « *Comportement mécanique d'un polycarbonate prédéformé par laminage* », Thèse Université de Poitiers, ENSMA, (1990)
- [66] **T. A. VEST, J. AMOEDO and D. LEE**, « *Effects of Thermal History, Crystallinity, and Solvent on the Transitions and Relaxations in Poly(bisphenal-A carbonate)* », *J. Polym. Sci.*, **20**, pp. 141-154, (1982)

ESSAIS RHEOLOGIQUES ET IDENTIFICATIONS CLASSIQUES



1. Introduction	59
2. Matériaux utilisés	60
2.1. Polycarbonate	60
2.2. Polyéthylène	61
2.3. Polypropylène	62
3. Etudes expérimentales et identification des lois	63
3.1. Choix des différentes sollicitations	63
3.2. Etude thermique	63
3.2.1. Thermographie infrarouge d'un essai de traction	64
3.2.2. Résultats	65
3.3. L'essai de torsion	72
3.3.1. Instrumentation	72
3.3.1.1. Le banc de torsion	72
3.3.1.2. Géométrie des éprouvettes	73
3.3.2. Conditions opératoires	73
3.3.3. Dépouillement des essais de torsion	74
3.3.3.1. Principe du dépouillement classique par la méthode de Fields & Backofen	74
3.3.3.2. Résultats	77
3.3.3.3. Conclusion sur la méthode de Fields & Backofen	80
3.4. L'essai de Traction	82
3.4.1. Instrumentation	82
3.4.1.1. L'essai de vidéotraction	82
3.4.1.2. Mesure aux faibles déformations	83
3.4.1.3. Matériel	83
3.4.1.3.1. Géométrie des éprouvettes	83
3.4.1.3.2. Les mors	85
3.4.1.3.3. Les essais en température	86
3.4.2. Principes de dépouillement des essais de traction	86
3.4.2.1. Essais de vidéotraction	86
3.4.2.2. Essais de traction classiques	89
3.4.2.3. Essais aux faibles déformations (extensomètres)	90
3.4.3. Traction « basses vitesses »	90
3.4.3.1. Conditions opératoires	90
3.4.3.2. Résultats	92
3.4.3.2.1. Etude des courbes expérimentales	92
3.4.3.2.2. Identification classique	93
3.4.4. Traction « moyennes vitesses »	97
3.4.4.1. Conditions opératoires	97
3.4.4.2. Résultats	98
3.4.4.2.1. Etude des courbes expérimentales	98

<i>Conclusion</i>	
3.4.4.2.2. Etude de sensibilité	101
3.4.4.2.3. Identification classique	106
3.5. Essais d'impact multiaxial	108
3.5.1. Instrumentation	108
3.5.1.1. Poids Tombant Instrumenté	108
3.5.1.2. Poinçonnement	109
3.5.2. Principe de dépouillement des essais d'impact multiaxial	109
3.5.3. Conditions opératoires	111
3.5.4. Résultats	113
4. Conclusion	114

5 Introduction

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, les structures et les morphologies des polymères semi-cristallins peuvent être définies à différentes échelles d'observation :

- au niveau du cristal polymère, en général une lamelle de faible épaisseur ;
- au niveau de l'arrangement local de ces lamelles, séparées par de la phase amorphe ;
- au niveau d'organisations à grande distance de lamelles cristallines et de zones interlamellaires amorphes, les plus classiques étant les sphérolites ;
- au niveau de l'échantillon massif tout entier, qui peut présenter une structure homogène (sphérolitique ...) ou hétérogène (morphologie cœur-peau des pièces injectées).

Il en résulte que la déformation de tout polymère semi-cristallin est *a priori* susceptible de faire intervenir des mécanismes à ces différents niveaux ; ces mécanismes peuvent être :

- des mécanismes de déformation des empilements de lamelles par glissement ou séparation interlamellaire, ou par rotation des empilements de lamelles ;
- des mécanismes de déformation à l'intérieur des lamelles cristallines par glissement, maclage ou modification de la phase cristalline (transformation de type « martensitique » par analogie avec celle observée dans les aciers) ;
- des mécanismes de destruction des lamelles cristallines. Elles se transforment en une structure microfibrillaire dans laquelle l'axe des chaînes est orienté selon la direction de déformation.

La déformation d'un polymère amorphe entraîne également une orientation des chaînes enchevêtrées, ce qui conduit à une anisotropie au sein du matériau. La déformation d'un polymère massif est donc une combinaison de différents mécanismes élémentaires. C'est par conséquent souvent un phénomène complexe à analyser et l'importance relative des différents mécanismes peut être conditionnée :

- par la structure du matériau ;
- par la mise-en-œuvre ;
- par le type de sollicitation mécanique.

Ce chapitre est consacré à ce dernier point et sur divers matériaux.

6 Matériaux utilisés

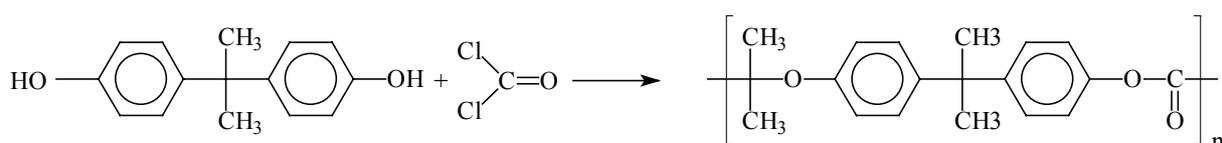
Compte tenu de la complexité des phénomènes étudiés, nous avons choisi des polymères entrant dans différentes catégories : un amorphe, un semi-cristallin homopolymère et un semi-cristallin copolymère hétérophasé. Nous avons d'abord porté notre choix sur un polymère amorphe : un polycarbonate. Ce polymère, simple *a priori*, s'est avéré présenter, comme nous le verrons plus loin, quelques particularités susceptibles de compliquer notre analyse ; c'est le cas notamment de l'apparition d'un « crochet de traction » dont l'intensité varie en fonction de l'histoire thermomécanique du matériau. C'est pourquoi, nous nous sommes tournés, dans un second temps vers un polymère semi-cristallin : un polyéthylène de haut poids moléculaire.

Enfin, il était judicieux de choisir un polymère « industriel » souvent utilisé dans des applications techniques afin de vérifier si le comportement des polymères précédents pouvaient être extrapolé à d'autres matériaux de composition plus complexe (copolymères par exemple). Solvay S.A. nous a fourni à cette occasion un polypropylène copolymère.

6.1 Polycarbonate

Le polycarbonate est un polymère amorphe dont le poids moléculaire en nombre est généralement compris entre 20 000 et 200 000. Celui sur lequel nous avons effectué nos tests est le MAKROLON 3200 ($\bar{M}_n = 31027$, $\bar{M}_w = 79271$). Il présente une excellente transparence.

Il est obtenu par polycondensation du bisphénol A et du phosgène, selon la réaction suivante :



Sa température de transition vitreuse est située aux alentours de 150 °C. Nous l'analyserons quasiment exclusivement dans son état vitreux. Ses propriétés mécaniques le distinguent des autres polymères ; il possède en effet un module d'Young élevé (supérieur à 2300 MPa) et une excellente résistance aux chocs, même à basse température.

Il possède, en outre, une excellente stabilité dimensionnelle, de bonnes propriétés d'isolation électrique et une large gamme d'utilisation en température. Par contre, il présente une mauvaise résistance aux hydrocarbures et aux lessives basiques.

Malgré son prix (environ 40 FF/kg) et sa mise en œuvre compliquée par un séchage soigneux, l'ensemble de ces propriétés font du polycarbonate un matériau largement utilisé dans des domaines variés et plus spécifiquement dans des applications où sa tenue à l'impact est intéressante.

Le Tableau II - 1 résume les principales caractéristiques physiques de ce matériau.

Propriétés thermiques	
Chaleur massique C	1164 J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
Conductivité thermique k	0,2 W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Propriétés physiques	
Masse volumique ρ	1200 kg.m ⁻³

Tableau II - 1 : Propriétés physiques du polycarbonate étudié à 23°C.

6.2 Polyéthylène

Nous possédons très peu de renseignements concernant le polyéthylène que nous avons étudié. Une chromatographie à exclusion stérique (GPC) nous a toutefois permis d'obtenir une estimation de son poids moléculaire. Celui-ci est particulièrement élevé (\bar{M}_n supérieure à 300 000).

De même, nous avons déterminé sa température de fusion par analyse enthalpique différentielle (DSC). Elle est de l'ordre 134 °C (Figure II - 1).

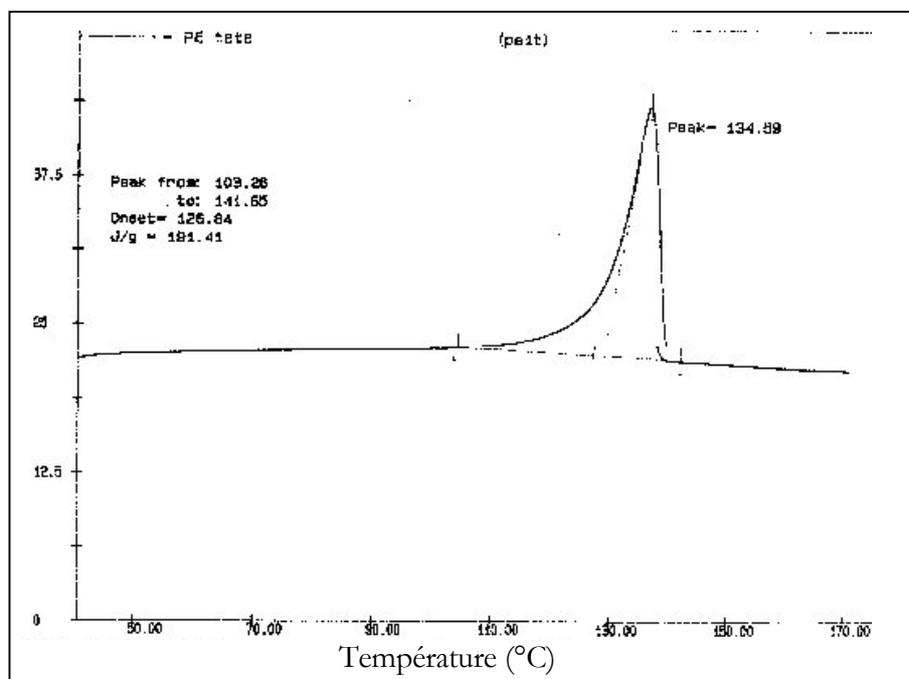


Figure II - 1 : Détermination de la température de fusion du polyéthylène par DSC.

Plus globalement, le polyéthylène est le thermoplastique de grande diffusion le plus consommé dans le monde et donc le plus répandu dans l'environnement quotidien.

Les polyéthylènes (polymères semi-cristallins) cristallisent en lamelles, organisées elles-mêmes en structures sphérolitiques. La transition vitreuse de la phase amorphe apparaît généralement à très basse température (aux alentours de $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$).

Le Tableau II - 2 résume les principales caractéristiques physiques de ce matériau.

Propriétés thermiques	
Chaleur massique C	$900\text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Conductivité thermique k	$0,33\text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Propriétés physiques	
Masse volumique ρ	900 kg.m^{-3}

Tableau II - 2 : Propriétés physiques du polyéthylène étudié à 23°C .

6.3 Polypropylène

Le polypropylène que nous avons utilisé appartient à une famille de polymères « industriels » fabriquée et commercialisée par SOLVAY S.A. sous la marque enregistrée ELTEX[®] P*. Il s'agit de polymères thermoplastiques cristallins obtenus par polymérisation de propylène et éventuellement de comonomère, dans des conditions optimisées de température et de pression en présence d'un catalyseur superactif. Le polypropylène ELTEX[®] P est un polymère isotactique. Cette configuration permet une cristallisation régulière lors de la mise en œuvre. L'édifice cristallin ainsi formé confère au matériau de nombreuses propriétés exploitées dans les applications industrielles. SOLVAY fabrique trois types de polypropylènes isotactiques : homopolymères, copolymères statistiques, copolymères séquencés ou à blocs. La résine à laquelle nous nous sommes plus particulièrement intéressés (ELTEX[®] P RS 250) appartient à cette dernière catégorie, qui constitue la nouvelle génération des polypropylènes SOLVAY produits par polymérisation en phase gazeuse. Elle est obtenue par polymérisation, en plusieurs étapes, de blocs macromoléculaires de nature ou de structure différentes. Sa représentation usuelle est une phase continue homopolymère à haute rigidité dans laquelle est répartie une phase hétérogène élastomérique constituée de copolymère éthylène - propylène ; celle-ci confère à la résine la résistance à l'impact à basse température. Ce produit présente, de ce fait, un excellent compromis rigidité/résistance au choc.

* Aux Etats-Unis, la filiale de SOLVAY, SOLTEX POLYMER CORPORATION, commercialise les polypropylènes fabriqués dans son usine de Deer Park, sous la marque FORTILENE[®].

Le Tableau II - 3 résume les principales caractéristiques physiques de ce matériau.

Propriétés thermiques	
Chaleur massique C	1680 J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
Conductivité thermique k	0,23 W.m ⁻¹ .K ⁻¹
Propriétés physiques	
Masse volumique ρ	903 kg.m ⁻³

Tableau II - 3 : Propriétés physiques du polypropylène étudié à 23°C.

7 Etudes expérimentales et identification des lois

7.1 Choix des différentes sollicitations

Dans ce travail, nous avons retenu dans un premier temps deux types de sollicitation correspondant à deux essais mécaniques conventionnels : l'essai de torsion et l'essai de traction. Ils sont sensés représenter les modes de déformation « simples » que sont le cisaillement simple et la traction uniaxiale. L'intérêt de ces sollicitations simples est de rendre possible à la fois une mesure de la déformation et une déduction relativement aisée des lois de comportement.

En réalité, l'identification « manuelle » des paramètres de ces lois de comportement à partir de ces essais mécaniques n'est pas immédiate. En effet, un premier problème consiste à isoler l'influence de chacun des paramètres. Il est notamment utile de conserver une vitesse de déformation constante. Cette condition n'est malheureusement pas toujours réalisable d'un point de vue expérimental. De plus, les vitesses de sollicitation ne doivent pas être trop rapides de façon à limiter les phénomènes d'autoéchauffement. Une étude préalable à l'aide d'un procédé de thermographie infrarouge a été réalisée de façon à connaître la vitesse limite à partir de laquelle l'évolution thermique du matériau doit être prise en compte lors du dépouillement des essais.

Enfin, l'apparition d'instabilités plastiques ou l'existence d'hétérogénéités de déformation rendent nécessaires des mesures locales (quelquefois délicates) de la déformation.

7.2 Etude thermique [1]

L'une des difficultés que l'on peut rencontrer lors de la prédiction du comportement au choc de polymères injectés réside dans les phénomènes de dissipation thermique dont ils sont le siège au delà d'une certaine vitesse de déformation, que la littérature donne comme étant de l'ordre de 10⁻² s⁻¹. Dans le cadre de ce travail, nous avons voulu :

- vérifier expérimentalement ce point ;
- chiffrer l'importance de ces phénomènes.

Pour cela, nous avons cherché à visualiser ces phénomènes à l'aide d'un dispositif expérimental. Une analyse rapide de la littérature montre l'existence d'un nombre relativement important de méthodes de mesures thermiques, ce qui reflète en fait la réelle difficulté de l'acte. Ainsi, s'il s'agit d'un matériau très bon conducteur thermique, comme c'est le cas d'un métal, on peut utiliser une méthode classique « par contact ». Dans le cas contraire, comme c'est le cas des matériaux polymères, on préférera utiliser une méthode de mesure « radiative », qui présente en effet de nombreux avantages :

- les échanges entre la surface du matériau étudié et son milieu environnant sont peu ou pas perturbés ;
- cela rend possible la mesure de petites surfaces, de même que celles d'objets en mouvement nécessitant une grande vitesse de réponse.

L'inconvénient majeur de cette méthode réside par contre dans le fait que l'instrument de mesure ne fournit qu'une *température de rayonnement* (appelée également *température de luminance*, ou encore *température de couleur*), qui diffère d'autant plus de la température vraie que l'émissivité du matériau s'écarte de l'unité [2].

Des artifices permettent toutefois de minimiser l'influence de ce facteur. Du point de vue de l'appareillage, nous avons utilisé un dispositif de thermographie infrarouge* (disponible au Laboratoire de SOLVAY à Bruxelles) pour mesurer l'évolution de la température d'éprouvettes soumises à des essais de traction moyenne vitesse.

7.2.1 Thermographie infrarouge d'un essai de traction

Des éprouvettes de type « sablier », axisymétriques, de 6 mm de diamètre, ont été étirées à l'aide d'un banc d'essai électromécanique INSTRÖN 4505 pilotée à l'aide du « système Informatisé d'Essai aux Matériaux Série IX », dans un domaine de vitesses de traverse faibles et moyennes (≤ 1000 mm/min).

* L'équipement d'analyse infrarouge a été fourni par le Laboratoire Central de Solvay à Bruxelles.

Les températures sont acquises au cours des essais à l'aide d'une caméra infrarouge THERMOVISION 900 et traitées par un ordinateur (compatible PC et système d'exploitation multitâche OS/9 d'IBM). Durant les essais, la caméra est centrée sur la zone de diamètre minimale de l'éprouvette de façon à pouvoir enregistrer « l'image thermique » des éprouvettes en cours d'élongation, c'est-à-dire la répartition spatiale de leur rayonnement infrarouge [Figure II - 2].

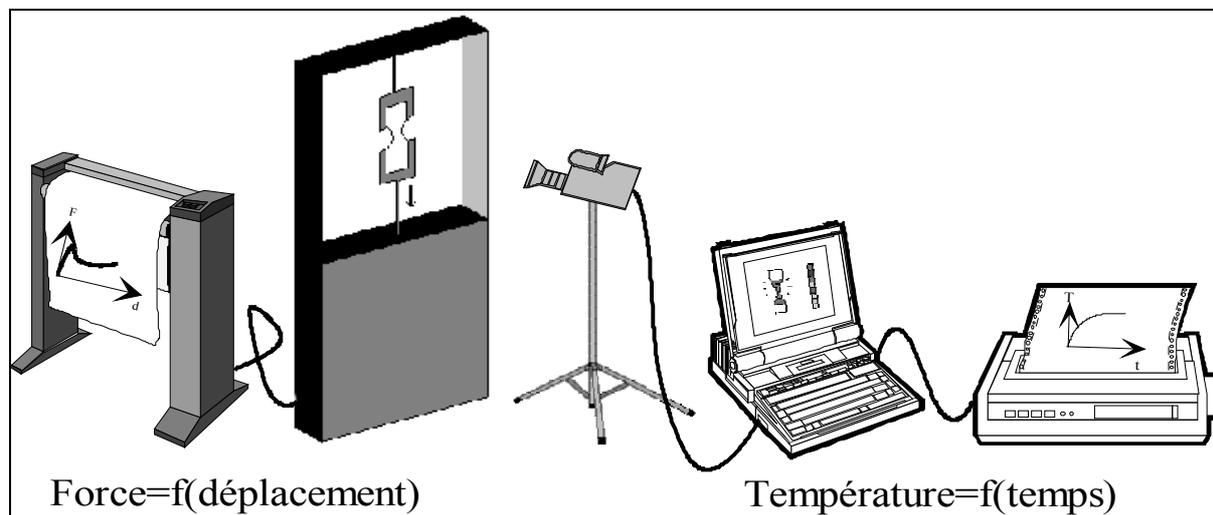


Figure II - 2 : Schéma d'un essai de traction couplé à un dispositif de thermographie infrarouge.

Alors que les éprouvettes s'échauffent, les profils de température sont stockés à intervalle de temps régulier sous forme d'images infrarouge, la fréquence d'échantillonnage dépendant du choix de l'expérimentateur.

7.2.2 Résultats

La Figure II - 3 représente un enregistrement typique à différents stades de la déformation, le dernier correspondant à la rupture de l'éprouvette.

Sur ces images, la couleur est représentative de la température. Nous avons choisi de mesurer l'intensité maximale de la lumière sur ces clichés de façon à remonter à l'évolution de la température maximale au cours du temps.

Cette température correspond à une température de surface pour les matériaux opaques aux infrarouges comme le polyéthylène. Dans le cas du polycarbonate, semi-transparent, la mesure est le résultat d'une combinaison de rayonnements venant d'une certaine profondeur dans le matériau. La température mesurée n'est donc plus rigoureusement celle de la surface. Nous supposons qu'elle en est proche.

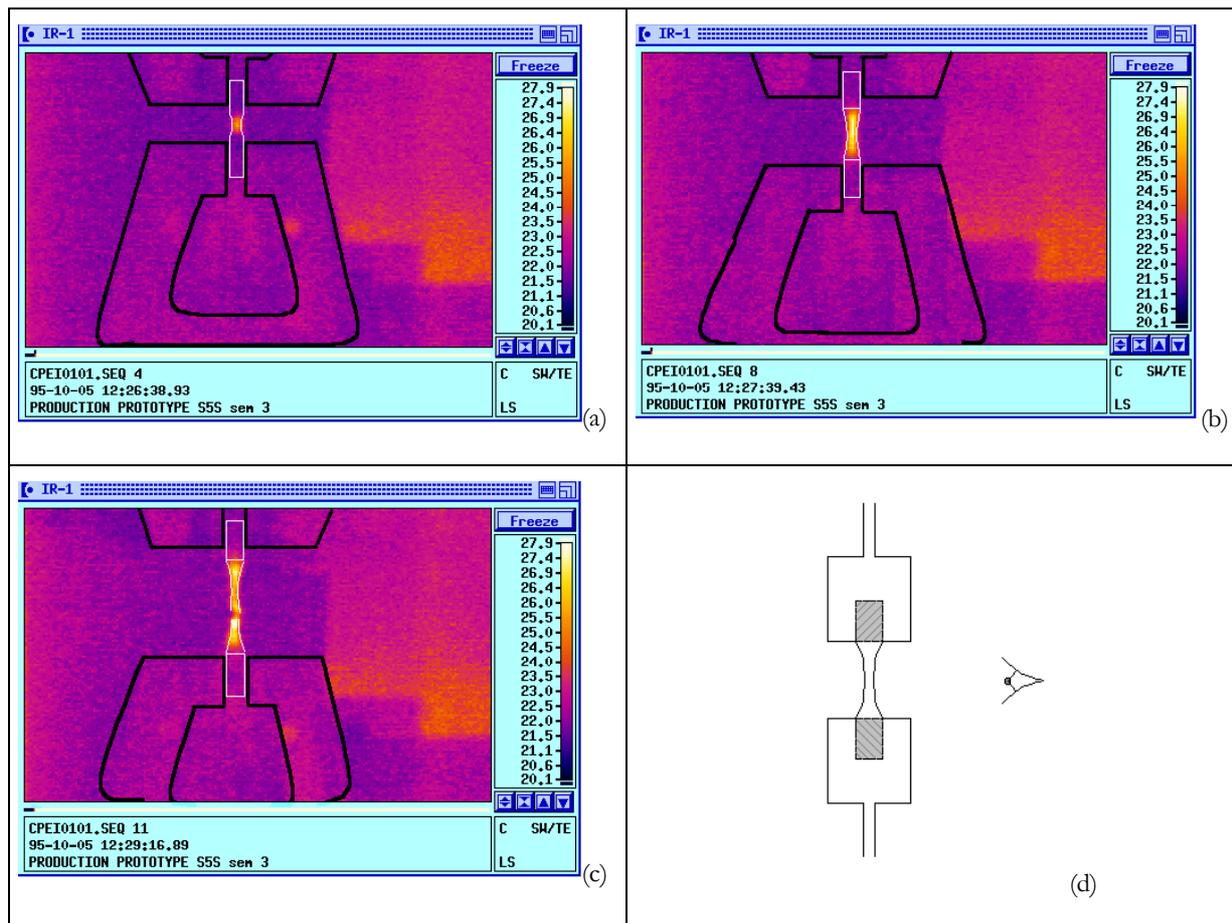


Figure II - 3 : Clichés obtenus à l'aide du dispositif de thermographie infrarouge, à différents instants de la traction d'une éprouvette en polyéthylène (vitesse de traverse de 10 mm/min) : (a) au cours de la première minute (b), une minute plus tard (c), à la rupture (d) ; incidence de la caméra par rapport à l'éprouvette.

Lorsque la caméra infrarouge filme la surface latérale de l'éprouvette (Figure II - 3), la température enregistrée augmente dès que le seuil de plasticité est atteint. Le maximum se situe grossièrement au niveau des épaules de striction.

Une première série de mesures a montré qu'une brusque élévation de température intervenait exactement à l'instant de la rupture. Celle-ci étant oblique, elle dévoile légèrement le cœur de l'éprouvette qui est vraisemblablement plus chaud que la surface. Afin de confirmer ces soupçons, une seconde série d'essais a été menée. Cette campagne se décompose en deux parties :

- depuis le début de la déformation jusqu'à rupture : la température y est mesurée sur la surface latérale de l'éprouvette ;
- une fois l'éprouvette rompue, ses deux extrémités sont pivotées de façon à ce que la caméra puisse enregistrer le refroidissement des surfaces de rupture (Figure II - 4).

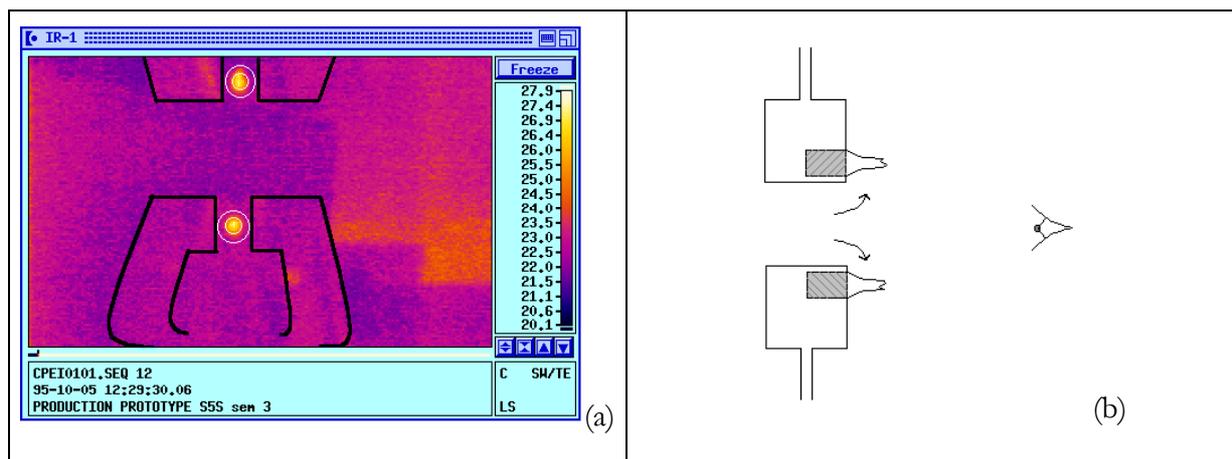


Figure II - 4 : Cliché (a) obtenu après rotation des extrémités rompues face à la caméra ; incidence de la caméra par rapport à l'éprouvette (b).

Les résultats obtenus sont synthétisés sur la Figure II - 5, dans le cas du polycarbonate et du polyéthylène, pour trois vitesses de traverse différentes (10, 30 et 100 mm/min) correspondant à des vitesses de déformation initiales comprises entre $2 \cdot 10^{-2}$ et $2 \cdot 10^{-1} \text{ s}^{-1}$. La flèche matérialise l'instant de la rupture.

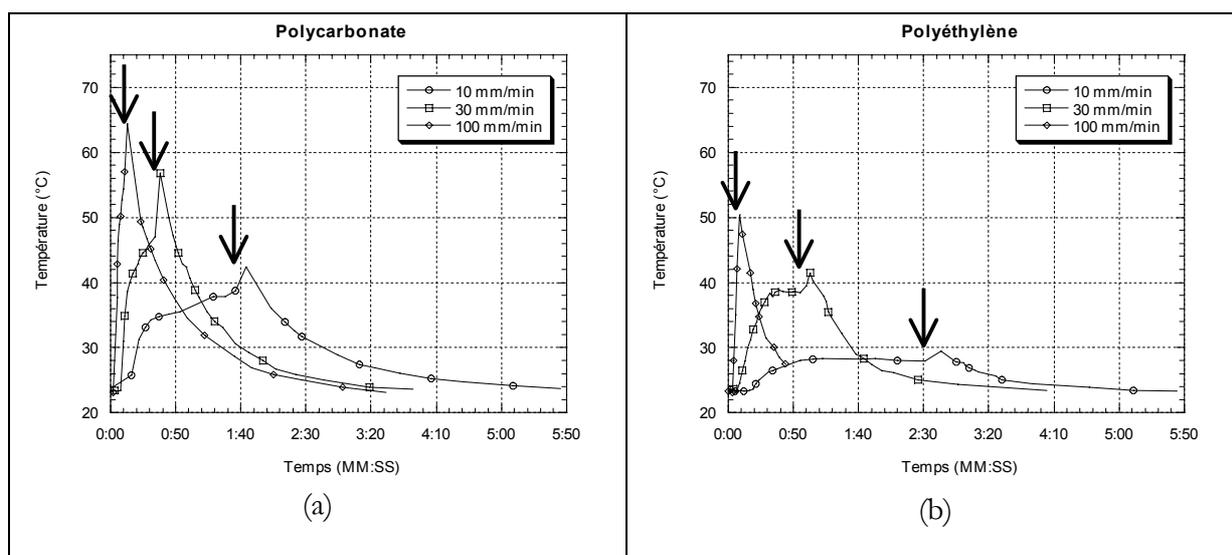


Figure II - 5 : Evolution de la température dans le cas du polycarbonate (a) et du polyéthylène (b) pour trois vitesses de traverses différentes (10, 30 et 100 mm/min).

Le pivotement des extrémités rompues des éprouvettes n'étant pas instantané, nous ne mesurons la température à cœur qu'après un certain laps de temps (entre 5 et 10 secondes). La courbe de refroidissement doit donc être extrapolée à l'instant t_0 de la rupture pour déterminer la température qui régnait au cœur de l'éprouvette juste avant qu'elle ne rompe.

La Figure II - 6 schématise ce dépouillement ainsi que nos observations.

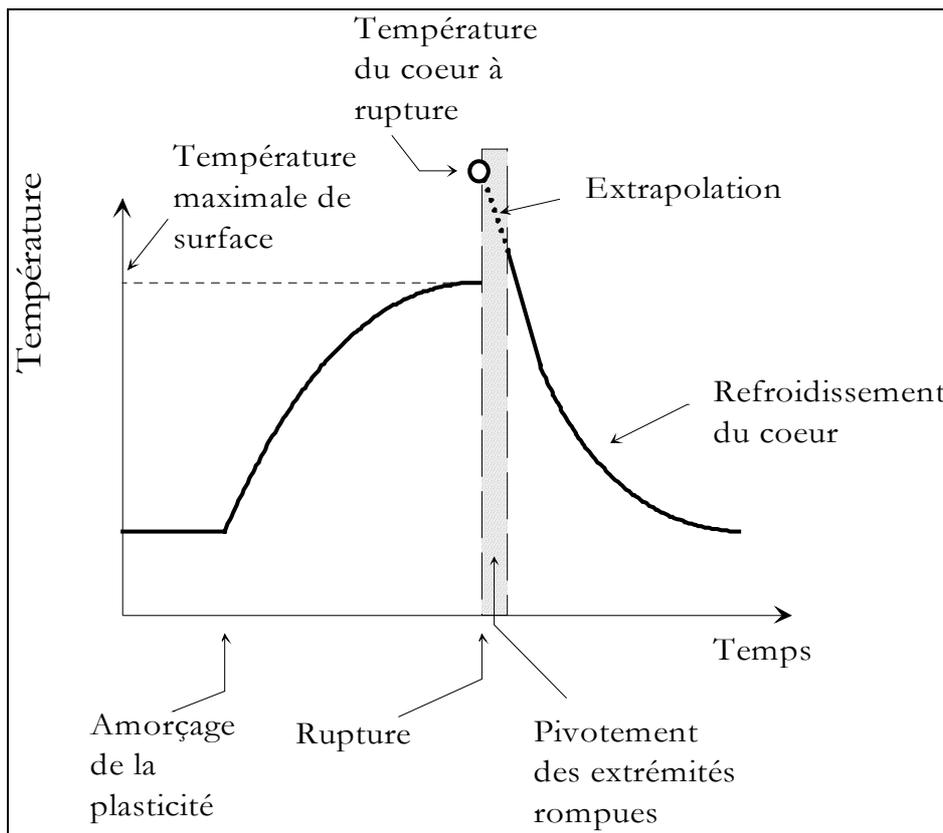


Figure II - 6 : Schéma du principe de dépouillement utilisé pour déterminer la température à cœur à l'instant de la rupture.

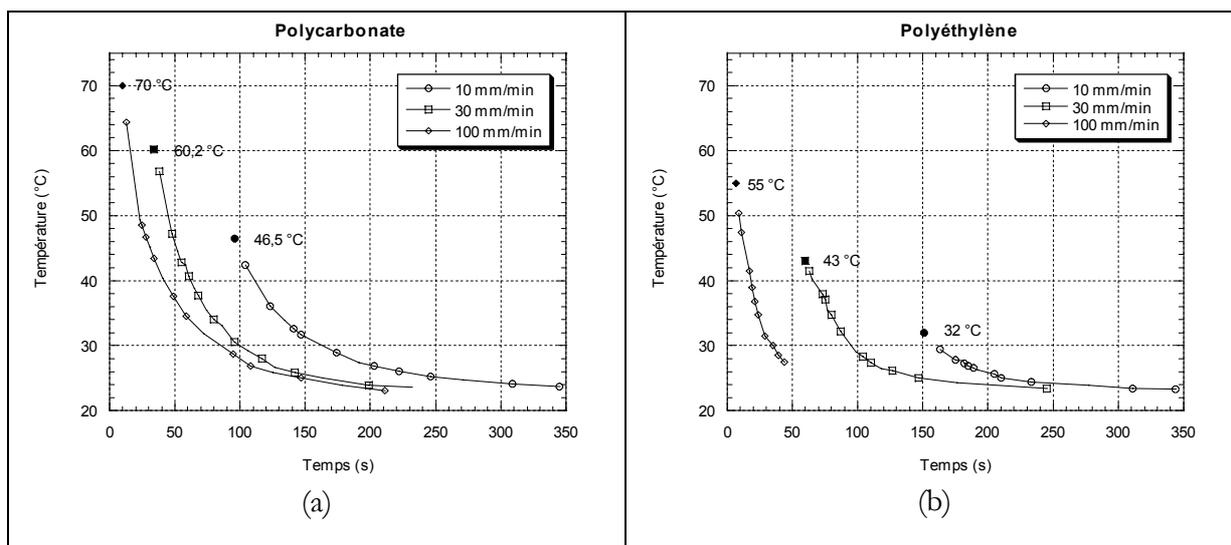


Figure II - 7 : Evolution de la température à cœur après rupture (phase de refroidissement) et extrapolation de la température à rupture dans le cas (a) du polycarbonate et (b) du polyéthylène.

La Figure II - 7 et la Figure II - 8 résument nos résultats.

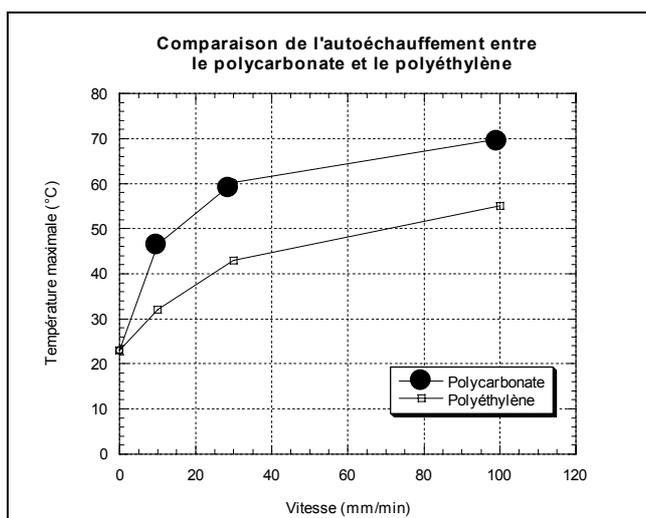


Figure II - 8 : Comparaison de l'autoéchauffement maximal (extrapolé) atteint au cœur des éprouvettes de polycarbonate et de polyéthylène.

On constate immédiatement que, pour des vitesses de sollicitation identiques, le polycarbonate s'échauffe davantage (d'environ 15 °C) que le polyéthylène (Figure II - 5, Figure II - 7, Figure II - 8). Par ailleurs, on peut voir que dès 10 mm/min, ce qui correspond à une vitesse de déformation d'environ 2.10^{-1} s^{-1} en début d'essai, la température du polycarbonate s'élève déjà d'environ 25 °C, ce qui nous montre l'importance des phénomènes d'autoéchauffement dans ce matériau. Parallèlement aux mesures de thermographie infrarouge, une mesure de l'évolution de la force en fonction du déplacement permet de vérifier que la zone de déformation élastique est isotherme à l'échelle de notre précision, aussi bien dans le cas du polycarbonate que du polyéthylène (Figure II - 9).

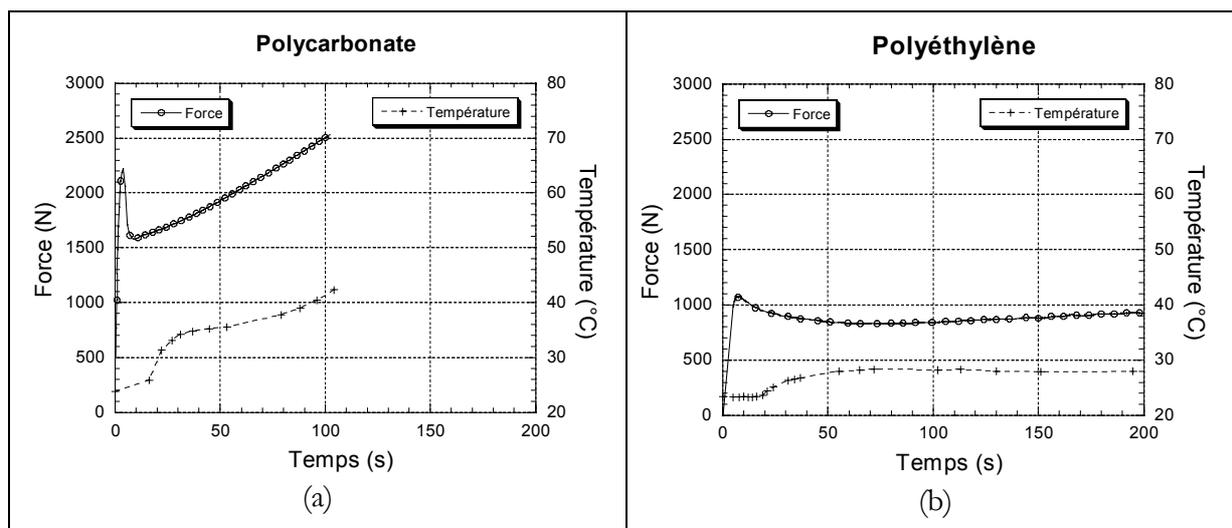


Figure II - 9 : Superposition des évolutions mécaniques et thermiques dans le cas du polycarbonate (a) et du polyéthylène (b) pour une même vitesse de traction (10 mm/min).

Un autre point remarquable réside dans le fait que les deux polymères présentent une évolution thermique totalement différente :

- la température du polycarbonate ne cesse de croître jusqu'à la rupture (Figure II - 9-a) ;
- le polyéthylène voit quant à lui sa température se stabiliser au cours de l'essai de traction (Figure II - 9-b).

En effet, l'échauffement vient du terme de dissipation mécanique dont la puissance s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \dot{q}_v$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ est le tenseur des contraintes et $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ celui des vitesses de déformation.

Si l'on admettait que la production de chaleur est identique dans les deux matériaux (même puissance dissipée), le polycarbonate, de part ses caractéristiques thermiques, serait susceptible de moins s'échauffer (capacité calorifique et masse volumique plus élevées) et de mieux refroidir (conductivité thermique plus élevée).

A la vue des résultats précédents, nous sommes contraints d'admettre que la quantité d'énergie mécanique convertie en chaleur varie d'un matériau à l'autre :

- soit à puissance dissipée égale, la proportion convertie en chaleur est plus faible dans le cas du polyéthylène ;
- soit la puissance dissipée est différente.

Ce dernier point cache en réalité une rhéologie différente qui se traduirait, pour une même vitesse de traverse, par des chemins $\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ différents. Un élément de réponse réside dans l'observation de courbes rhéologiques obtenues à faible vitesse de déformation (Figure II - 11).

Le polycarbonate présente toujours une contrainte plus élevée et un durcissement plus marqué. Il est donc caractérisé par une augmentation de contrainte plus sensible à forte déformation et donc, potentiellement par une dissipation thermique plus grande.

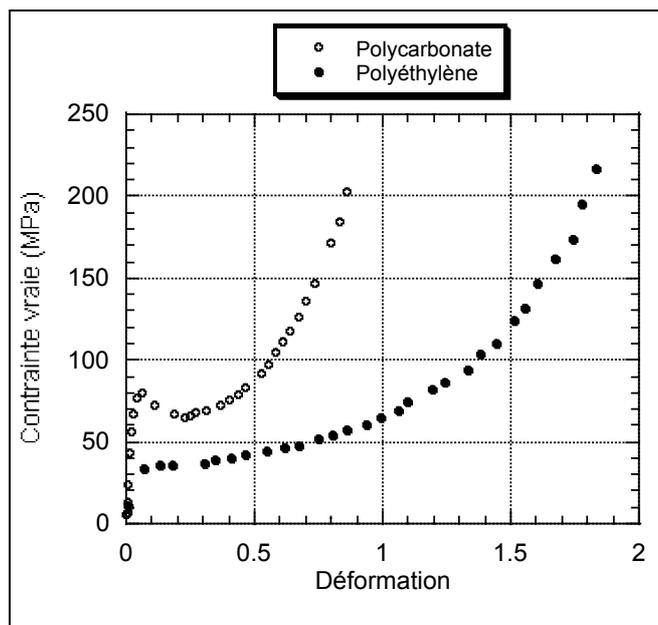


Figure II - 10 : Comparaison des courbes contrainte vraie – déformation vraie pour une même vitesse de déformation faible et constante (10^{-3} s^{-1}), pour le polycarbonate et le polyéthylène.

Un second élément de réponse se trouve dans les évolutions des contraintes et des déformations au cours des essais moyenne vitesse eux-mêmes (Figure II - 11). La contrainte reste toujours supérieure dans le polycarbonate alors que la vitesse de déformation est du même ordre de grandeur.

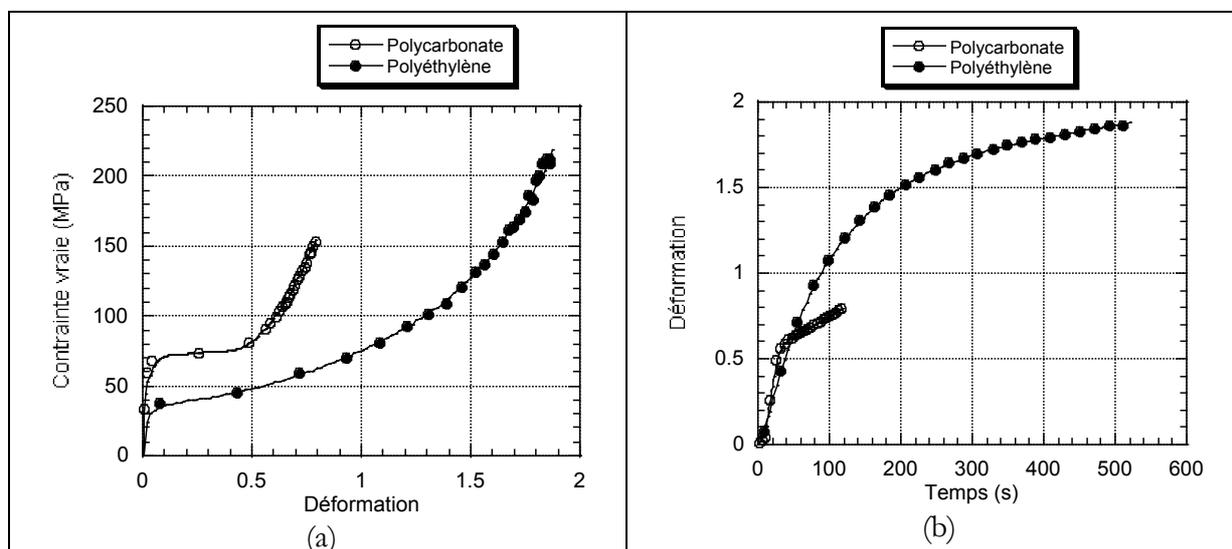


Figure II - 11 : Evolution de (a) la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie et (b) de la déformation vraie en fonction du temps pour le polycarbonate et le polyéthylène pour un essai de traction mené à vitesse de traverse constante et égale à 5 mm/min.

Du fait de sa rhéologie, il est probable que le polyéthylène développe donc une puissance dissipée plus faible qui peut être équilibrée par les échanges avec son milieu environnant.

Il nous appartient donc dès lors de toujours prendre garde aux effets de dissipation mécanique qui, comme on l'a constaté sur deux de nos matériaux, sont significatifs dès 10^{-2} s⁻¹. Il faudra par conséquent soit les éviter, soit les intégrer dans nos méthodes de dépouillement.

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté quelques lois de comportement applicables aux polymères. Dans ce qui va suivre, nous allons nous placer dans des conditions expérimentales « usuelles » : les essais seront volontairement dépouillés en utilisant des hypothèses classiques. Les lois de comportement utilisées sont le reflet du « savoir-faire » actuel, même si le chapitre précédent a permis de démontrer leurs faiblesses. Nous essaierons de souligner ces limites, de même que celles des méthodes de dépouillement utilisées. Nous présenterons dans les chapitres suivants une alternative à ces techniques (sous la forme d'une méthodologie d'identification quasi-automatique) qui permettra de lever en grande partie les limitations actuelles. Notre objectif est donc ici de montrer ce que peuvent apporter les méthodes inverses, mais aussi, ce qu'elles ne permettront pas de résoudre.

7.3 L'essai de torsion

L'essai de torsion a été développé initialement pour l'analyse du comportement des métaux sous cisaillement et à forte déformation, tout en permettant d'éviter les phénomènes d'instabilité (striction). Dans cet essai, la déformation d'une éprouvette cylindrique est imposée par la rotation d'une de ses extrémités. Cet essai présente, en outre, l'intérêt d'avoir donné lieu au développement d'un code d'identification par méthode inverse au CEMEF [3].

7.3.1 Instrumentation

7.3.1.1 Le banc de torsion

Le banc de torsion utilisé est une machine ADAMEL LHOMARGY TCO 1. Elle est pilotée par un logiciel d'I.A.O. (Instrumentation Assistée par Ordinateur) fonctionnant sur un micro-ordinateur compatible PC. Elle est équipée d'un moteur à courant continu régulé par une dynamo tachymétrique qui permet de couvrir un domaine de vitesses allant de 10^{-3} à 1500 tr/min (*via* des réducteurs). Son couple maximal est de 50 Nm. Le variateur de vitesse est numérique. Le frein et l'embrayage sont, quant à eux, électromagnétiques.

Au cours de l'essai, outre le couple Γ , on peut enregistrer :

- le nombre de tours effectués N ; la présence d'un codeur optique nous permet d'atteindre une précision de l'ordre du centième de tour ;
- la vitesse de rotation \dot{N} , grâce à un convertisseur fréquence-tension ;

7.3.1.2 Géométrie des éprouvettes

L'essai de torsion peut se pratiquer sur des éprouvettes pleines. Toutefois, dans ce cas, déformations et contraintes augmentent du centre vers la périphérie de l'éprouvette. Cette hétérogénéité rend difficile la conversion des couples et des nombres de tours en termes de contraintes et de déformations. Des méthodes classiques de dépouillement [4,5] permettent d'obtenir ces résultats, mais celles-ci ne sont valables qu'à la surface de l'éprouvette. C'est pourquoi certains métallurgistes ont choisi de travailler sur des tubes minces. Malheureusement, dans le cas des polymères, on se heurte à des problèmes de flambement ou de gonflement de tube. Nous n'adopterons donc pas cette solution.

7.3.2 Conditions opératoires

Nous avons choisi d'utiliser des éprouvettes pleines usinées à partir de joncs extrudés. La géométrie et les dimensions retenues pour ces éprouvettes sont données sur la Figure II - 12. Les essais ont été réalisés à température ambiante. Les conditions opératoires retenues sont résumées dans le Tableau II - 4.

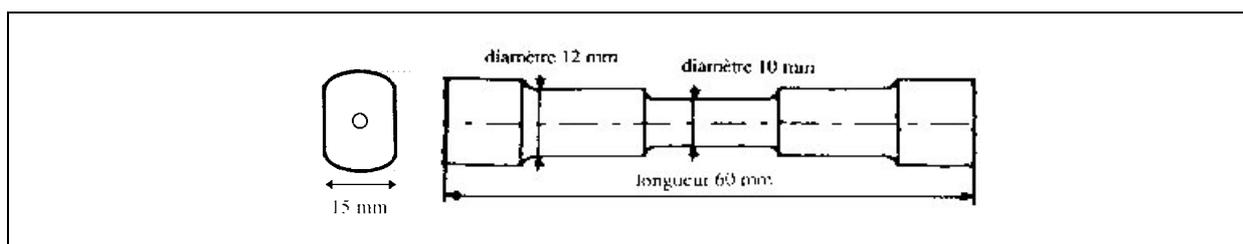


Figure II - 12 : Profil et dimensions d'une éprouvette de torsion.

Vitesse de rotation (tr/min)	Vitesse de déformation Généralisée $\dot{\epsilon}$ (s^{-1})*	Température (°C)
$5 \cdot 10^{-3}$	10^{-4}	23
$5 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	23
$5 \cdot 10^{-1}$	10^{-2}	23
50	1	23
250	5	23
500	10	23

Tableau II - 4 : Conditions opératoires retenues pour l'essai de torsion (identiques pour le polyéthylène et le polycarbonate).

* cf(I - 78)

7.3.3 Dépouillement des essais de torsion

Si l'on suppose connue la forme de la loi de comportement de notre matériau, le plus classique des dépouillements de l'essai de torsion est la méthode de **Fields & Backofen** [4,5]. Après en avoir étudié le principe, nous analyserons les résultats qu'elle a permis d'extraire (moyennant l'adjonction d'un logiciel d'optimisation au sens des moindres carrés).

7.3.3.1 Principe du dépouillement classique par la méthode de Fields & Backofen

Avant toute analyse mécanique d'un essai, il convient de poser un certain nombre d'hypothèses. On suppose notamment que :

- les matériaux sont homogènes et isotropes, et qu'ils suivent une loi d'écroutissage isotrope. Cela sous-entend que la symétrie cylindrique de l'éprouvette se conserve durant la déformation ;
- toute l'éprouvette est plastifiée de manière homogène ;
- la déformation est uniforme le long de l'éprouvette (pas de localisation de l'écoulement) ;
- les sections transversales restent droites et tournent dans un mouvement de corps rigide à la vitesse ω .



Figure II - 13 : Seule la zone dessinée en trait continu est prise en compte pour l'identification de l'essai de torsion.

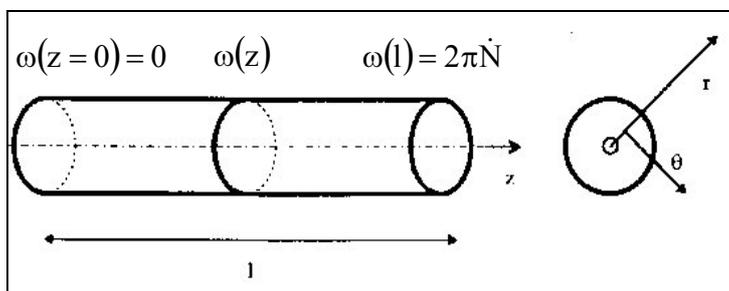


Figure II - 14 : Définition des axes dans le cas de l'essai de torsion.

Suivant ces hypothèses, et en ne considérant que la partie utile (Figure II - 13) de l'éprouvette (de rayon R et de longueur l), le champ de vitesse V dans le corps de l'éprouvette est (Figure II - 14) :

$$\begin{cases} v_r = 0 \\ v_\theta = \omega(z)r = (2\pi\dot{N})\frac{z}{l}r \\ v_z = 0 \end{cases} \quad (\text{II - 1})$$

Le tenseur des vitesses de déformation s'écrit alors :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}(r) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\pi\dot{N}r}{l} \\ 0 & \frac{\pi\dot{N}r}{l} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II - 2})$$

et le tenseur des contraintes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\theta z} \\ 0 & \sigma_{\theta z} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{II - 3})$$

Si le matériau suit une loi d'écoulement associée au critère de von Mises, on peut définir :

- la vitesse de déformation généralisée (cf Chap. I) par :

$$\dot{\bar{\varepsilon}}(r) = \sqrt{\frac{2}{3} \times 2 \times \left(\frac{\pi\dot{N}r}{l}\right)^2} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\pi\dot{N}r}{l} \quad (\text{II - 4})$$

- et la déformation équivalente par :

$$\bar{\varepsilon}(r) = \int_0^t \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\pi\dot{N}r}{l} d\tau = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\pi Nr}{l} \quad (\text{II - 5})$$

Le couple que nous mesurons est donné par la relation :

$$\Gamma = \int_0^R \int_0^{2\pi} \sigma_{\theta z} \cdot r \cdot dr \cdot d\theta = \int_0^R \sigma_{\theta z} \cdot 2\pi \cdot r^2 \cdot dr \quad (\text{II - 6})$$

Il est relié à la contrainte de cisaillement à la surface de l'éprouvette $\sigma_{\theta z}(\mathbf{R})$ par une relation établie simultanément par Fields & Backofen (1957) et Rossard (1957) [6]. L'hypothèse fondamentale sur laquelle reposent ces méthodes est que la cission $\sigma_{\theta z}(\mathbf{R})$ est fonction uniquement de $\bar{\epsilon}$ et de $\dot{\bar{\epsilon}}$ (ou, ce qui est équivalent, de N et de \dot{N}). $\sigma_{\theta z}(\mathbf{R})$ ne dépend donc pas ici du chemin parcouru. Dans ces conditions, on peut montrer que la cission à la surface de l'éprouvette est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{\theta z}(\mathbf{R}) = \frac{\Gamma(\mathbf{R})}{2\pi R^3} (\tilde{n} + \tilde{m} + 3) \\ \tilde{n} = \left(\frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln N} \right)_{\dot{N}} \\ \tilde{m} = \left(\frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \ln \dot{N}} \right)_{N} \end{array} \right. \quad (\text{II - 7})$$

\tilde{m} et \tilde{n} sont déterminés graphiquement. Ils sont supposés constants. Ils correspondent dans ce cas respectivement :

- à la pente de la droite représentant l'évolution de $\ln \Gamma$ en fonction de $\ln \dot{N}$ à un nombre de tours donné N .
- à celle de la droite représentant l'évolution de $\ln \Gamma$ en fonction de $\ln N$ pour une vitesse de rotation donnée \dot{N}

En pratique, cette dernière courbe est rarement droite. On peut davantage l'approcher à l'aide d'un polynôme d'ordre 5. La dérivée de ce polynôme nous permet alors d'accéder à la valeur de \tilde{n} . Si le matériau obéit au critère de von Mises, l'expression de la contrainte équivalente est alors :

$$\bar{\sigma}(\mathbf{R}) = \frac{\sqrt{3}\Gamma(\mathbf{R})}{2\pi R^3} (\tilde{n} + \tilde{m} + 3) \quad (\text{II - 8})$$

On peut ainsi remonter à partir de la mesure du couple de torsion aux courbes représentant l'évolution de la contrainte équivalente $\bar{\sigma}(\mathbf{R})$ en fonction de la déformation équivalente $\bar{\epsilon}(\mathbf{R})$. Il ne reste alors plus qu'à identifier les paramètres de la loi de comportement de façon à ce qu'elle lisse au mieux les courbes ainsi établies, pour des valeurs de vitesses de déformation et de températures données. A l'origine, Fields & Backofen déterminaient ces coefficients graphiquement en divisant les courbes en plusieurs zones, à l'intérieur desquelles certains termes de la loi pouvaient être

négligés. Les paramètres étaient alors déduits les uns des autres. Les erreurs s'accumulaient au risque d'entraîner une incertitude non négligeable sur les résultats finaux. De nos jours, le jeu de paramètres optimal peut être aisément identifié par une méthode de type moindres carrés. On cherchera alors les paramètres rhéologiques qui minimisent l'écart entre les données expérimentales et les valeurs prédites par la loi de comportement choisie. Les paramètres sont tous identifiés simultanément.

7.3.3.2 Résultats

Le Tableau II - 5 regroupe, dans le cas du polycarbonate, les valeurs des paramètres identifiés à l'aide de la méthode de Fields & Backofen, d'une part dans le cas de la loi de Norton-Hoff (I - 53) et d'autre part dans le cas de la loi de G'Sell (I - 63). Ces valeurs quelque peu inhabituelles (h et m négatifs) conduisent aux courbes représentées respectivement sur la Figure II - 15 et la Figure II - 16. Ces courbes nous confirment que la loi de Norton-Hoff n'est pas satisfaisante pour ce polymère solide. Par contre, la loi de G'Sell lisse particulièrement bien les courbes expérimentales, sans toutefois parvenir à faire ressortir l'effet de la vitesse aux fortes déformations.

	K_p (MPa)	w	a	b	h	n	m
<i>Loi de NORTON-HOFF</i>	96,00	-	-	-	-	0,27	0,00
<i>Loi Polymère solide</i>	2860	0,046	10,87	9,52	-0,28	2,00	-0,001

Tableau II - 5 : Résultats du dépouillement par la méthode de Fields & Backofen pour le polycarbonate.

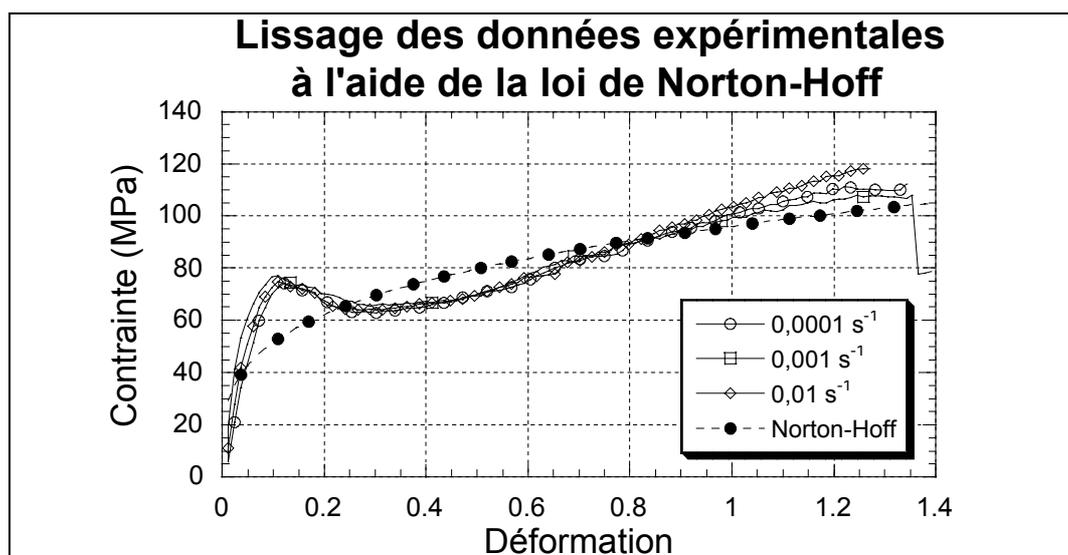


Figure II - 15 : Résultats du dépouillement par la méthode de Fields & Backofen pour la loi de NORTON-HOFF (Identification des paramètres du polycarbonate en torsion pour trois vitesses de rotation – 10^{-4} , 10^{-3} et 10^{-2} s^{-1} - et une température – 23 °C)

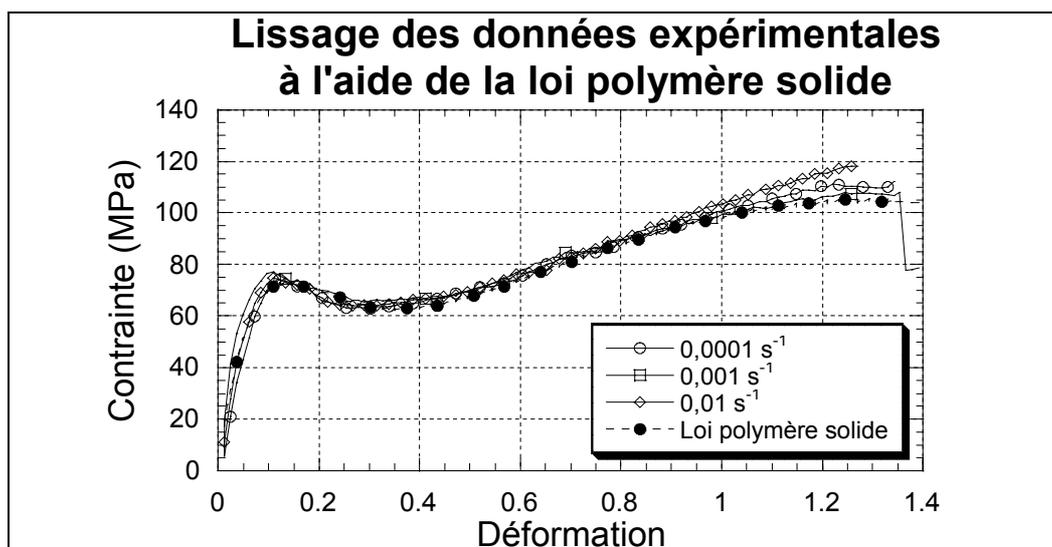


Figure II - 16 : Résultats du dépouillement par la méthode de Fields & Backofen pour la loi de G'SELL (Identification des paramètres du polycarbonate en torsion pour trois vitesses de rotation – 10^{-4} , 10^{-3} et 10^{-2} s^{-1} - et une température – $23 \text{ }^{\circ}\text{C}$)

Pour comprendre les raisons de ces aberrations, il suffit de suivre l'évolution de la géométrie de l'éprouvette au cours de l'essai.

Si l'on empêche les mors de se mouvoir dans la direction longitudinale, on constate rapidement que la déformation n'est plus homogène et que l'éprouvette perd sa symétrie cylindrique, allant jusqu'à s'enrouler sur elle-même. Cet effet « manivelle », qui va à l'encontre d'une des hypothèses fondamentales du dépouillement de Fields & Backofen rend les essais rapidement inexploitable. Il a déjà été rencontré dans le cas des métaux et s'explique par le développement d'un effort axial. Ce dernier pourrait éventuellement être imputable à des effets de dilatation thermique. Toutefois, les vitesses de déformation faibles permettent de mettre en doute cette explication. L'apparition et l'évolution d'anisotropie au cours de la déformation [6] peuvent, par contre, être invoquées.

Si l'on autorise les déplacements selon l'axe de l'éprouvette en libérant un mors, on s'aperçoit que l'effort axial peut s'accompagner d'une diminution du diamètre de l'éprouvette et de son allongement, phénomène que l'on peut assimiler à une « striction » (Figure II - 17). PAE et SILANO [7] ont décrit ce phénomène sous le vocable « *girdling* ».

Le traitement des données expérimentales brutes est alors faux puisqu'il suppose le diamètre et la longueur constants au cours du temps. Il est donc primordial de suivre l'évolution de la géométrie en prenant des photographies à intervalle de temps régulier, de façon à calculer $\bar{\epsilon}$ et $\dot{\bar{\epsilon}}$ à tout instant (Figure II - 17).

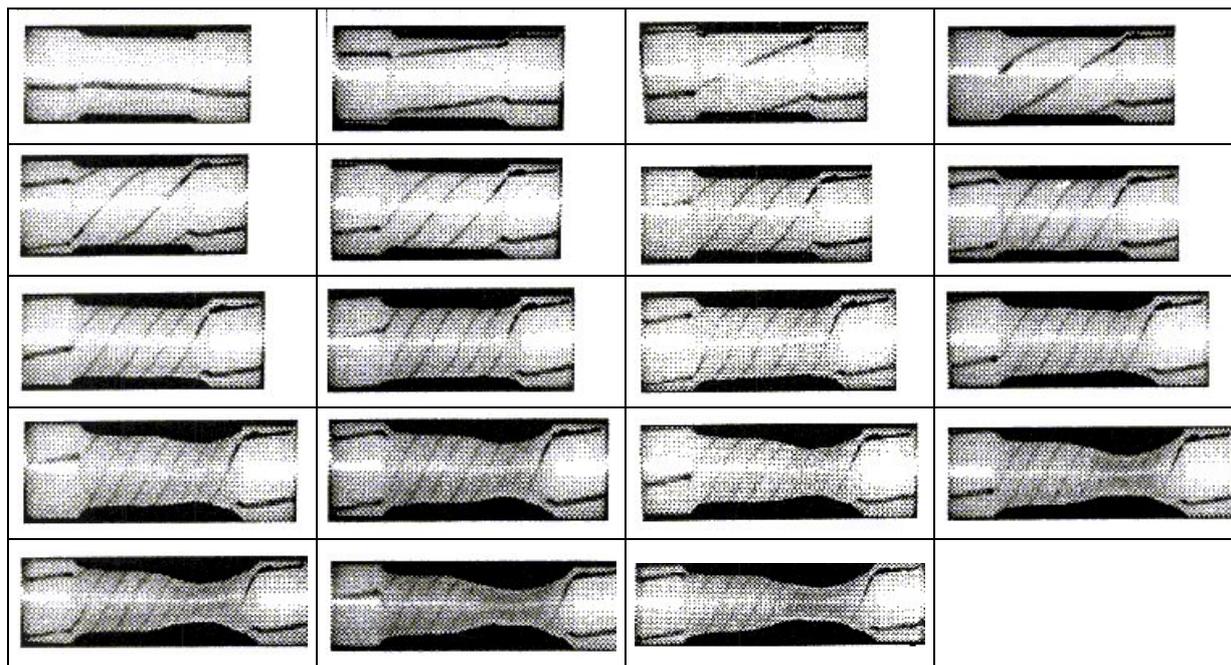


Figure II - 17 : Evolution de la géométrie de l'éprouvette au cours de l'essai de torsion (polyéthylène)

Cela n'a été malheureusement le cas qu'avec le polycarbonate, dont la déformation reste homogène dans la longueur. Dans le cas du polyéthylène, l'hypothèse de déformation homogène n'est pas du tout respectée (Figure II - 17) et cela conduit à des résultats non physiques. Dans le cas du polycarbonate, les clichés ont permis de remonter aux valeurs vraies de la déformation et de la contrainte (c'est-à-dire ramenées aux dimensions instantanées, et non plus initiales, de la géométrie de l'éprouvette). Les résultats obtenus par cette méthode sont réunis dans le Tableau II - 6. La loi de G'Sell associée à ces paramètres lisse relativement bien les courbes de contraintes modifiées et rend bien compte de l'effet de vitesse sur l'évolution de la contrainte « vraie » (Figure II - 18).

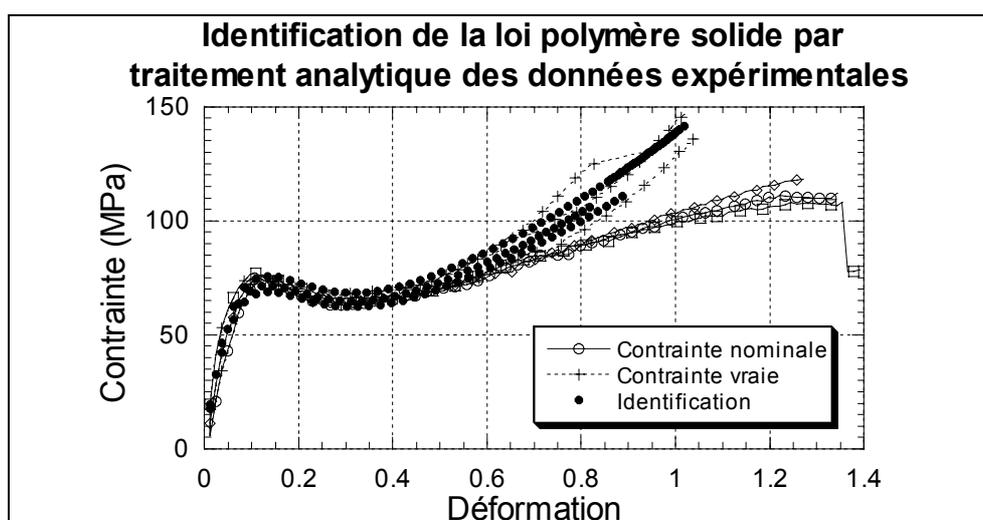


Figure II - 18 : Dépouillement de l'essai de torsion (polycarbonate) par la méthode de Fields & Backofen avec prise en compte de la géométrie au cours du temps. Les vitesses sont identiques à celles de la Figure II - 16.

	K_p (Mpa)	w	a	b	h	n	m
Sans traitement	2860	0,046	10,87	9,52	-0,28	2,00	-0,001
Avec traitement	119	1,8	7,8	9,7	0,42	2,00	0,023

Tableau II - 6 : Résultats du dépouillement par la méthode de Fields & Backofen pour le polycarbonate avec ou sans prise en compte de l'évolution de la géométrie (Loi de G'SELL).

7.3.3.3 Conclusion sur la méthode de Fields & Backofen

La méthode de Fields & Backofen repose sur des hypothèses simplificatrices et restrictives quant au mode de déformation. Elle ne permet par exemple pas de prendre en compte l'anisotropie qui se développe en cours d'essai. Dès que la géométrie de l'éprouvette évolue du fait de l'apparition d'un effort axial, le modèle ne peut plus s'appliquer directement. Il nécessite un traitement « manuel » des données expérimentales de façon à calculer la déformation vraie et la vitesse de déformation vraie à tout instant. Cela n'est possible que si la déformation reste uniforme (cas du polycarbonate). La méthode devient inapplicable dès lors qu'une déformation localisée apparaît (cas du polyéthylène).

D'autre part, hormis le fait que cette méthode est longue et fastidieuse (un traitement informatique adapté a su remédier à ce problème), la limitation du modèle réside essentiellement dans la détermination de \tilde{m} et de \tilde{n} . En effet, l'hypothèse d'une évolution linéaire du couple en fonction du nombre de tours et de la vitesse de rotation n'est pas vérifiée. Par conséquent, supposer \tilde{m} et \tilde{n} constants sur toute une plage de déformation peut entraîner une erreur non négligeable sur le calcul de la contrainte.

Pour vérifier nos résultats, nous avons donc cherché une méthode qui puisse nous permettre d'identifier les paramètres rhéologiques sans passer par ce calcul de la contrainte. Cela a été rendu possible en minimisant l'écart entre l'expérience et le modèle non plus sur les contraintes « calculées », mais directement sur les couples mesurés. Pour cela, tout en conservant les hypothèses du modèle précédent, on utilise l'expression (II - 6) qui relie le couple Γ à la contrainte $\sigma_{\theta z}$. Si l'on connaît le profil des contraintes $\sigma_{\theta z}$ sur une section de l'éprouvette, on peut remonter par une intégration à des couples de torsion « calculés » $\Gamma^{\text{calc}}(N)$ qu'il ne nous reste plus qu'à comparer aux couples expérimentaux $\Gamma^{\text{exp}}(N)$. La détermination du jeu de paramètres optimal se fait par minimisation de l'écart entre les deux, par la méthode des moindres carrés *via*, par exemple, le logiciel PARAMOPT développé au CEMEF. La recherche de l'écart minimum s'y effectue à l'aide

d'une méthode de type gradient (les composantes de la matrice de sensibilité sont déterminées par dérivation numérique), dont nous développerons le principe dans le chapitre III.

Notre loi de comportement étant relativement complexe, la détermination des couples « calculés » $\Gamma^{\text{calc}}(\mathbf{N})$ a nécessité la programmation d'un module d'intégration numérique au sein du logiciel. Le Tableau II - 7 permet de comparer le principe de cette méthode à celle de Fields & Backofen.

1) Obtention des couples expérimentaux Γ^{exp} ; 2) Détermination de la contrainte $\sigma_{\theta z}^{\text{F\&B}}$ à l'aide de la relation $\sigma_{\theta z}^{\text{F\&B}} = \frac{\sqrt{3}\Gamma(\mathbf{R})}{2\pi R^3}(\tilde{n} + \tilde{m} + 3)$; 3) Initialisation des paramètres P et calcul de la contrainte $\sigma_{\theta z}^{\text{L.C.}}$ à l'aide de la loi de comportement ; 4) Détermination des paramètres P tels que $\sigma_{\theta z}^{\text{L.C.}} = \sigma_{\theta z}^{\text{F\&B}}$ (PARAMOPT).	1) Obtention des couples expérimentaux Γ^{exp} ; 2) Initialisation des paramètres P et calcul de la contrainte $\sigma_{\theta z}^{\text{L.C.}}$ à l'aide de la loi de comportement ; 3) Détermination des couples Γ^{calc} à l'aide de la relation $\Gamma^{\text{calc}} = \int_0^R \sigma_{\theta z}^{\text{L.C.}} \cdot 2\pi \cdot r^2 \cdot dr$ (intégration numérique) ; 4) Détermination des paramètres P tels que $\Gamma^{\text{calc}} = \Gamma^{\text{exp}}$ (PARAMOPT).
Méthode de Fields & Backofen	Notre méthode

Tableau II - 7 : Comparaison du principe des deux méthodes de dépouillement utilisées dans le cadre de l'essai de torsion.

Contrairement à notre attente, cette méthode n'a pas permis d'améliorer les résultats obtenus à l'aide du dépouillement classique précédent. L'écart entre les valeurs calculées et expérimentales n'a pas diminué. Nos craintes quant aux imprécisions éventuelles sur la détermination de \tilde{m} et \tilde{n} n'étaient donc pas fondées (ce qu'il fallait vérifier).

Aux nombreuses limitations « pratiques » que présente le dépouillement de l'essai de torsion pour les polymères s'ajoute une autre restriction de taille : il a en effet été récemment démontré sur le polycarbonate [8], à l'aide de la diffraction des rayons X, que la déformation n'est pas systématiquement homogène sur la section et que, par ailleurs, l'orientation des chaînes macromoléculaires n'est pas uniforme le long de l'éprouvette (orientation plus importante du côté du mors mobile). Ces constatations qui vont à l'encontre des hypothèses posées par Fields & Backofen font que, malgré les conditions de sollicitations sévères qu'il permet d'atteindre, l'essai de torsion semble particulièrement inadapté à l'identification des lois de comportement des polymères solides ductiles. D'ailleurs, même le passage à un modèle de dépouillement numérique par éléments finis 2D (TORRAO développé au CEMEF) qui permet de lever les hypothèses simplificatrices des

méthodes de dépouillement classiques (Annexe 3), reste insuffisant, dans le cas des polymères, pour caractériser cette déformation complexe (malgré l'ajout d'un module de dilatation thermique). Nous nous sommes donc tournés dans un second temps vers un autre essai très répandu : l'essai de traction.

7.4 L'essai de Traction

L'essai de traction uniaxial est un essai « simple » à mettre en œuvre. En raison de son dépouillement simple, il permet d'établir des lois de comportement fiables. En outre, il présente une reproductibilité remarquable.

7.4.1 Instrumentation

Les essais de traction « basses vitesses » ont tous été réalisés sur une machine hydraulique INSTRÖN 1341 classique. Les vitesses de traverse accessibles sont comprises entre 0,1 mm/min et 10 000 mm/min. Deux types d'essais de traction ont été effectués.

7.4.1.1 L'essai de vidéotraction

Dans cette essai, le banc de traction est couplé au système vidéométrique « vidéotraction », développé à l'Ecole des Mines de Nancy au laboratoire de physique du solide par l'équipe du Professeur G'SELL [9]. Il repose sur la mesure précise de la géométrie locale d'une éprouvette « sablier » au cours de la déformation. Cela est rendu possible grâce à une caméra vidéo reliée à un micro-ordinateur doté d'un système d'analyse d'images (Figure II - 19).

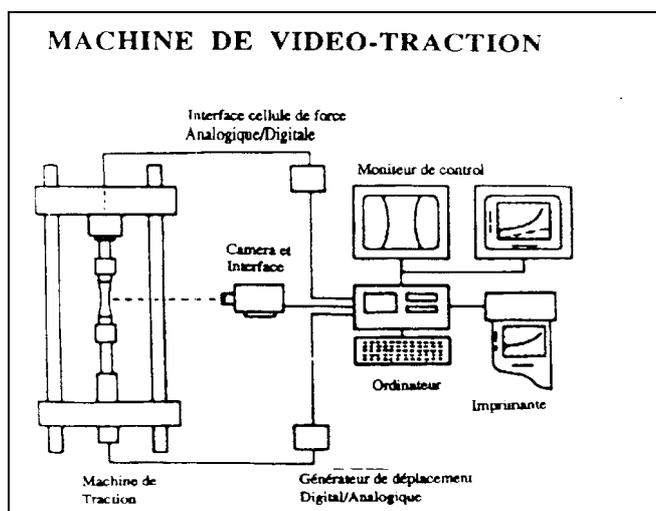


Figure II - 19 : Schéma du principe du système « vidéotraction ».

Cette mesure (diamètre minimal D et rayon de courbure local ρ) permet de remonter aux valeurs vraies de la contrainte, de la déformation et de la vitesse de déformation. Cette méthode permet en outre de piloter en retour l'actionneur de la machine d'essais (vérin hydraulique par exemple) de manière à conserver une vitesse de déformation constante dans la zone de diamètre minimal au cours de l'essai. Cela facilite beaucoup l'identification des paramètres rhéologiques. C'est grâce à un générateur de rampe à pente programmable, qu'un ordinateur, interfacé à la machine d'essai, peut commander le vérin avec une vitesse de déformation vraie constante. Pour cela, il détermine la déformation du matériau en temps réel à l'aide de l'image fournie par la caméra vidéo. La force appliquée à l'éprouvette est mesurée par une cellule de force couplée à un convertisseur analogique-numérique Analog-Device 12 bits ;

L'inconvénient majeur de la vidéotraction réside dans le fait que de sérieux problèmes d'acquisition et de traitement en temps réel du signal apparaissent pour des vitesses de sollicitation rapides et lorsque les évolutions de formes sont importantes. D'autre part, la caractérisation de la zone viscoélastique des matériaux est peu précise. En effet, au début de la déformation, le diamètre de l'éprouvette n'évolue pas de manière significative et la précision du système d'acquisition (généralement de l'ordre de $\pm 30 \mu\text{m}$), en conditions ordinaires d'utilisation, ne permet pas d'obtenir des mesures fiables. Pour cela, nous avons dû réaliser des essais de traction plus « classique », à l'aide cette fois-ci d'extensomètre, de manière à mieux caractériser le matériau aux faibles déformations.

7.4.1.2 Mesure aux faibles déformations

Les essais à faibles déformations ont été réalisés à l'aide de la même machine INSTRÖN, sur des éprouvettes cylindriques. Un extensomètre MTS 632.13C-20 nous a permis de connaître la déformation de l'éprouvette avec une précision de 3 %, sur une plage de 1,5 mm.

7.4.1.3 Matériel

7.4.1.3.1 Géométrie des éprouvettes

Dans le cas du polyéthylène et du polycarbonate, les éprouvettes utilisées pour les essais de tractions ont été usinées à partir de joncs extrudés. Elles sont axisymétriques et sont, selon l'essai, de type « sablier » (ou « diabolo ») (Figure II - 20a) ou cylindrique (Figure II - 20b). La géométrie sablier permet de localiser la striction dans la zone de diamètre minimal, le rayon de courbure important limitant quant à lui les effets de triaxialité des contraintes [10]. La première de ces

propriétés est particulièrement intéressante dans le cas de la vidéotraction, le suivi du rayon minimal à l'aide de la caméra étant ainsi facilité.

Les éprouvettes cylindriques ont quant à elles été dessinées de façon à supporter notre extensomètre.

Pour le polypropylène, des éprouvettes de type « sablier » ont été usinées dans des plaques de 5 mm d'épaisseur, de façon à utiliser un grade d'injection identique pour les sollicitations uni- et multi-axiales. Dans ce cas, la zone utile des éprouvettes est axisymétrique mais les têtes présentent une section carrée (Figure II - 20c).

Toutes ces géométries d'éprouvettes non « normalisées » ont nécessité l'usinage et l'emploi de mors adaptés.

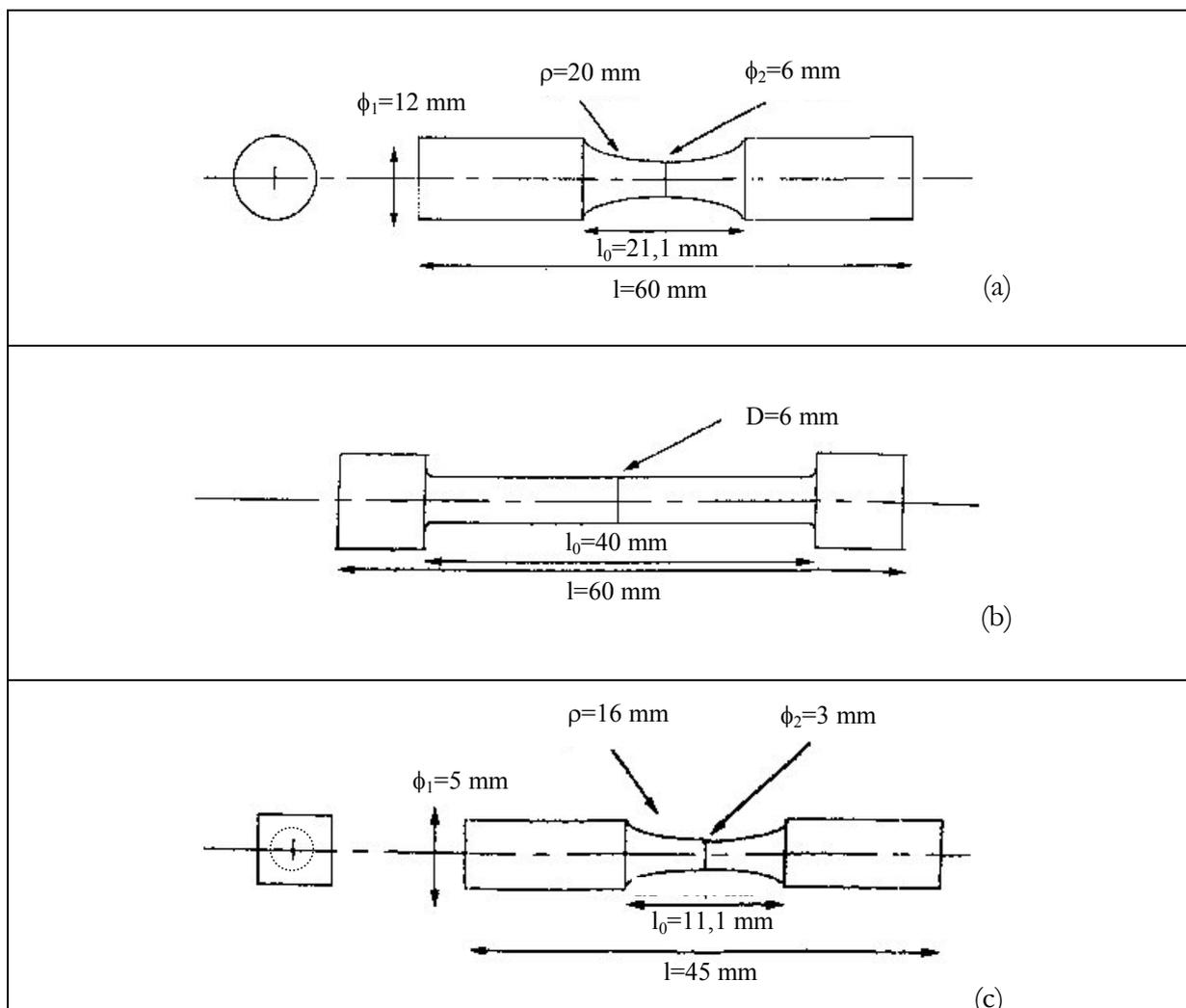


Figure II - 20 : Géométrie des éprouvettes obtenues à partir de jons extrudés (de type « sablier » (a) et cylindriques (b)), à partir de plaques injectées (c).

7.4.1.3.2 Les mors

Selon les techniques utilisées, les mors et les montages mécaniques sont différents :

- Les mors utilisés avec le système vidéotraction permettent de tenir les éprouvettes à têtes axisymétriques de 12 mm de diamètre. Ces mors sont serrés à l'aide de deux vis. Le faible encombrement du montage autorise la prise de vue à l'aide de la caméra et permet surtout l'utilisation d'une enceinte thermostatée pour d'éventuels essais en température.
- Les mors classiquement utilisés avec la machine INSTRÖN sont des mors autoserrants. Leur taille, relativement imposante, ne permettent pas d'utiliser l'étuve et peuvent provoquer une gêne lors d'essais vidéométriques. Leur utilisation s'est donc limitée à des essais de vitesse de traverse constante et à température ambiante.
- Les éprouvettes de type « sablier » de diamètre inférieur ont nécessité la réalisation de petits mors autoserrants. Ce montage permet également d'utiliser le système vidéométrique, y compris en température.

Selon le montage, le nombre de pièces s'intercalant entre la cellule de force et l'éprouvette est plus ou moins important et leur rigidité est plus ou moins parfaite. Il en résulte une certaine erreur sur la mesure du déplacement de la traverse. En l'absence d'extensomètre, il a donc été parfois nécessaire d'apporter une légère correction aux mesures brutes, de façon à prendre en compte la rigidité « imparfaite » du montage (barres + mors). La solution la plus naturelle consiste à introduire une rigidité équivalente, k , du montage. Le déplacement vrai est alors relié au déplacement mesuré par l'intermédiaire de la relation :

$$\text{dép}_{\text{vrai}} = \text{dép}_{\text{mesuré}} - \frac{F}{k} \quad (\text{II} - 9)$$

dép_{vrai} et $\text{dép}_{\text{mesuré}}$ représentent respectivement le déplacement de la tête de l'éprouvette et celui du vérin de la machine. F est la force mesurée au cours de l'expérience. Le facteur correctif k peut être déterminé en comparant les courbes force/déplacement brutes à des courbes obtenues, pour un montage identique, à l'aide d'extensomètres ou de toute autre méthode de mesure locale de la déformation.

Il a également été constaté que l'utilisation de mors autoserrants peut provoquer une rupture de la pente initiale des courbes force/déplacement. Ce phénomène observé essentiellement dans le cas du polycarbonate – les polymères plus malléables tels que le polyéthylène ou le polypropylène ne

semblent pas présenter de problèmes particuliers - a été vérifié en mesurant les déplacements relatifs du montage à l'aide d'un palpeur [8]. L'auteur l'a attribué à l'« ancrage » de l'éprouvette dans les mors.

7.4.1.3.3 Les essais en température

De façon à identifier les termes de thermodépendance éventuels des lois de comportement, nous avons réalisés des essais en température. Ceux-ci ont été rendus possibles grâce à une enceinte thermostatée REALIST[®] autorisant des essais pouvant atteindre 200 °C. Sa porte vitrée autorise l'utilisation du système vidéotraction. De façon à vérifier l'uniformité de la température au sein de l'étuve, nous avons placé un thermocouple au fond de l'enceinte et un second au voisinage de l'échantillon : la différence de température maximale observée entre les deux thermocouples n'a guère excédé un degré. Le protocole de chauffage que nous avons suivi a consisté en une montée en température de l'échantillon pouvant durer de 45 minutes à une heure. L'éprouvette était alors maintenue pendant 10 minutes à la température désirée avant de démarrer l'essai. Ce délai a été calculé selon l'hypothèse du réchauffement d'un massif plat semi-infini d'épaisseur égale au diamètre de l'éprouvette et confronté à des simulations par éléments finis à l'aide du code FORGE2[®] [11]. L'une des extrémités de l'éprouvette est laissée libre durant la phase de chauffage de façon à laisser les dilatations thermiques s'effectuer librement.

7.4.2 Principes de dépouillement des essais de traction

Comme nous l'avons signalé plus haut, l'essai de vidéotraction fournit directement les courbes représentant l'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à partir de mesures locales des éprouvettes en cours de déformation (diamètre et rayon de courbure à chaque instant). Pour parvenir à ces résultats, le logiciel « vidéotraction » repose, tout comme en torsion, sur un certain nombre d'hypothèses, lesquelles sont nécessaires au dépouillement analytique des données mesurées expérimentalement.

7.4.2.1 Essais de vidéotraction

Les hypothèses nécessaires à la transformation des grandeurs technologiques (force, géométrie, vitesse de traverse ...) en grandeurs vraies et équivalentes (contrainte vraie, déformation vraie, vitesse de déformation vraie ...) sont :

- dans la zone de diamètre minimal, où sont mesurées le diamètre D et le rayon de courbure ρ , la déformation est supposée homogène ;
- Le matériau est supposé homogène, incompressible et isotrope.

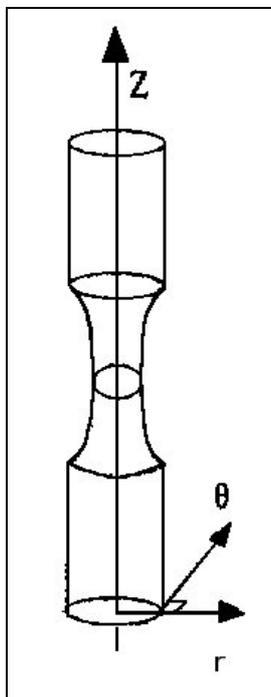


Figure II - 21 : Définition des axes dans le cas du dépouillement analytique de l'essai de vidéotraction.

A chaque instant, la contrainte uniaxiale σ_{zz} est définie par la relation (Figure II - 21) :

$$\sigma_{zz} = \frac{F}{S} = \frac{4F}{\pi D^2} \quad (\text{II - 10})$$

où F correspond à la force mesurée en traction uniaxiale.

La vitesse de déformation uniaxiale est déterminée quant à elle par :

$$\dot{\varepsilon}_{zz} = -\frac{2}{D} \frac{dD}{dt} \quad (\text{II - 11})$$

La déformation, pour sa part, est obtenue par intégration sur le temps de la grandeur précédente :

$$\varepsilon_{zz} = \int_0^t \dot{\varepsilon}_{zz}(u) du = 2 \ln \left(\frac{D_0}{D} \right) \quad (\text{II - 12})$$

D_0 correspondant à la valeur initiale du diamètre de l'éprouvette.

Rappelons que si l'on suppose que le matériau obéit à la loi d'écoulement généralisée de Von Mises, on a :

$$s_{ij} = \frac{2}{3} \frac{\bar{\sigma}}{\dot{\bar{\epsilon}}} \dot{\epsilon}_{ij} \quad (\text{II - 13})$$

où s_{ij} et $\dot{\epsilon}_{ij}$ sont respectivement les composantes du tenseur déviatorique des contraintes et des vitesses de déformation. La vitesse de déformation généralisée s'écrit quant à elle :

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon} : \dot{\epsilon}} = \dot{\epsilon}_{zz} \quad (\text{II - 14})$$

En fait, il a été constaté depuis longtemps qu'au centre d'une striction de profil concave, l'existence d'un rayon de courbure avant et après l'amorçage de la striction induit un champ de contraintes qui n'est pas totalement uniaxial. C'est pourquoi, certains auteurs ont proposé d'introduire une contrainte équivalente $\bar{\sigma}$ égale à la contrainte uniaxiale à un facteur près, que l'on nomme « facteur de triaxialité » F_T [12]. Ce facteur est fonction de la géométrie de l'éprouvette au niveau de la zone étudiée. Il est inférieur à 1 pour un profil concave et supérieur à 1 pour un profil convexe.

Les expressions proposées pour le facteur de triaxialité sont généralement spécifiques aux conditions de l'essai. Dans le cas de l'essai de traction uniaxiale d'éprouvettes axisymétriques, l'analyse la plus citée et la plus complète est celle de Bridgman [13]. Elle s'appuie à l'origine sur des essais menés sur des éprouvettes cylindriques entaillées pour lesquelles un certain nombre d'hypothèses sont formulées. Elle semble s'appliquer particulièrement lorsque le rayon de courbure de l'éprouvette ρ est grand devant son rayon.

Le calcul mené par Bridgman est basé sur la loi d'écoulement déduite du critère de Von Mises. Le matériau supposé isotrope, incompressible et non écrouissable est supposé se déformer plastiquement. La déformation est supposée symétrique par rapport au plan médian du défaut, plan dans lequel le calcul est effectué. Moyennant l'hypothèse d'une égalité entre les contraintes radiales et circonférentielles ($\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta}$) et en supposant que les contraintes axiales et radiales sont reliées à l'aide de l'expression

$$\sigma_{zz} = \sigma_{rr} + \frac{F}{S_0} \quad (\text{II - 15})$$

(S_0 étant la section initiale de l'éprouvette), Bridgman est parvenu à écrire l'équilibre mécanique sur un petit élément de volume compris entre deux sections de rayons r et $(r+dr)$. L'expression du facteur de triaxialité F_T à laquelle son calcul a conduit lui a permis d'exprimer la contrainte équivalente sous la forme :

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{s} : \underline{s}} = \sigma_{zz} \times F_T = \sigma_{zz} \times \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{4\rho}{D}\right) \ln\left(1 + \frac{D}{4\rho}\right)} \right] \quad (\text{II - 16})$$

Dans le cas des éprouvettes « sablier », dont le rayon de courbure est important, l'influence du facteur de triaxialité calculé avec le formalisme de Bridgman est faible, ce dernier étant compris entre 0,9 et 1. Il intervient essentiellement lors de l'apparition de la striction, où le régime plastique est déjà amorcé, l'hypothèse de déformation plastique sur laquelle est basée le formalisme de Bridgman ne semble donc pas poser de problèmes majeurs. De même, la striction étant symétrique par rapport à son plan médian, les hypothèses géométriques sont également respectées dans la zone de rayon minimal.

7.4.2.2 Essais de traction classiques

Pour les essais où le diamètre n'est pas connu à chaque instant, il est malgré tout possible de calculer la contrainte nominale jusqu'au seuil de plasticité, soit jusqu'à l'amorçage de la striction. En émettant l'hypothèse que le diamètre évolue peu sur la gamme de déformation considérée, la contrainte nominale peut être estimée à l'aide de la relation :

$$\sigma = \frac{4F}{\pi D_0^2} \quad (\text{II - 17})$$

Cette hypothèse a été validée [8] sur nos géométries d'éprouvettes.

7.4.2.3 Essais aux faibles déformations (extensomètres)

L'extensomètre permet de mesurer le déplacement relatif ΔL de deux couteaux maintenus sur la zone utile de l'éprouvette. Leur écartement initial L_0 est de 10 mm dans notre cas. L'hypothèse d'incompressibilité de l'éprouvette permet d'écrire la relation :

$$L_0 D_0^2 = (L_0 + \Delta L) D^2 \quad (\text{II - 18})$$

soit

$$D^2 = \frac{D_0^2 L_0}{L_0 + \Delta L} = \frac{D_0^2}{1 + \frac{\Delta L}{L_0}} \quad (\text{II - 19})$$

La contrainte vraie est alors obtenue en introduisant l'expression (II - 19) dans l'équation (II - 10) :

$$\sigma_{zz} = \frac{4F}{\pi D^2} = \frac{4F}{\pi D_0^2} \left(1 + \frac{\Delta L}{L_0} \right) \quad (\text{II - 20})$$

La déformation vraie devient quant à elle :

$$\varepsilon_{zz} = \ln \left(1 + \frac{\Delta L}{L_0} \right) \quad (\text{II - 21})$$

Le module d'Young est accessible en pratiquant une régression linéaire de la partie linéaire de la courbe représentant l'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie.

7.4.3 Traction « basses vitesses »

7.4.3.1 Conditions opératoires

En ce qui concerne le polyéthylène et le polycarbonate, nous avons sélectionné trois températures d'essai en prenant soin de demeurer sous les températures de transition des deux produits. Par contre, les essais de traction « basses vitesses » effectués sur le polypropylène ont été réalisés uniquement à température ambiante.

Pour l'ensemble des polymères, nous avons retenu cinq vitesses de déformation constantes et comprises entre 5.10^{-4} et 10^{-3} s^{-1} de façon à limiter les phénomènes d'autoéchauffement. Les conditions opératoires retenues sont résumées dans le Tableau II - 8.

	Vitesse de déformation constante (s^{-1})					Température ($^{\circ}\text{C}$)			
	5.10^{-4}	2.10^{-4}	10^{-4}	5.10^{-3}	10^{-3}	23	50	90	110
Polyéthylène	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-	✓
Polycarbonate	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-
Polypropylène	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-	-	-

Tableau II - 8 : Conditions opératoires retenues (✓) ou non (-) pour les essais de traction « basses vitesses » pour le polyéthylène, le polycarbonate et le polypropylène.

Les essais à l'aide de l'extensomètre ont été réalisés uniquement sur le polyéthylène et le polycarbonate, en prenant soin de s'approcher au maximum des conditions adoptées lors des essais de vidéotraction, c'est-à-dire :

- avec des vitesses de traverse constantes conduisant à des vitesses de déformation équivalentes, sur la zone de déformation étudiée, à la gamme des vitesses de déformation atteintes à l'aide du système vidéotraction ;
- aux mêmes températures d'essai.

Les conditions opératoires retenues pour les expériences de traction avec extensomètres sont résumées dans le Tableau II - 9.

Conditions opératoires	Vitesse de traverse constante (mm/min)	VITESSE							TEMPERATURE ($^{\circ}\text{C}$)			
		0,1	0,5	1,0	5,0	7,5	10,0	50,0	23	50	90	110
		Vitesse de déformation « équivalente » (s^{-1})	4.10^{-5}	2.10^{-4}	4.10^{-4}	2.10^{-3}	3.10^{-3}	4.10^{-3}				
POLYETHYLENE	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-	✓
POLYCARBONATE	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	-

Tableau II - 9 : Conditions opératoires retenues (✓) ou non (-) pour les essais de traction « basses vitesses » avec extensomètre pour le polyéthylène et le polycarbonate.

7.4.3.2 Résultats

7.4.3.2.1 Etude des courbes expérimentales

Les courbes de la Figure II - 22 permettent de constater les différences de comportement des différents polymères utilisés.

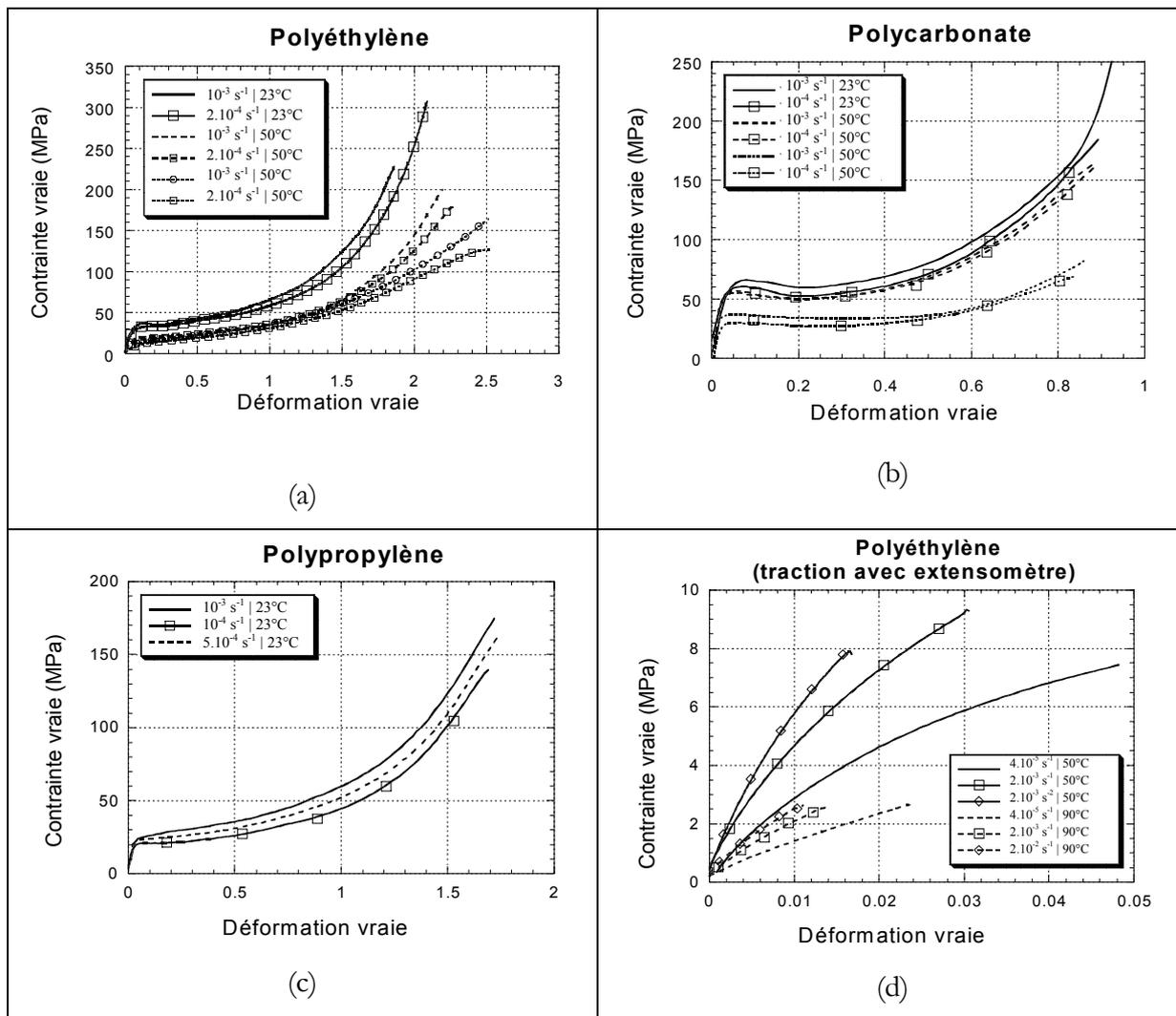


Figure II - 22 : Courbes contrainte vraie vs déformation vraie - Différences de comportement entre le polyéthylène (a), le polycarbonate (b) et le polypropylène (c) aux basses vitesses et comportement du polyéthylène aux faibles déformations (d).

Outre le fait qu'ils admettent des déformations pouvant atteindre un ratio de 1 (polycarbonate) pour 3 (polyéthylène), l'influence de la vitesse de sollicitation semble également différente : très faible pour le polycarbonate (on note une légère translation des courbes vers les hautes contraintes), elle semble au contraire déterminante dans le cas du polyéthylène et du polypropylène. Une autre particularité propre au polycarbonate réside dans la présence d'un crochet de traction (le polypropylène semble présenter lui aussi un pic de traction, mais à un degré nettement moindre).

Ce pic ne semble se décaler que très légèrement vers les grandes déformations lorsque la vitesse de sollicitation augmente. Par contre, aux vitesses considérées, sa hauteur diminue nettement lorsque la température augmente.

Pour l'ensemble des polymères, le niveau de force atteint au cours de la déformation plastique diminue lorsque la température augmente. Il en va de même du module d'Young (mesuré grâce aux essais de traction avec extensomètres). Par ailleurs, comme signalé dans le paragraphe 3.2 du chapitre I, la Figure II - 22-d confirme la non-linéarité très marquée du comportement viscoélastique aux faibles déformations.

7.4.3.2.2 Identification classique

L'identification des paramètres de la loi de comportement sélectionnée se fait simplement en minimisant l'écart au sens des moindres carrés, entre les courbes (contrainte vraie vs déformation vraie) obtenues à l'aide du dépouillement analytique et celles calculées directement à l'aide de la loi de comportement. Cette minimisation a été réalisée à l'aide de l'outil de régression utilisé lors du dépouillement des essais de torsion (logiciel PARAMOPT). Des exemples d'identifications réalisés sur plusieurs essais (cinq vitesses de déformation différentes et une température) sont donnés dans le Tableau II - 10. Cela ne nous permet pas bien entendu d'identifier la thermodépendance de la loi. Nous avons volontairement négligé dans la loi de comportement de G'Sell (loi polymère solide) le terme représentatif du crochet de traction qui, même dans le cas du polycarbonate, peut être négligé eu égard à l'importante plage de déformation étudiée. Cela diminue le nombre de coefficient à identifier et permet d'éviter certains problèmes d'unicité de solution, des « interactions » entre le terme crochet et le terme de durcissement ayant été constatées.

Paramètre	Kp^* (Mpa.s ^m)	w	h	n	m
Valeur identifiée pour le polyéthylène	37,9	35,6	0,76	1,4	0,095
Valeur identifiée pour le polypropylène	44,1	65,5	0,75	1,75	0,076

Tableau II - 10 : Résultat de l'identification des coefficients associés à la loi de G'Sell après dépouillement analytique (+PARAMOPT) d'essais de vidéotraction menés sur le polyéthylène et sur le polypropylène (5 vitesses - $5 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-4}$, 10^{-4} , $5 \cdot 10^{-3}$ et 10^{-3} s⁻¹ - et 1 température - 50°C pour le polyéthylène et 23°C pour le polypropylène -).

Les deux figures suivantes (Figure II - 23) reproduisent les courbes auxquelles conduisent ces résultats dans le cas du polyéthylène et du polypropylène. La concordance entre l'expérience et la loi

* Rappel : $Kp = K \exp(\beta/T)$

ainsi identifiée est globalement bonne. Par contre, aux faibles déformations, la loi de G'Sell est une approximation assez grossière du comportement (Figure II - 24).

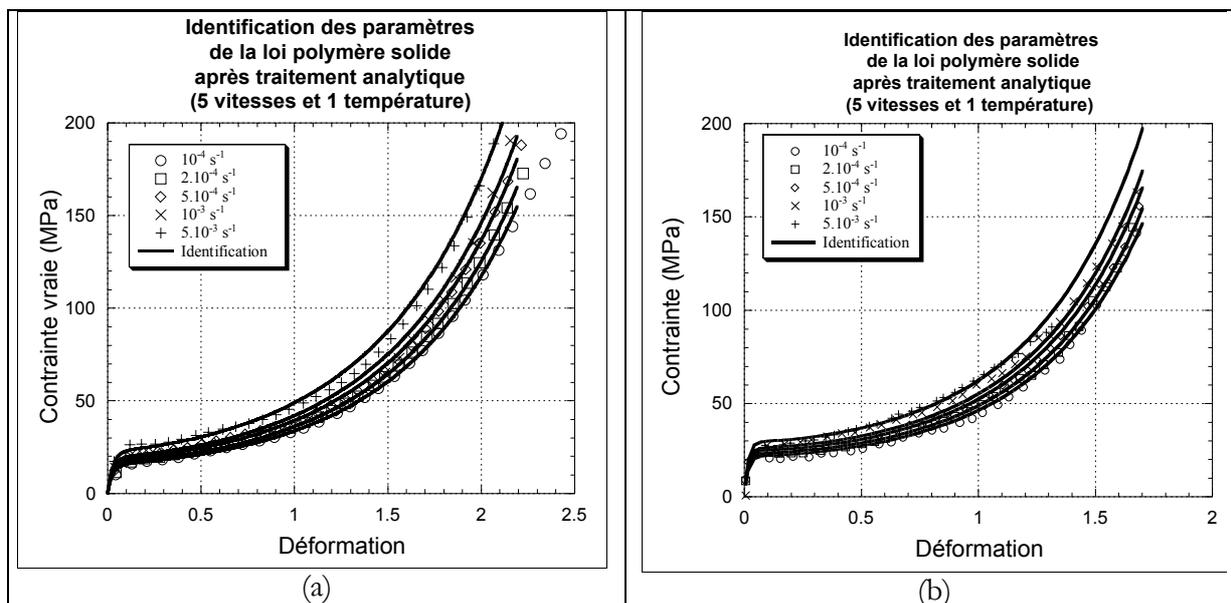


Figure II - 23 : Résultats du dépouillement analytique pour le polyéthylène (a) et pour le polypropylène (b).

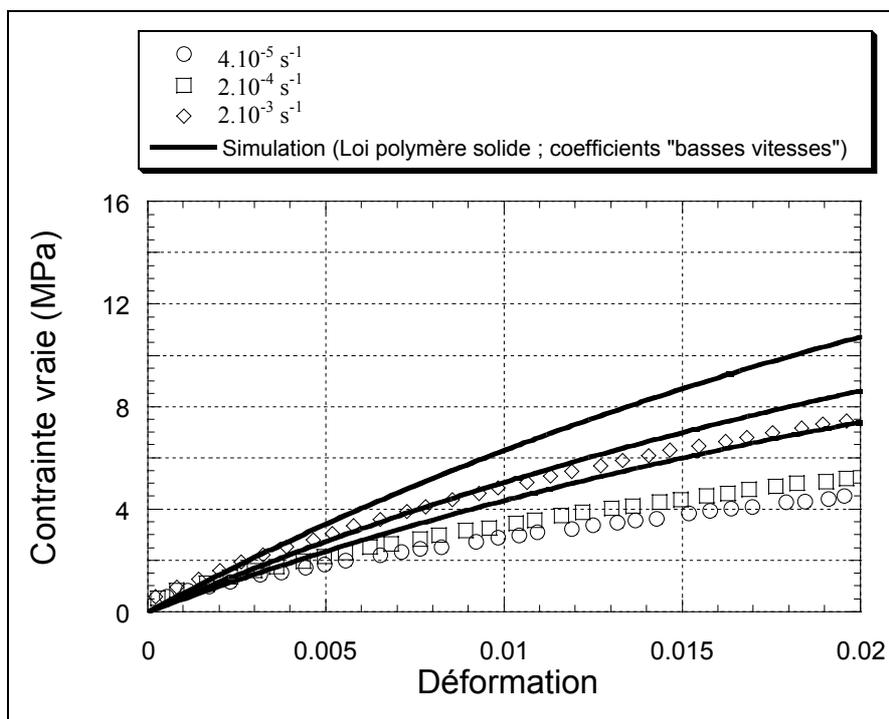


Figure II - 24 : Comparaison entre les résultats obtenus en traction avec extensomètres sur le polyéthylène et la loi de comportement polymère solide identifiée après traitement analytique des données expérimentales de vidéo-traction « basses vitesses ».

Afin de déterminer le coefficient de thermodépendance β , nous avons réalisé une seconde identification sur la base, cette fois-ci, des résultats expérimentaux d'essais réalisés pour deux vitesses de déformation (10^{-3} et 2.10^{-4} s $^{-1}$) et pour trois températures : 23, 50 et 90 °C pour le polycarbonate et 23, 50 et 110 °C pour le polyéthylène. Les résultats sont réunis dans Tableau II - 11.

Polymère	Thermodépendance	Paramètres					
		K (MPa)	β (K)	w	h	n	m
Polyéthylène	Non	$K_p=37,9$		35,6	0,76	1,4	0,095
Polyéthylène	Oui	8,8	466	32,7	0,59	2,03	0,096
Polycarbonate	Oui	5,44	774	110	1,57	2	0,040

Tableau II - 11 : Prise en compte de la thermodépendance dans la loi polymère solide.

Comme le montre la Figure II - 25, ces nouveaux paramètres ne permettent pas de reproduire aussi parfaitement les résultats expérimentaux, en particulier aux fortes déformations. Cela remet en cause la pertinence de la thermodépendance telle qu'elle est formulée dans la loi utilisée.

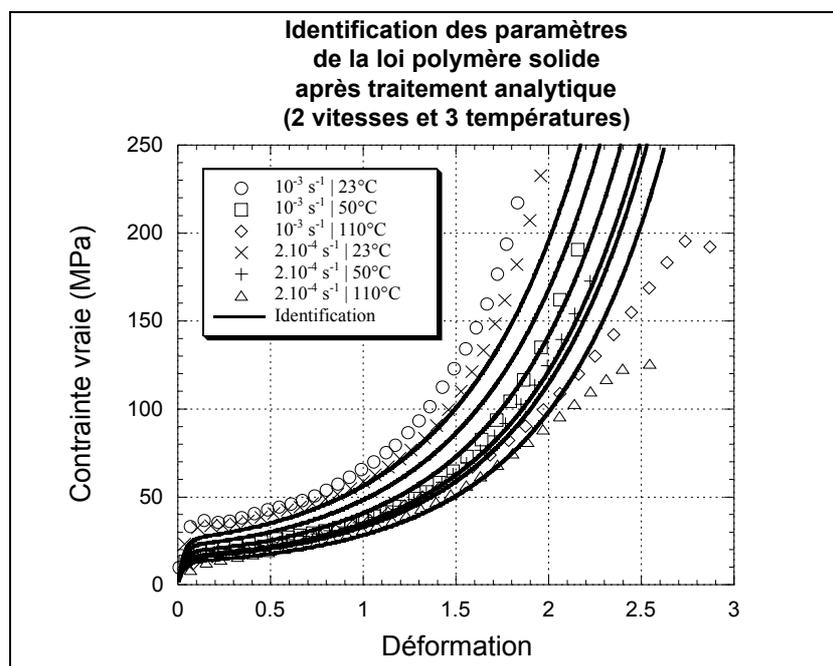


Figure II - 25 : Résultats du dépouillement analytique pour le polyéthylène avec prise en compte de la thermodépendance.

Nous avons donc cherché à étudier la variation des divers coefficients avec la température.

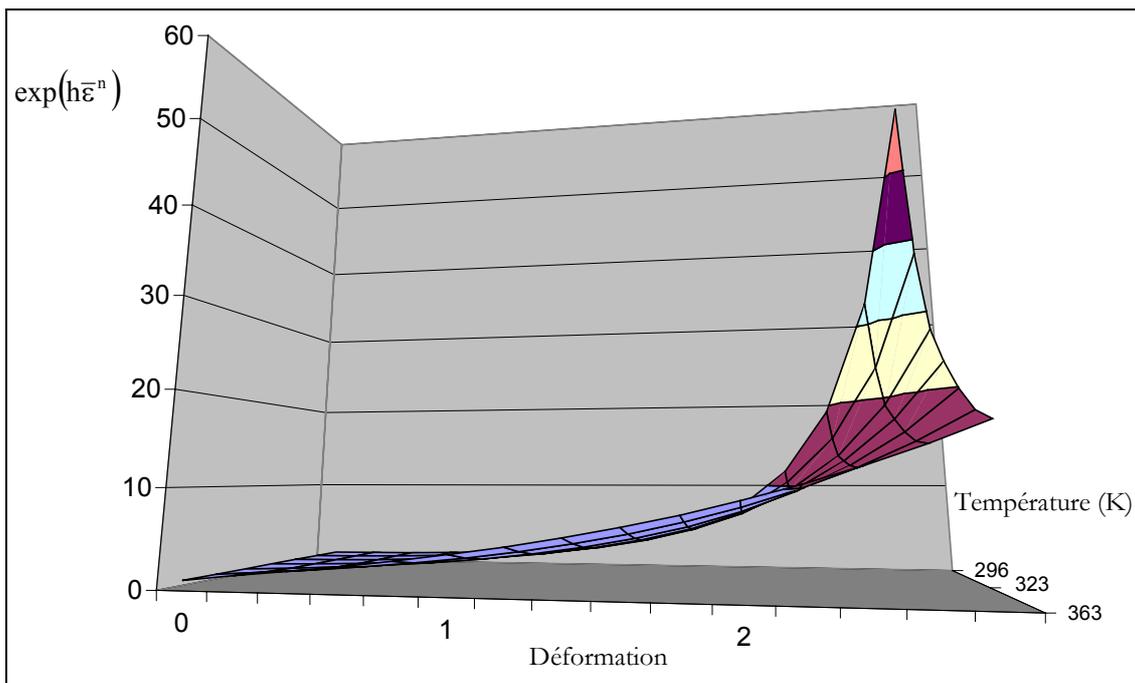


Figure II - 26 : Evolution du terme de durcissement du polyéthylène avec la température.

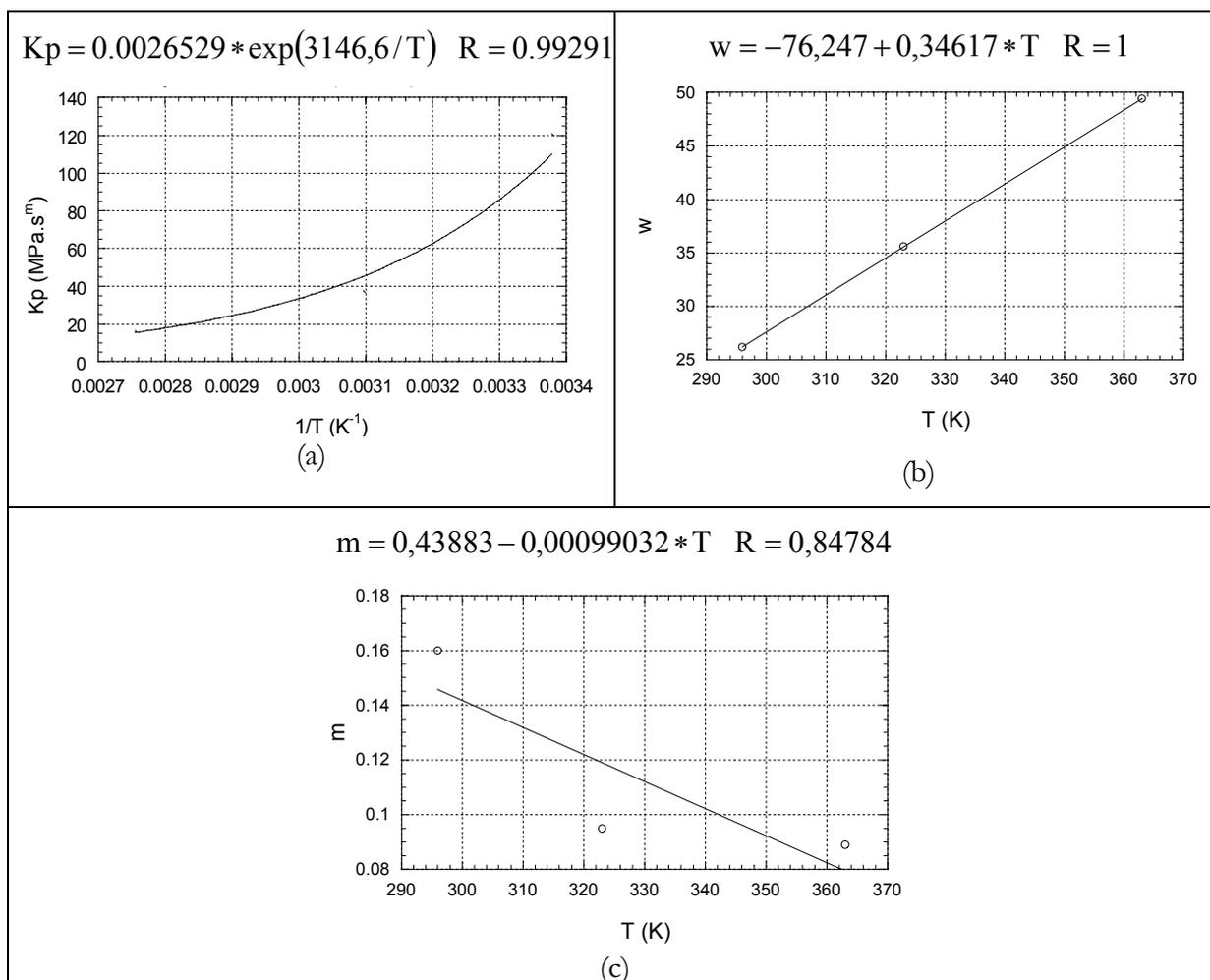


Figure II - 27 : Evolution des paramètres rhéologiques en fonction de la température (polyéthylène) – R est le coefficient de corrélation correspondant aux équations de dépendance en température.

Comme le prouvent la Figure II - 26 et la Figure II - 27, les paramètres sont effectivement assez sensibles à la température.

L'effet de la température sur le terme de durcissement structural $\exp(h\bar{\epsilon}^n)$ se fait particulièrement ressentir aux fortes déformations (Figure II - 26). La Figure II - 27a semble confirmer le fait que la thermodépendance de la consistance K_p s'exprime sous la forme d'une loi de type Arrhenius. Le coefficient w , qui reflète le comportement « viscoélastique » aux faibles déformations semble quant à lui augmenter linéairement avec la température (Figure II - 27b). Le terme de « Maxwell » $(1 - \exp(-w \cdot \bar{\epsilon}))$ suit ainsi grossièrement la diminution du module élastique avec la température. Enfin, il semblerait que plus la température à laquelle l'essai est mené est importante, moins le polyéthylène soit sensible à l'effet de la vitesse. Cela se traduit par une diminution du coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation m avec la température (Figure II - 27c).

Nous ne prétendons bien entendu pas ici déterminer la thermodépendance exacte de chacun des coefficients à l'aide de ces quelques essais en température, mais cela suffit à prendre conscience des risques que nous encourons à vouloir extrapoler le comportement d'un matériau à d'autres températures que celles qui ont servi à l'identification.

Malgré cette évolution avec la température, l'usage de coefficients constants donne quand même des résultats acceptables sur une plage de déformation relativement importante et dans la gamme des faibles vitesses de déformation envisagée. Cela laisse toutefois présupposer certains problèmes lors de l'extrapolation du comportement à des vitesses de sollicitations plus importantes. C'est ce que nous avons voulu vérifier en pratiquant des essais de traction à « moyennes vitesses ».

7.4.4 Traction « moyennes vitesses »

La plupart des expériences de traction à « moyennes vitesses » réalisées lors de l'étude de thermographie infrarouge sur le polyéthylène et le polycarbonate (Chapitre II § 3.2), ont été reproduites à l'aide du dispositif «vidéotraction» de façon à enregistrer des renseignements complémentaires concernant l'évolution du profil des éprouvettes. Toutefois, les vitesses que nous cherchons à atteindre à travers ces expériences ne permettent pas d'utiliser l'option de pilotage à vitesse de déformation constante proposée par le système vidéométrique.

7.4.4.1 Conditions opératoires

Les conditions opératoires que nous avons retenues sont recensées dans le Tableau II - 12.

POLYMERE	TYPE D'ÉPROUVETTE	VITESSE DE TRAVERSE CONSTANTE (MM/MIN)	VITESSE DE DEFORMATION EQUIVALENTE ³ (S ⁻¹)	TEMPERATURE (°C)		
				23	50	90
Polycarbonate	Sablier tête cylindrique (Φ _{min} =6 mm)	0,25	5.10 ⁻⁴	✓	-	-
		0,5	10 ⁻³	✓	-	-
		5	10 ⁻²	✓	-	-
		10	2.10 ⁻²	✓	-	-
		30	5,8.10 ⁻²	✓	-	-
		100	2.10 ⁻¹	✓	-	-
Polyéthylène	Sablier tête cylindrique (Φ _{min} =6 mm)	0,5	10 ⁻³	✓		
		2,5	5.10 ⁻³	✓		
		5	10 ⁻²	✓		
		10	2.10 ⁻²	✓		
Polypropylène	Sablier tête carrée (Φ _{min} =3 mm)	0,127	5.10 ⁻⁴	-	✓	-
		0,25	10 ⁻³	✓	✓	✓
		1,25	5.10 ⁻³	-	✓	✓
		2,5	10 ⁻²	✓	-	✓
		5	2.10 ⁻²	✓	-	-

Tableau II - 12 : Conditions opératoires retenues (✓) ou non (-) pour les essais de traction « moyennes vitesses » (à vitesses de traverse constantes) pour le polyéthylène, le polycarbonate et le polypropylène.

L'équivalence entre vitesse de traverse V et vitesse de déformation initiale $\dot{\epsilon}$ est donnée par la relation suivante :

$$V(\text{mm/min}) = \dot{\epsilon}(\text{s}^{-1}) \times D(\text{mm}) \times \sqrt{2} \times 60(\text{s/min}) \quad (\text{II} - 22)$$

où D est le diamètre minimal de l'éprouvette « sablier ». Cette relation n'est valable qu'en début d'essai.

7.4.4.2 Résultats

7.4.4.2.1 Etude des courbes expérimentales

La Figure II - 28 rassemble l'ensemble des courbes résultant de cette campagne d'essai respectivement pour le polycarbonate et le polyéthylène. Ces courbes mettent en évidence un comportement à température ambiante très différent d'un polymère à l'autre et semblent notamment confirmer une tendance que nous avons déjà pressentie lors des essais de traction « basses vitesses » : le polyéthylène présente une dépendance vis-à-vis de la vitesse de traction beaucoup plus affirmée que le polycarbonate.

³ Cette vitesse de déformation « équivalente » donnée à titre indicatif n'est valable qu'en début de la déformation.

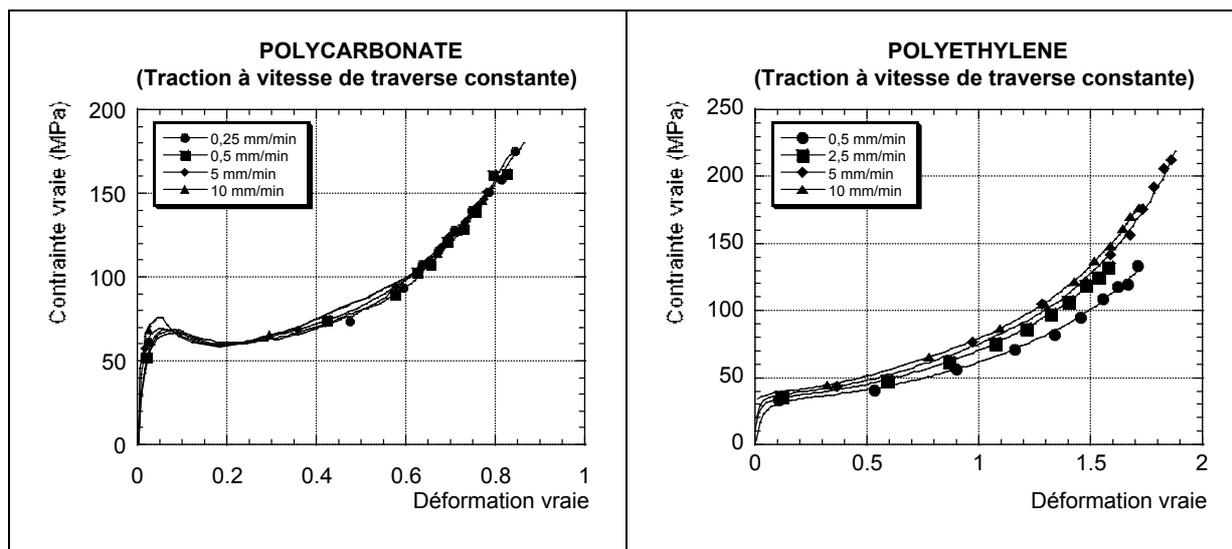


Figure II - 28 : Courbes contrainte vraie vs déformation vraie issues des expériences de vidéotraction à vitesse de traverse constante pour le polycarbonate (23 °C) et pour le polyéthylène (23 °C).

La Figure II - 29 montre quant à elle le comportement du polypropylène.

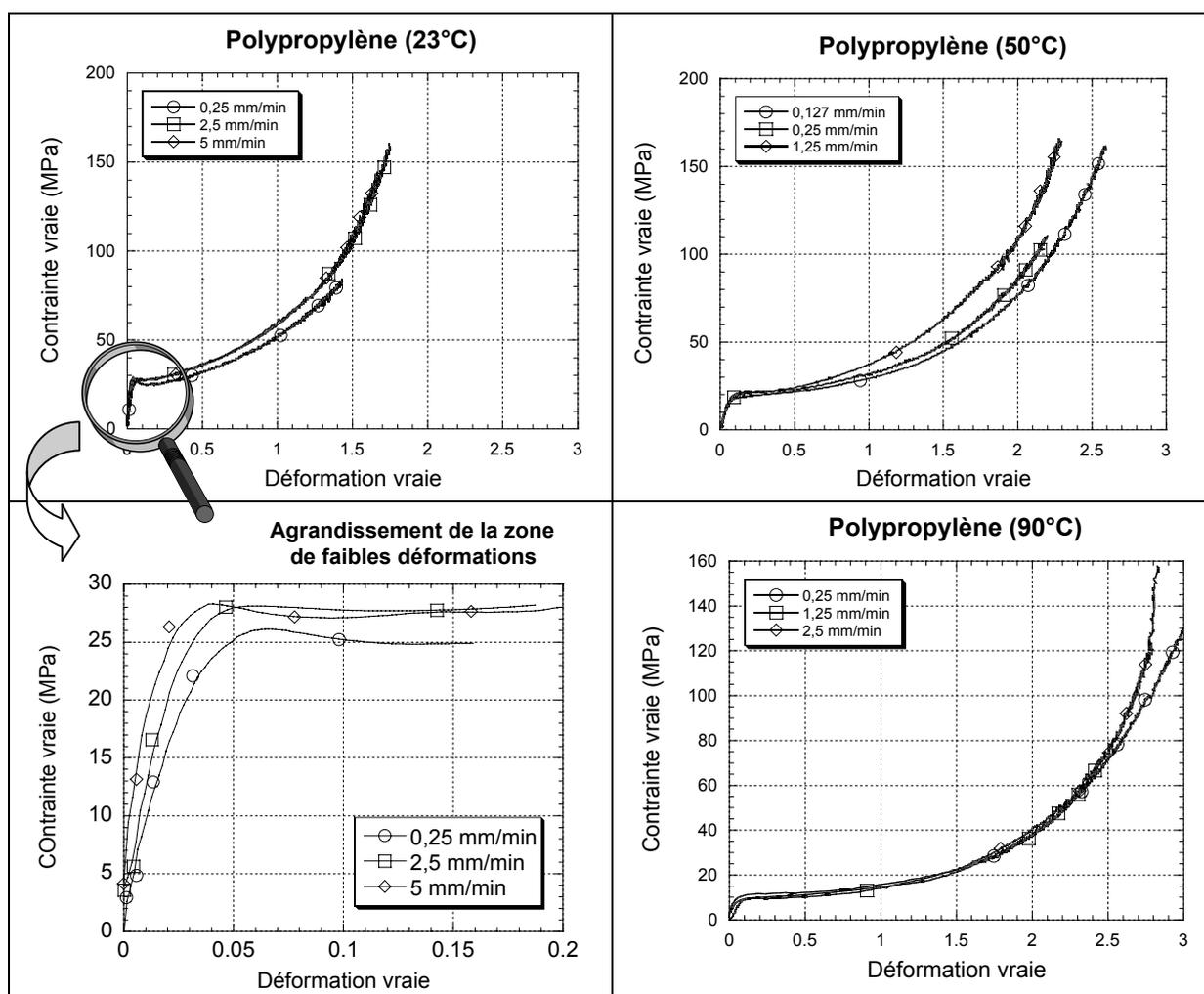


Figure II - 29 : Courbes (contrainte vraie vs déformation) vraie issues des expériences de vidéotraction à vitesse de traverse constante pour le polypropylène et pour 3 températures.

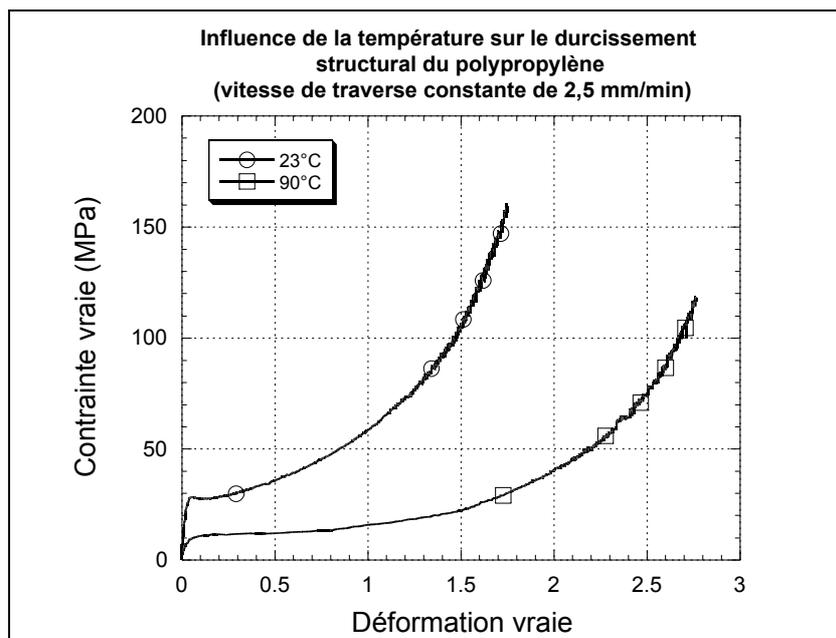


Figure II - 30 : Mise en évidence de la thermodépendance du durcissement structural du polypropylène.

En reportant sur un graphe l'évolution de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie (Figure II - 30), pour une même vitesse de traverse, mais pour des températures différentes, nous avons pu mettre en évidence la thermodépendance du durcissement structural de ce matériau. Ces courbes montrent clairement que **le durcissement structural du polypropylène décroît avec la température**.

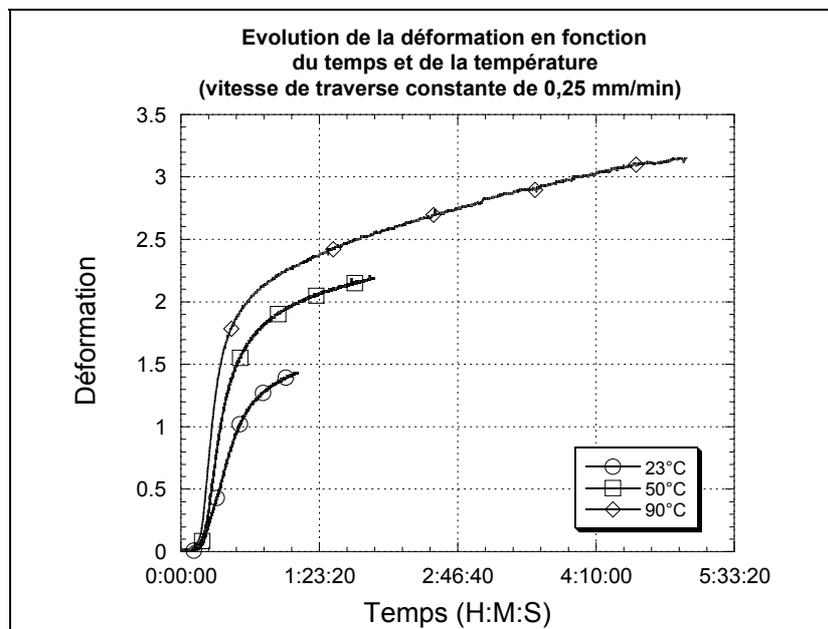


Figure II - 31 : Evolution de la vitesse de déformation généralisée en fonction du temps et de la température (polypropylène).

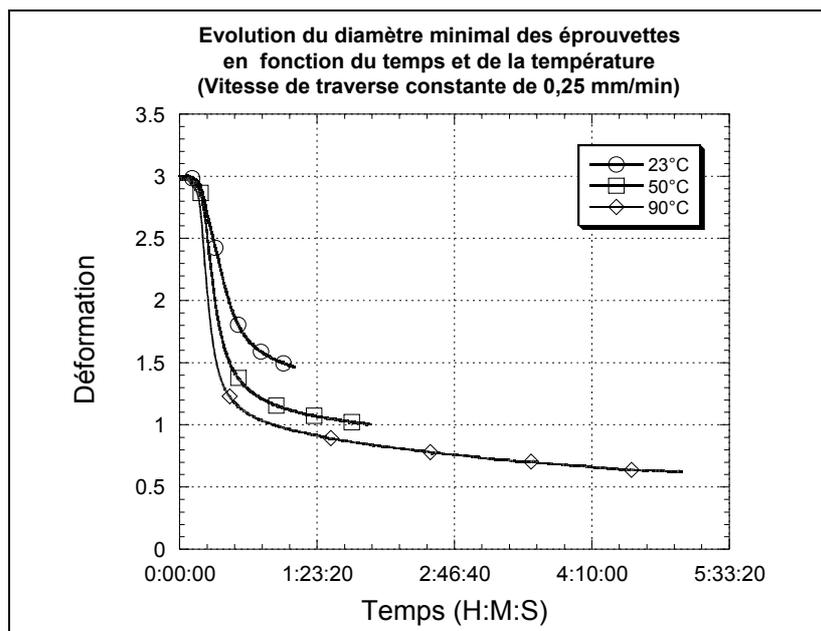


Figure II - 32 : Evolution du diamètre minimal des éprouvettes « sablier » en fonction du temps et de la température (polypropylène).

L'évolution de la déformation en fonction du temps et de la température (Figure II - 31) permet d'affirmer que, pour des vitesses de traverse constantes, la vitesse de déformation augmente avec la température, et ceci, tout particulièrement pendant la phase d'apparition de la striction. De fait (Figure II - 32), **plus la température est importante, plus l'éprouvette va se « creuser » avant de laisser la striction se propager**. La question est dès lors de savoir quel est, parmi les différents paramètres rhéologiques, celui qui peut influencer l'évolution du diamètre de l'éprouvette au cours de la déformation. C'est ce qui a motivé l'« étude de sensibilité » que nous allons décrire maintenant.

7.4.4.2.2 Etude de sensibilité

Le principe de cette étude consiste à simuler de multiples essais de traction à l'aide d'un logiciel de simulation éléments finis en ne faisant varier qu'un seul paramètre de la loi de comportement à la fois. Il est ainsi possible de quantifier la sensibilité d'une observable telle que le diamètre minimal ou la force au cours du temps vis-à-vis de tel ou tel paramètre rhéologique. Le logiciel de simulation que nous avons utilisé dans le cadre de cette étude est FORGE2[®]. Ce code, développé au CEMEF, est un code de simulation numérique par éléments finis. Il s'agit d'un code 2D (déformation plane ou axisymétrique) dont le but initial était de simuler la mise en forme à chaud (version viscoplastique) et à froid (version élasto-viscoplastique) des matériaux. Le calcul est de type incrémental avec une formulation Lagrangienne réactualisée. Son principe de fonctionnement est décrit dans le Chapitre IV de ce document. La version du logiciel utilisée dans le cadre de cette étude de sensibilité est la version viscoplastique.

L'essai de traction simulé consiste à étirer une éprouvette de type « sablier » avec une vitesse de traverse constante que nous avons choisie arbitrairement égale à 5 mm/min. Il est important de noter à ce propos que la sensibilité des observables (force ou diamètre) vis-à-vis du paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation m sera bien entendu différente selon la gamme de vitesse choisie lors de la simulation.

Nous avons également choisi un jeu de coefficients de référence (Tableau II - 13). Celui-ci est inspiré des résultats obtenus lors de l'identification (avec thermodépendance) des paramètres « basses vitesses » du polyéthylène (Tableau II - 11).

Simulation	K_p (MPa.s ^m)	w	h	m	n
n° 1	42,48	32,7	0,59	0,096	2 ← Coefficients de référence
n° 2	44,95	↕	↕	↕	↕
n° 3	39,66	32,7	↕	↕	↕
n° 4	↕	25	0,59	↕	↕
n° 5	↕	40	0,59	↕	↕
n° 6	↕	↕	0,3	0,096	↕
n° 7	↕	↕	0,9	0,096	↕
n° 8	↕	↕	0,59	0,07	2
n° 9	↕	↕	↕	0,12	2
n° 10	↕	↕	↕	↕	1,5
n° 11	39,66	40	0,59	0,12	2,5

Tableau II - 13 : Conditions « opératoires » des simulations multiples.

Les courbes suivantes (Figure II - 33) permettent de visualiser l'influence qu'ont les différents coefficients rhéologiques sur l'évolution du diamètre minimal des éprouvettes au fur et à mesure qu'elles se déforment. On peut ainsi constater que les paramètres K , w et m n'ont quasiment aucune influence sur cette observable. Par contre, les paramètres représentatifs du durcissement structural (h et n) semblent jouer un rôle primordial dans l'évolution du diamètre. L'erreur relative au sens des moindres carrés que la variation d'un paramètre rhéologique est susceptible d'entraîner sur l'évolution du diamètre peut être chiffrée comme (Tableau II - 14) :

$$\Delta D = \frac{1}{\text{nbpoints}} \sum_{i=1}^{\text{nbpoints}} \left[\frac{(D_{\text{simulé}} - D_{\text{référence}})^2}{D_{\text{référence}}^2} \right] \quad (\text{II} - 23)$$

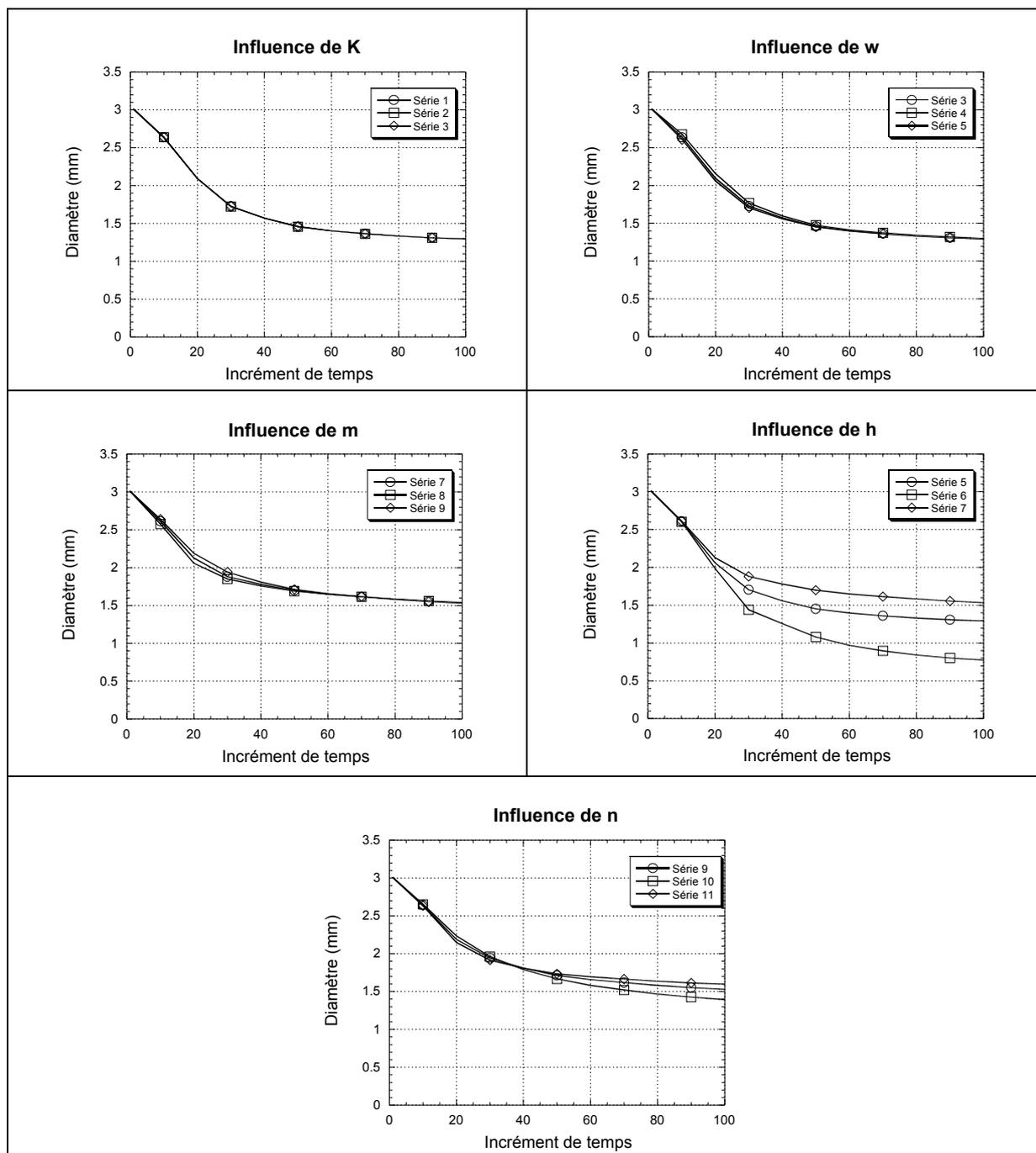


Figure II - 33 : Sensibilité du diamètre minimal des éprouvettes vis-à-vis des paramètres rhéologiques.

	K		w		m		h		n	
ΔP (%)	+ 5,8	- 6,6	+ 22,3	- 23,5	+ 25,0	- 27,1	+ 52,5	- 49,1	+ 25,0	- 25,0
ΔD (%)	$- 4.10^{-5}$	$+ 5.10^{-5}$	$- 7.10^{-3}$	$+ 2.10^{-2}$	$+ 2.10^{-2}$	$- 10^{-2}$	+ 2,14	- 7,1	$\sim 6.10^{-2}$	$\sim 2.10^{-1}$

Tableau II - 14 : Sensibilité du diamètre aux paramètres rhéologiques (ΔP : Variation des paramètres en %).

Les expériences de vidéotraction menées sur le polypropylène nous ont permis de mettre en évidence que lorsque la température augmente, le durcissement structural diminue. La présente

étude vient de prouver qu'une diminution du durcissement structural entraîne une diminution du diamètre de l'éprouvette dans la striction. En conséquence de quoi, il nous est permis de conclure que la diminution du diamètre des éprouvettes alors que la température augmente n'est que le reflet de l'évolution thermique des termes représentatifs du durcissement structural de notre polypropylène.

Il faut noter **qu'à vitesse de traverse constante, cela revient à appliquer une vitesse de déformation locale différente suivant la température de l'essai, puisque le rayon évolue différemment.** Cette étude peut être étendue en prenant en compte la force. Cela conduit, pour des variations de paramètres identiques à celles reportées dans le Tableau II - 13, aux courbes de la Figure II - 34. On peut ainsi constater que :

- la consistance K et le paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation m (pour une vitesse donnée) ne sont que des « facteurs d'échelle », leur modification n'entraînant qu'une simple translation des courbes suivant l'axe des ordonnées ;
- le paramètre w n'a d'influence que sur une zone de déformation de l'ordre de quelques pour-cent ;
- l'influence du paramètre h (de même que celle de n) ne se manifeste qu'après l'apparition de la striction. Ce coefficient joue donc un rôle sur l'évolution de la force aux plus fortes déformations (zone de déformation plastique).

Tout comme pour le diamètre, on peut quantifier l'« erreur relative » occasionnée lors d'un calcul de la force après modification des différents paramètres. Cela est réalisé à l'aide d'une formule très similaire à celle donnée par l'équation (II - 23) :

$$\Delta F = \frac{1}{\text{nbpoints}} \sum_{i=1}^{\text{nbpoints}} \left[\frac{(F_{\text{simulée}} - F_{\text{référence}})^2}{F_{\text{référence}}^2} \right] \quad (\text{II} - 24)$$

On voit ainsi qu'une variation de 6% du paramètre K conduit à une erreur relative de 0,32 % sur la force simulée. Cette faible déviation cache en réalité un fait très intéressant. En effet, en supposant que l'on connaisse les valeurs exactes de tous les autres paramètres rhéologiques, on constate qu'une incertitude expérimentale de 0,32 % sur la force ne permet d'identifier la valeur du paramètre K qu'avec une précision de l'ordre de 6%.

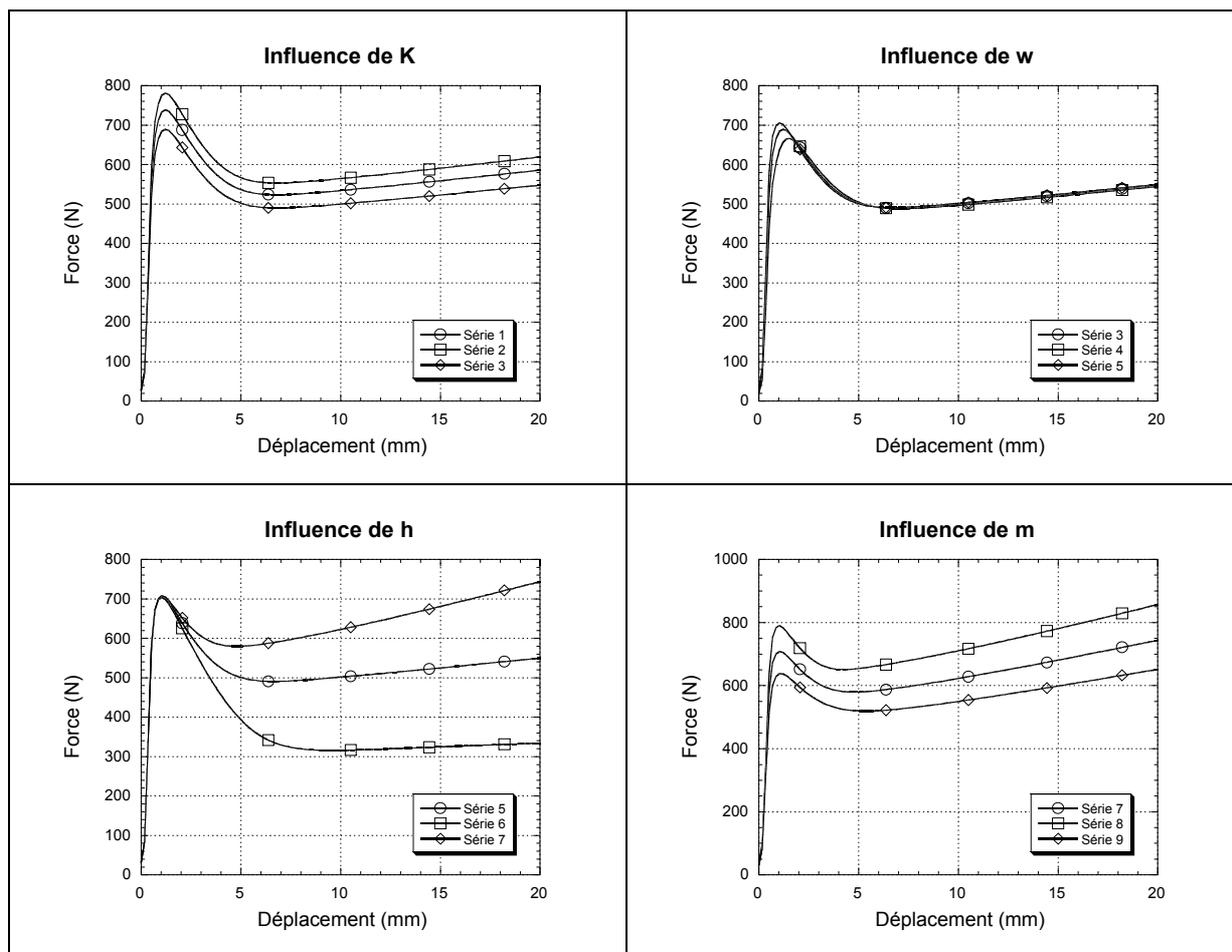


Figure II - 34 : Sensibilité de la force vis-à-vis des paramètres rhéologiques.

Ces essais permettent de mettre en évidence que, si les polymères présentent des similitudes dans leur comportement (même forme générale), ils diffèrent aussi les uns des autres de manière significative (ce qui rend une identification « personnalisée » indispensable), par exemple en termes de dépendance en vitesse ou de thermodépendance. Cette dernière est souvent « simplifiée » jusqu'à ne prendre en compte que la dépendance de la consistance du matériau. On voit ici que la réalité est beaucoup plus compliquée.

Le type de formalisme que nous avons choisi ici arbitrairement ne permet pas de rendre compte de cette complexité. Notre objectif n'est pas ici de proposer une loi de comportement plus pertinente mais de mettre en place une technique d'identification de paramètres. Nous resterons donc dans le cadre simple choisi *a priori*, tout en ayant conscience du fait que nous ne pourrons qu'approcher le comportement de nos polymères. Un effort devra toutefois porté à l'avenir sur l'établissement de lois plus pertinentes.

Du point de vue de l'expérimentateur, l'exemple du polypropylène est, quant à lui, primordial. Du fait de la thermodépendance du durcissement, des essais menés à vitesse de traverse identique

induisent, pour une géométrie d'éprouvette donnée, des vitesses de déformation différentes en fonction de la température. Ainsi, croyant étudier l'effet de la température, on peut induire un effet de vitesse. Cette simple constatation justifie tous les efforts qui ont visé à promouvoir les mesures à vitesses de déformation contrôlées et rappelle à quel point, il est nécessaire de rester vigilant lorsque l'on définit les conditions d'un essai en termes de grandeurs technologiques.

Enfin, les études de sensibilité aux paramètres sont un parfait exemple de ce que peut apporter la simulation numérique. Il ne faut toutefois pas perdre de vue que leur validité est directement liée à celle de la loi de comportement. Il s'agit donc d'un **outil précieux, à utiliser avec précaution**.

7.4.4.2.3 Identification classique

Les essais de traction à moyennes vitesses ne peuvent être simulés à l'aide des paramètres (Tableau II - 11) identifiés lors des essais de traction basses vitesses (Figure II - 35). Les craintes que nous avons formulées quant aux possibilités d'extrapolation du comportement « basses vitesses » à des vitesses supérieures semblent se confirmer. L'erreur globale sur l'estimation de la force est proche de 25% (écart au sens des moindres carrés (II - 24)).

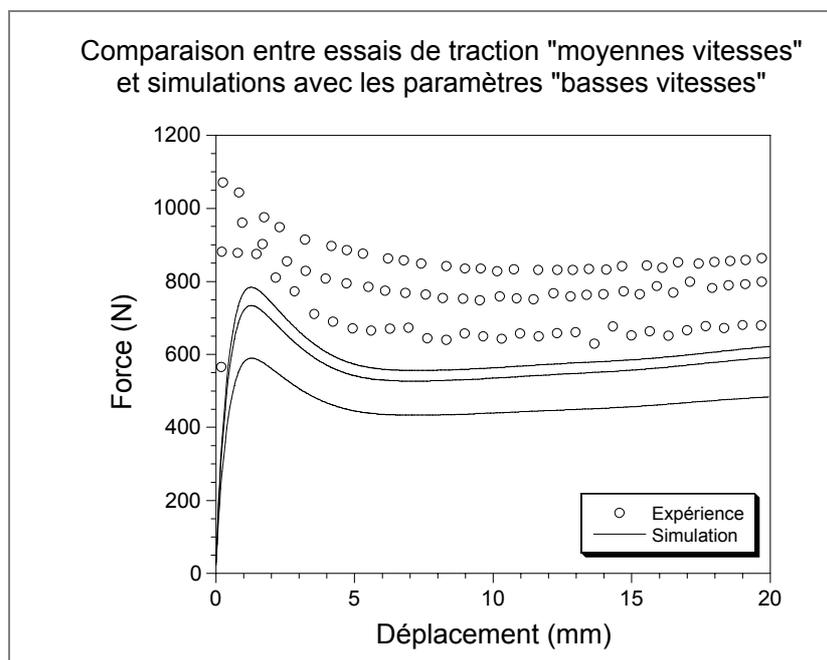


Figure II - 35 : Comparaison entre essais de traction « moyennes vitesses » (0,5, 2,5 et 10 mm/min) et simulations avec les paramètres « basses vitesses » (polyéthylène).

Pour pallier cet inconvénient, les coefficients rhéologiques peuvent être « ré-identifiés » lors des expériences de traction « moyennes vitesses » pour lesquelles la dissipation thermique ne peut plus être considérée comme totalement négligeable. Nous pouvons ici encore avoir recours à la

transformation analytique des données expérimentales (force et géométrie locale) en grandeurs intrinsèques au matériau (contrainte vraie et déformation vraie).

Méthode d'identification	Paramètres						Ecart
	K (MPa)	β (K)	w	h	n	m	
« basses vitesses »	8,8	466	32,7	0,59	2,03	0,096	24,7 %
« moyennes vitesses »	20,8	466	30,7	0,51	2	0,156	13,6 %

Tableau II - 15 : Identification classique par PARAMOPT à partir de courbes obtenues respectivement à basses et moyennes vitesses (0,5 2,5 et 10 mm/min) à 23°C pour le polyéthylène.

Le lissage des courbes ainsi obtenues à l'aide du logiciel PARAMOPT conduit à de nouveaux coefficients que nous avons consignés dans le Tableau II - 15. Comme on peut le constater (Figure II - 36), l'erreur globale sur la force entre les courbes simulées à l'aide des nouveaux coefficients et les courbes expérimentales n'est plus que de 13,6 %.

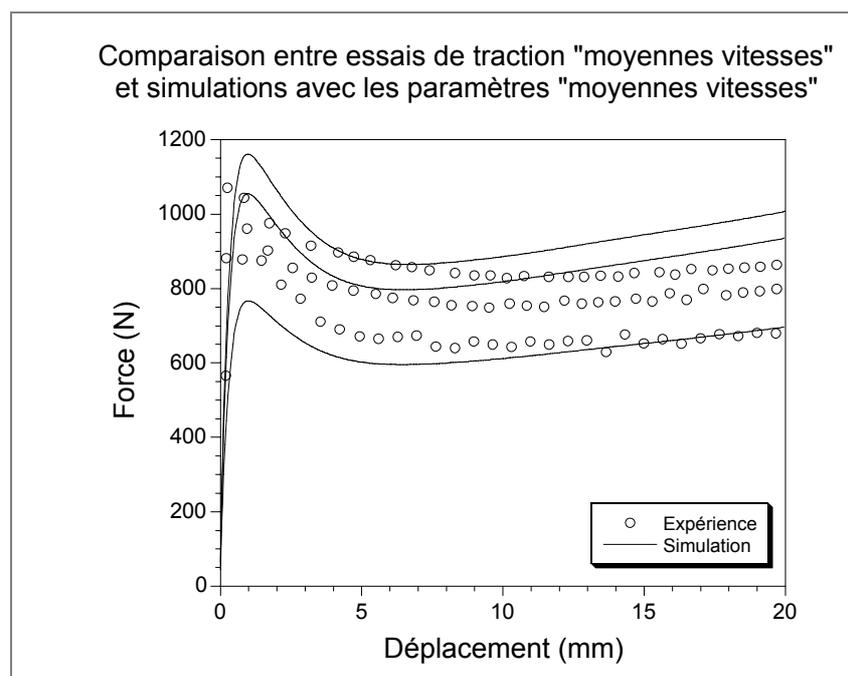


Figure II - 36 : Comparaison entre expériences (traction « moyennes vitesses ») et simulations (paramètres rhéologiques identifiés en traction « moyennes vitesses ») (polyéthylène).

La méthode d'identification que nous venons d'utiliser n'est malheureusement pas optimale. La nécessité de traiter les courbes brutes à l'aide d'une méthode analytique ne permet pas de la considérer comme un outil rigoureux. Elle demeure en effet basée sur des hypothèses très restrictives. Les phénomènes de dissipation thermique par exemple ne sont pas pris en compte lors

de l'identification. Il est par conséquent fort probable que des simulations à des vitesses encore plus importantes nécessitent une nouvelle correction des paramètres.

Nous avons atteint ici la limite des techniques classiques : l'identification basse vitesse ne permet pas de reproduire un essai rapide, ce dernier ne pouvant être correctement exploité du fait des autoéchauffements qu'il induit.

Dans le prochain paragraphe, nous allons maintenant vérifier ce qu'il en est d'une extrapolation des meilleurs résultats obtenus en traction uniaxiale vers des sollicitations multi-axiales plus complexes, mais aussi plus proches des conditions réelles de choc.

7.5 Essais d'impact multiaxial

Au cours des paragraphes qui vont suivre, nous allons discuter de la validité d'une extrapolation de la loi de comportement identifiée en traction « moyennes vitesses », à des conditions plus sévères d'impact multiaxial. En plus des essais d'impact à grandes vitesses, nous avons réalisé grâce à un dispositif de poinçonnement, une série de mesures sur un dispositif géométriquement identique mais à des vitesses plus faibles. Tous ces essais ont été réalisés au Laboratoire Central de Solvay à Bruxelles.

7.5.1 Instrumentation

7.5.1.1 Poids Tombant Instrumenté

Le Poids Tombant Instrumenté est constitué de différentes parties :

- 1) Le poids tombant : Celui-ci est constitué d'un bâti et de barres verticales permettant le mouvement de chute sans frottement du percuteur. La hauteur de chute, h , du système peut être réglée afin d'obtenir une vitesse d'impact adéquate grâce à la relation :

$$v_0 = \sqrt{2gh} \quad (\text{II - 25})$$

où g est l'accélération de la pesanteur.

On peut également faire varier la masse, m , du percuteur. L'énergie est donnée par la relation :

$$E_0 = \frac{1}{2}mv_0^2 = mgh \quad (\text{II - 26})$$

Un système d'encastrement permet éventuellement d'immobiliser l'éprouvette au cours de l'impact. Les percuteurs utilisés sont de dimensions et de formes diverses (conique, hémisphérique, plat ...).

- 2) Le capteur de force : Il peut *a priori* être disposé à divers emplacement : au-dessus, au-dessous ou à l'intérieur de l'éprouvette. Pour des raisons pratiques, il est incorporé le plus souvent dans le percuteur. Ces capteurs sont constitués d'éléments piézo-électriques.
- 3) L'amplification et l'enregistrement : Le capteur est connecté à un amplificateur de charge dont la sensibilité est modulable. Le signal analogique de quelques millivolts est amplifié pour atteindre quelques volts. Il est alors discrétisé et enregistré temporairement à l'aide d'une carte d'acquisition rapide, pour être finalement enregistré sur un ordinateur.
- 4) Traitement des données brutes : Le logiciel d'exploitation recèle plusieurs fonctions dont la principale est la conversion des données brutes électriques en données mécaniques plus utilisables.

7.5.1.2 Poinçonnement

Pour réaliser les essais de poinçonnement, le percuteur employé dans le cadre des essais de Poids Tombant Instrumenté a été adapté au banc de traction INSTRÖN 4505 déjà utilisé au cours des expériences de thermographie infrarouge. A la différence des essais de Poids Tombant Instrumenté, le percuteur est déplacé à vitesse constante.

Les vitesses de sollicitation atteintes sont intermédiaires entre celles que l'on peut atteindre en traction uniaxiale et celles auxquelles conduisent les test de Poids Tombant Instrumenté. Ce test permet de modifier la géométrie de la sollicitation par rapport au test de traction tout en demeurant dans une même gamme de vitesse.

7.5.2 Principe de dépouillement des essais d'impact multiaxial

Le but du dépouillement de l'essai de Poids Tombant Instrumenté est de transformer les données brutes que sont l'évolution de la force en fonction du temps $F(t)$ et la vitesse initiale v_0 en données exploitables :

- vitesse en fonction du temps $v(t)$;

- déplacement en fonction du temps $x(t)$;
- énergie en fonction du temps $E(t)$;
- force en fonction du déplacement $F(x)$;
- vitesse en fonction du déplacement $v(x)$;
- énergie en fonction du déplacement $E(x)$.

L'équation fondamentale de la dynamique s'appliquant au percuteur est :

$$\sum \vec{F}_e = m\vec{\gamma} \quad (\text{II - 27})$$

où \vec{F}_e correspond aux forces extérieures s'exerçant sur le système et où $\vec{\gamma}$ est l'accélération du percuteur. L'ensemble des forces ressenties par le percuteur correspond au signe près aux forces subies par l'éprouvette. C'est pourquoi on ne considère que le point de charge. En projetant les vecteurs sur la ligne de charge, on obtient la relation :

$$\frac{1}{m}(F - P) = \gamma \quad (\text{II - 28})$$

où P est le poids du percuteur ($P=mg$).

Une intégration sur le temps de la relation (II - 28) nous permet d'exprimer l'évolution temporelle de la vitesse du poids tombant :

$$v(t) = v_0 - \frac{1}{m} \int_0^t (F - P) \cdot dt \quad (\text{II - 29})$$

Une seconde intégration permet d'obtenir le déplacement $x(t)$ en fonction du temps :

$$x(t) = \int_0^t \left(v_0 - \frac{1}{m} \int_0^t (F(t') - P) \cdot dt' \right) \cdot dt \quad (\text{II - 30})$$

La variation de l'énergie (cinétique ou potentielle) du percuteur pendant l'impact correspond à l'énergie de déformation fournie à l'éprouvette. On a donc :

$$E(t) = \int_0^{x(t)} F(x) \cdot dx = \int_0^t v(t) \cdot F(t) \cdot dt \quad (\text{II - 31})$$

En introduisant (II - 29) dans (II - 31), l'énergie peut s'exprimer sous la forme :

$$E(t) = \int_0^t F(t) \left(v_0 - \frac{1}{m} \int_0^t (F(t') - P) \cdot dt' \right) \cdot dt \quad (\text{II - 32})$$

La vitesse initiale du percuteur v_0 calculée à l'aide de la relation (II - 25) peut également être mesurée à l'aide d'un dispositif photoélectrique.

7.5.3 Conditions opératoires

Dans le cadre de notre travail, les tests ont été effectués (Figure II - 37) :

- à l'aide d'un percuteur hémisphérique de 20 mm de diamètre ;
- sur des plaques de polypropylène ($50 \times 60 \text{ mm}^2$) de 2 mm et 5 mm d'épaisseur ;
- à température ambiante ;
- avec un encastrement de 40 mm de diamètre.

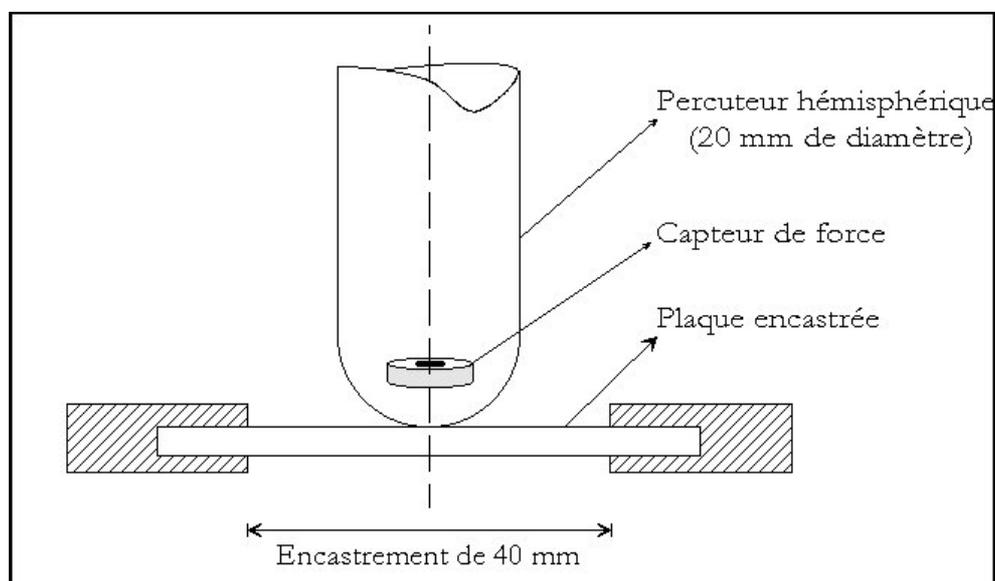


Figure II - 37 : Principe d'un test d'impact multiaxial.

Des simulations numériques viscoplastiques et élastiques [14, 15, 16, 17] et des essais expérimentaux [18] ont permis de mettre en évidence que le contact entre le percuteur et l'échantillon est un paramètre fondamental quant à la localisation de la déformation lors du choc.

Dans le cas d'un contact glissant, les déformations se localisent sous l'impacteur. Dans le cas d'un frottement important (voire un contact collant), elles se localisent préférentiellement dans une zone circulaire autour du percuteur. Nous nous sommes placés pour notre part dans une situation de lubrification (huile de vaseline PROLABO) espérant ainsi annuler le frottement et éliminer un paramètre difficilement mesurable.

Les conditions opératoires retenues pour chacune des deux sollicitations multiaxiales sont regroupées dans les tableaux suivants (Tableau II - 16 et Tableau II - 17)

Vitesse du percuteur (mm/min)	Epaisseur des plaques		Fracture
	2 mm	5 mm	
250	✓	-	Non
	-	✓	Oui
50	✓	-	Non
	-	✓	Oui
5	✓	-	Oui
0,5	✓	-	Oui
	✓	-	Non (arrêt manuel)
	-	✓	Oui
0,05	✓	-	Oui

Tableau II - 16 : Conditions opératoires retenues (✓) ou non (-) pour les essais de poinçonnement sur des plaques de polypropylène.

Hauteur de chute (m)	Vitesse initiale (m/s)	Masse (kg)	Epaisseur des plaques		Fracture
			2 mm	5 mm	
5,10	10,00	15,24	-	✓	Oui
		5,24	✓	-	Oui
1,00	4,43	25,24	-	✓	Oui
		15,24	-	✓	Oui
		10,24	✓	-	Oui
		5,24	✓	-	Oui
		3,24	✓	-	Oui
0,60	3,43	15,24	-	✓	Non
		5,24	✓	-	Oui

Tableau II - 17 : Conditions opératoires retenues (✓) ou non (-) pour les essais de Poids Tombant Instrumenté sur des plaques de polypropylène.

7.5.4 Résultats

Ici, il n'est nullement question de déterminer les contraintes vraies et les déformations vraies. Comme nous l'avons déjà vu, seuls les forces et les déplacements sont accessibles.

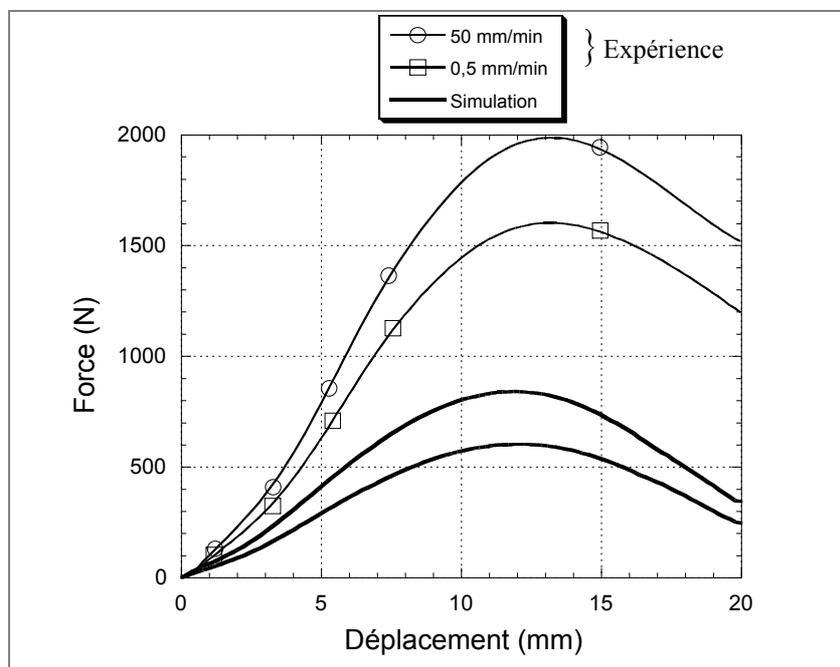


Figure II - 38 : Simulation des essais de poinçonnement sur des plaques de polypropylène de 2 mm d'épaisseur avec les coefficients de traction « basses vitesses ».

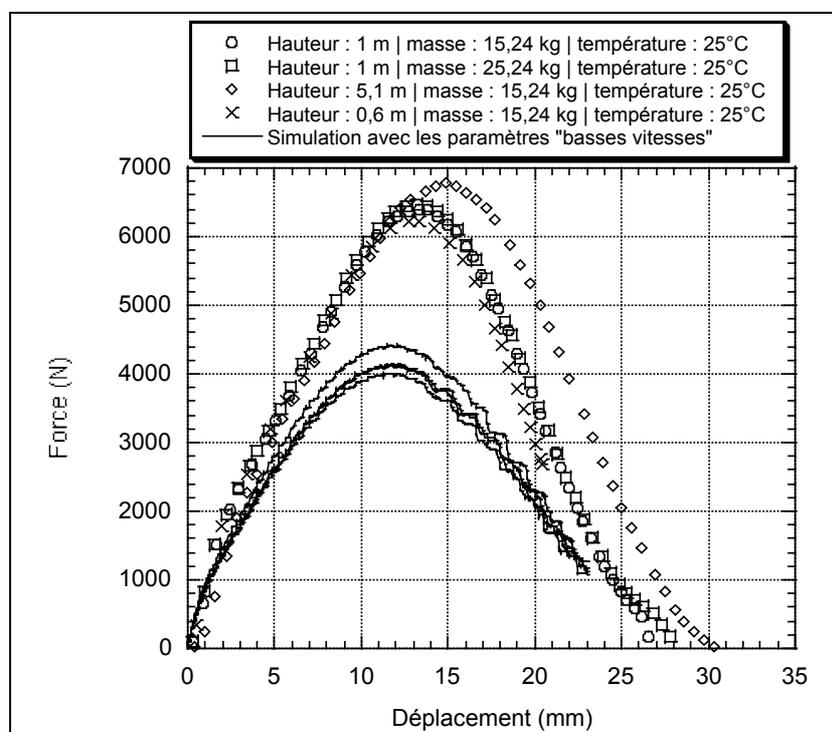


Figure II - 39 : Simulation des essais de Poids Tombant Instrumenté sur des plaques de polypropylène de 5 mm d'épaisseur avec les coefficients de traction « basses vitesses ».

C'est pourquoi, pour tester la validité des coefficients rhéologiques déterminés en traction basses vitesses, nous avons eu recours au logiciel de simulation numérique FORGE2[®]. Les courbes de la Figure II - 38 permettent de comparer les courbes de forces obtenues en simulant deux essais de poinçonnement sur des plaques de polypropylène de 2 mm d'épaisseur, à des courbes expérimentales obtenues dans des conditions identiques à celles simulées. Celles de la Figure II - 39 correspondent à plusieurs essais de Poids Tombant Instrumenté réalisés sur des plaques de polypropylène de 5 mm d'épaisseur.

Dans les deux cas, il apparaît clairement que les courbes simulées à l'aide des coefficients de traction « basses vitesses » du polypropylène sont très éloignées des courbes expérimentales. La conclusion naturelle est que la loi de comportement utilisée ici est insuffisante. De plus, cet essai étant inexploitable de manière classique, il nous est même impossible d'ajuster les coefficients pour approcher le comportement du matériau en Poids Tombant Instrumenté.

8 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous nous sommes intéressés au comportement de trois polymères appartenant à trois familles différentes (un polycarbonate amorphe, un polyéthylène semi-cristallin homopolymère et un polypropylène semi-cristallin copolymère hétérophasé), chacun possédant une particularité dans son comportement (crochet de traction, thermodépendance et dépendance en vitesse). Nous avons pu constater que les essais « simples » de torsion et de traction semblent relativement bien décrits du point de vue de la mécanique par une loi de type G'Sell. Des deux essais, l'essai de traction demeure, semble-t-il, le plus simple à dépouiller. En effet, le développement d'un effort longitudinal au cours de l'essai de torsion ajoute au cisaillement simple, une composante de traction. Cela a pour effet de compliquer le dépouillement classique au demeurant assez lourd (Fields & Backofen). En ce qui concerne la thermodépendance de la loi de comportement, elle ne semble pas donner entière satisfaction. On pourrait affiner la loi de comportement en déterminant la thermodépendance de chacun des paramètres, malheureusement au détriment d'un grand nombre de paramètres à identifier. De plus, on peut s'interroger sur le sens physique d'une telle manipulation.

L'une des conséquences de l'évolution thermique des différents coefficients rhéologiques est de rendre plus difficile encore l'extrapolation du comportement des polymères déterminé à basses vitesses à des vitesses de sollicitation plus importantes. Ces phénomènes d'autoéchauffement de la matière peuvent être mis en évidence à l'aide d'un dispositif de thermographie infrarouge. Cette

dissipation thermique peut atteindre plusieurs degrés pour des vitesses de déformation généralisées très basses (de l'ordre de 10^{-2} s^{-1}).

Les coefficients déterminés en traction uniaxiale (différents de ceux identifiés en torsion) ne permettent pas de simuler des essais multiaxiaux de poinçonnement ou de Poids Tombant Instrumenté, sans que cela puisse toujours être attribué à des effets de vitesse. La grande difficulté de la modélisation de l'impact sur des polymères ductiles peut donc se résumer au fait que les essais simples et lents sont insuffisants, de même que les approches mécaniques les plus simples.

L'avenir est donc dans l'établissement de lois de comportement capables de rendre compte du couplage existant entre l'évolution microstructurale, la sollicitation et le comportement macroscopique. Outre que ces démarches rigoureuses demandent encore un développement théorique conséquent, il est probable qu'elles nécessiteraient l'identification de nouveaux paramètres, vraisemblablement dans des conditions expérimentales difficiles à exploiter et en tout état de cause à grandes vitesses. Un compromis technologique réside dans l'identification du comportement dans un mode de sollicitation proche de celui que l'on veut modéliser. Il est possible en effet d'approcher qualitativement le comportement en impact par des lois et des approches simples. Par ailleurs, on peut espérer obtenir un accord quantitatif en déterminant les coefficients des lois au plus proche de l'utilisation, c'est-à-dire lors de sollicitations rapides et complexes. Dans les deux cas, il est probable que des essais encore inexploitablement soient nécessaires pour progresser. Dès lors, il faudra s'appuyer sur un outil informatique pour pallier les limitations expérimentales.

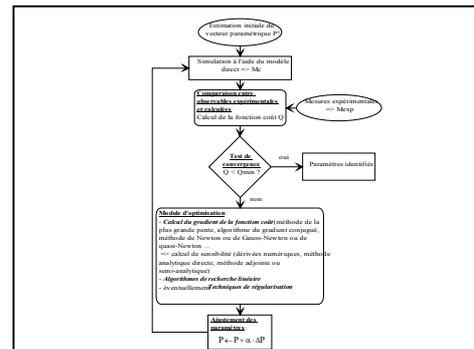
C'est là que l'utilisation de méthodes inverses, concept auquel nous allons consacrer les prochains chapitres, prend tout son intérêt. Cette technique a d'ailleurs été utilisée avec succès en torsion dans un autre contexte [3].

Bibliographie du chapitre 2

- [1] **Y. TILLIER, E. GANDIN, E. MASSONI, N. BILLON**, « Couplage thermomécanique lors d'essais de traction à moyennes vitesses. Etudes expérimentale et numérique », DEPOS XIV, Grasse (F), (1996)
- [2] **F. PAPINI et P. GALLET**, « Thermographie Infrarouge – Image et mesure », Paris : MASSON, (1994)
- [3] **A. GAVRUS**, « Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1996)
- [4] **D. S. FIELDS, W. A. BACKOFEN**, « Determination of Strain Hardening Characteristics by Torsion Testing », *Proceedings ASTM*, **57**, pp. 583 – 591, (1979)

-
- [5] **G. R. CANOVA, S. SHRIVASTAVA, J. J. JONAS, C. G'SELL**, « The Use of Torsion Testing to Assess Materials Formability », *Proceedings ASTM 2000 A. D.*, pp. 189 – 210, (1982)
- [6] **P. DENEUVILLE**, « Déformation plastique et cinétique de cristallisation du polyoxyméthylène, forgeage en matrice fermée à l'état solide », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1985)
- [7] **K. D. PAE, A. SILANO**, « Shear Girdling Phenomenon in Polymers », *Journal of Applied Polymer Science*, **22**, polypropylène. 3021 – 3026, (1978)
- [8] **M.-L. BISILLIAT**, « Comportement mécanique d'un polycarbonate à grande vitesse de déformation – Etude expérimentale et simulation », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1997)
- [9] **C. G'SELL, J.-M. HIVER, A. DAHOUN, A. SOUABI**, « Video-controlled Tensile Testing of Polymers and Metals Beyond the Necking Point », *J. Mater. Sci.*, **27**, pp. 5031 – 5039, (1992)
- [10] **C. G'SELL**, « Instabilités de déformation pendant l'étirage des polymères solides », *Revue de Physique Appliquée*, **23**, pp. 1085 – 1101, (1988)
- [11] **A. HILDENBRAND, N. BILLON**, « Rupture d'un polycarbonate en traction uniaxiale : étude expérimentale », Rapport d'étude de DEA, CEMEF, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1995)
- [12] **C. G'SELL, N. A. ALY-HELAL, J. J. JONAS**, *J. Mater. Sci.*, **18**, p. 1731, (1983)
- [13] **P. W. BRIDGMAN**, *Trans. Am. Soc. Metals*, **32**, p. 553, (1943)
- [14] **R. P. NIMMER**, « An Analytic Study of Tensile and Puncture Test Behavior as a Function of Large-Strain Properties », *Polym. Eng. Sci.*, **27**, n° 4, pp. 263-269, (1987)
- [15] **R. P. NIMMER, L. M. CARAPELLUCCI, A. F. YEE**, « Some Problems Associated with the Puncture Testing of Plastics », *Polym. Eng. Sci.*, **42**, pp. 773-780, (1987)
- [16] **B. CONFLAND**, « Modélisation du comportement sous impact d'une pièce plastique », *J. Phys. IV*, Colloque C3, **1**, p. 787, (1991)
- [17] **N. BILLON, J.-M. HAUDIN**, « Thermomechanical Modelling of Multiaxial Impact Test in Polymers », in J.-L. CHENOT, R. D. WOOD and O. ZIENKIEWICZ (Eds), *Numerical Methods in Industrial Forming Processes*, A. A. Balkema : Rotterdam, (1992)
- [18] **G. MAURER, B. VON BERSTORFF, R. RICHTER, H. BREUER**, *Kunststoffe*, **79**, p. 1317, (1989)

IDENTIFICATIONS PAR METHODES INVERSES



1 Introduction _____ **119**

2 Généralités _____ **121**

3 Identification des paramètres rhéologiques par analyse inverse _____ **122**

3.1 Choix de la fonction objectif _____ **123**

3.2 Généralités sur les algorithmes d'optimisation _____ **125**

3.3 Les méthodes de type gradient _____ **126**

 3.3.1 Méthode de la plus grande pente _____ 127

 3.3.2 Algorithme du gradient conjugué _____ 127

 3.3.3 Algorithmes d'ordre deux : méthode de Newton _____ 128

 3.3.4 Méthodes spécifiques aux formulations de type « moindres carrés » _____ 128

 3.3.4.1 Algorithme de Gauss-Newton _____ 129

 3.3.4.2 Techniques de régularisation (Tikhonov, Levenberg et Levenberg-Marquardt) _____ 131

 3.3.4.3 Algorithmes de quasi-Newton _____ 134

 3.3.4.4 Détermination de la matrice de sensibilité _____ 135

3.4 Traitement des contraintes _____ **141**

3.5 Algorithmes de recherche linéaire _____ **142**

 3.5.1 La méthode de la section d'or _____ 142

 3.5.2 La méthode de l'interpolation parabolique _____ 143

 3.5.3 Critères d'arrêt _____ 143

4 Conclusion _____ **144**

1 Introduction

Ainsi que nous l'avons constaté au cours du chapitre précédent, l'approche classique (prédominante jusqu'à présent) de l'identification des paramètres rhéologiques nécessitent pour traduire les résultats expérimentaux (forces, couples, allongements ...) en données intrinsèques l'utilisation de modèles analytiques rudimentaires. L'estimation des paramètres nécessitent alors une analyse graphique des courbes, ou dans le meilleur des cas, l'utilisation d'une méthode de régression numérique.

Les hypothèses des modèles de dépouillement analytiques sont trop restrictives quant au mode de déformation et au champ de température. Elles limitent l'analyse à des essais lents (pour éviter les phénomènes d'autoéchauffement de la matière) et présentant des taux de déformation homogènes et observables. Pour des sollicitations plus rapides, l'analyse devrait nécessairement prendre en considération les couplages thermomécaniques, c'est-à-dire la compétition résultant entre adoucissement thermique et durcissement structural. Pour des sollicitations complexes, il est impossible de relier grandeurs technologiques et mécaniques (force et tenseur des contraintes) sans ambiguïté. Il est donc apparu nécessaire de développer des modèles d'analyse rhéologique plus complets et rigoureux, rendant l'identification des paramètres rhéologiques plus flexible et, si possible, plus systématique. A ce stade, les efforts peuvent être réalisés à deux niveaux :

- le développement de techniques (ou d'un ensemble de techniques) expérimentales rendant possibles des mesures plus fines et plus locales (déformation, température ...) dans une gamme de sollicitation large ;
- le développement de techniques de dépouillement plus efficaces qui pourraient autoriser l'exploitation d'essais « complexes ».

Si la première solution faciliterait une analyse critique quant à la forme et au cadre théorique des lois de comportement, il nous semble que la seconde reste la plus souple et la plus facile à l'heure actuelle.

L'objectif que nous nous sommes fixés a donc été de développer un logiciel capable de déterminer les coefficients rhéologiques directement à partir de grandeurs technologiques mesurées expérimentalement.

Les récents progrès réalisés dans le domaine des codes de calcul numérique autorisent en effet une modélisation très fine des déformations des matériaux (modèle direct). Avec l'utilisation combinée des méthodes d'optimisation et de modélisation, il devient possible de confier l'identification des paramètres rhéologiques à une procédure automatisée. On fait alors appel à une méthode d'analyse inverse associée au problème direct.

Dans le cas de la modélisation mathématique d'un système physique, un modèle direct consiste à exprimer la réponse du système (M^c) constitué de la loi de comportement, de la géométrie de l'éprouvette et des conditions aux limites. On a coutume de représenter le modèle direct sous la forme de l'expression condensée :

$$M^c = S(x) \quad (\text{III} - 1)$$

où x représente l'ensemble des variables ou paramètres qui définissent le système étudié (éprouvette, matériaux, sollicitation, environnement ...).

L'analyse inverse consiste quant à elle à déterminer les conditions opératoires x qui conduisent à un état expérimental du système donné (M^{ex}). Le modèle inverse se résume donc à :

$$\text{Trouver } x = S^{-1}(M^c) \text{ tel que } M^c = M^{ex} \quad (\text{III} - 2)$$

Toutefois, la plupart des applications directes actuelles sont décrites par des modèles très complexes et une simple inversion du modèle peut s'avérer impossible. Les pratiques rencontrées dans la littérature font alors largement appel à des méthodes de régression. Les auteurs cherchent dans ce cas à déterminer les variables x pour lesquelles les valeurs prédites par le calcul M^c sont les plus proches possible des valeurs mesurées expérimentalement M^{ex} [1, 2]. Ce principe est d'ailleurs utilisé depuis fort longtemps. **Halley** est l'un des tous premiers à l'avoir appliqué en 1704. Son but était de calculer l'orbite d'une comète à partir d'observations réalisées au cours des siècles précédents. C'est ainsi qu'il pu prédire son passage en 1758. Ce n'est qu'à partir des années 1960 qu'ont débuté des études systématiques concernant la formulation et la résolution générale des problèmes inverses. Ces études ont touché des domaines aussi différents que l'électronique [3], la thermique [4, 5, 6], le calcul de structure [7], l'optimisation de forme [8, 9] et, bien entendu, l'identification de paramètres rhéologiques [10, 11]. L'approche générale des méthodes inverses appliquées à l'identification de paramètres physiques est en fait très proche d'un domaine à l'autre. Son principe peut être résumé sur l'illustration de la Figure III - 1.

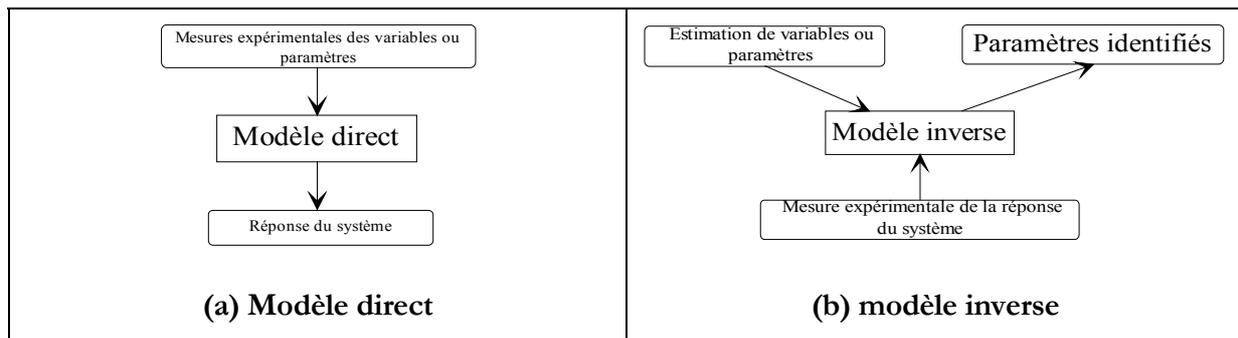


Figure III - 1 : Comparaison des modèles direct et inverse

2 Généralités

La modélisation consiste à représenter un système physique S par un ensemble d'équations mathématiques, f , une loi de comportement par exemple, contenant des paramètres décrivant entièrement ce système. Ces paramètres peuvent ne pas être tous accessibles par une mesure directe. On peut définir, par ailleurs, des variables observables et mesurables M (la force par exemple) et dont les valeurs dépendent des valeurs des paramètres P du modèle f . Typiquement, on a

$$M = f(\text{rhéologie, sollicitation} \dots) \quad (\text{III} - 3)$$

La résolution du problème direct revient à calculer les valeurs des observables M^c en fonction des valeurs des paramètres P du modèle. Celle du modèle inverse consiste, quant à elle, à identifier les valeurs des paramètres P du modèle à partir des valeurs mesurées des observables M^{ex} .

Ainsi que nous l'avons souligné au cours du chapitre II, dans le cas de la modélisation du comportement d'un matériau par exemple, les observables M peuvent être les efforts et les déplacements. Les paramètres P du modèle f (la loi de comportement) sont, dans notre cas, les paramètres tels que la sensibilité à la déformation, la sensibilité à la vitesse de déformation, ou encore le durcissement structural ...

Les problèmes inverses peuvent être répartis en deux catégories :

1. Les problèmes « bien posés » sont ceux qui, pour toute mesure M , admettent une solution unique P continue par rapport à M ; ils sont généralement résolus (de manière exacte ou approchée) par des méthodes mathématiques classiques.
2. Les problèmes « mal posés », c'est-à-dire pour lesquels l'existence, l'unicité et la continuité de la solution par rapport aux mesures ne sont pas toutes vérifiées. D'un point de vue physique, cela

signifie qu'une mesure M , compte tenu de la plage d'incertitude qui l'accompagne, peut correspondre à un grand nombre de valeurs P , ces dernières pouvant être fort éloignées les unes des autres.

De toute évidence, notre problème appartient à la seconde catégorie. En pratique, on peut répartir les méthodes d'investigation des problèmes inverses en plusieurs catégories, la majorité d'entre elles ayant comme préoccupation commune de fournir un cadre permettant d'incorporer, outre le modèle physique à inverser, des informations *a priori* ou des critères de choix sur les paramètres. Ceux-ci proviennent de considérations extra-mathématiques et influent fortement sur le résultat de l'inversion.

3 Identification des paramètres rhéologiques par analyse inverse

Dans la suite de ce document, nous adopterons les notations suivantes :

- E : espace modèle (espace des paramètres du modèle) ;
- D : espace données (espace des mesures expérimentales) ;
- f : modèle mathématique (loi de comportement par exemple) ;
- r : nombre total de paramètres à identifier du modèle ;
- Q : fonction coût (également appelée fonction objectif, ou fonction écart) ;
- $P = \{P_j\}$ avec $j=1,2 \dots r$: vecteur des paramètres à identifier du modèle ;
- M^{ex} (ou M^c) = $\{M_i\}$ avec $i=1,2 \dots s$: vecteur des mesures expérimentales (ou calculées),
- s : nombre total de mesures expérimentales (chaque essai rhéologique étant caractérisé par une courbe expérimentale, s est le produit du nombre d'essais effectués par le nombre de points expérimentaux acquis par courbe).

Le principe de base des méthodes d'identification de paramètres consiste à déterminer l'ensemble des paramètres $P=(p_1, p_2 \dots p_r)$ qui minimise la différence entre les valeurs calculées des observables $M^c = (M_1^c, M_2^c \dots M_s^c)$ et leurs valeurs expérimentales $M^{\text{ex}} = (M_1^{\text{ex}}, M_2^{\text{ex}} \dots M_s^{\text{ex}})$. Cette différence est mesurée par une fonction objectif $Q(P, M^c, M^{\text{ex}})$.

3.1 Choix de la fonction objectif

L'identification par analyse inverse revient donc, en quelque sorte, à chercher les valeurs des paramètres P pour lesquels les grandeurs calculées à l'aide du modèle direct M^c définissent les valeurs moyennes des points expérimentaux M^{ex} . Ceci se traduit sous la forme mathématique suivante :

$$M_i^{ex} = M_i^c + \lambda_i \text{ avec } i = 1, 2 \dots, s \quad (\text{III - 4})$$

où λ_i correspond aux écarts entre le calcul et la mesure. Ces écarts correspondent aux erreurs d'arrondis lors du calcul, aux imprécisions sur les paramètres ainsi qu'aux imprécisions expérimentales, les erreurs liées au formalisme de modèle rhéologique lui-même étant négligées. Dans notre cas, cela suppose implicitement que la loi de comportement est juste. Minimiser l'écart entre le calcul et l'expérience revient donc à minimiser ces écarts λ_i . Pour cela, on utilise souvent une expression de type « moindres carrés » qui conduit à la formulation suivante de la fonction coût Q :

$$Q(M^c(P), M^{ex}) = \sum_{i=1}^s \lambda_i^2 = \sum_{i=1}^s [M_i^{ex} - M_i^c]^2 \quad (\text{III - 5})$$

C'est cette formulation qu'ont utilisée **Trendafilova et al** [12] pour identifier les coefficients de diverses lois de comportement viscoélastiques, dans le cadre d'essais élongationnels d'un tube cylindrique mince et homogène.

En fait, l'équation précédente est souvent présentée sous sa forme adimensionnée à l'aide d'un terme de pondération uniforme :

$$Q(M^c(P), M^{ex}) = \frac{\sum_{i=1}^s [M_i^{ex} - M_i^c]^2}{\sum_{i=1}^s [M_i^{ex}]^2} \quad (\text{III - 6})$$

Il est également possible d'exprimer la fonction coût Q en fonction des écarts relatifs λ'_i tels que $\lambda_i = \lambda'_i \times M_i^{ex}$ et on obtient :

$$Q(M^c(P), M^{ex}) = \sum_{i=1}^s \lambda_i'^2 = \sum_{i=1}^s \frac{[M_i^{ex} - M_i^c]^2}{[M_i^{ex}]^2} \quad (\text{III - 7})$$

Dans tous les cas, on peut exprimer la fonction coût sous la forme plus générale :

$$Q = \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^{\text{ex}} - M_i^c]^2 \quad (\text{III - 8})$$

Les termes β_i sont appelés les coefficients de pondération.

On vérifiera lors du choix d'une fonction coût que cette dernière respecte les conditions suivantes :

1. Q doit être définie semi-positive : $Q \geq 0$ (cela suppose que $\beta_i > 0$) ;
2. $Q=0$ si et seulement si $M^c = M^{\text{ex}}$.

Si l'optimisation est réalisée en se basant sur la comparaison de plusieurs critères (force et géométrie par exemple dans le cas d'un essai de traction), il est indispensable d'introduire une fonction coût « multi-critères ». L'expression (III-8) s'écrit alors sous la forme générique suivante :

$$Q = \sum_{k=1}^{\text{nobs}} \sum_{i=1}^s \beta_i^k [M_i^{k\text{ex}} - M_i^{kc}]^2 \quad (\text{III - 9})$$

où nobs correspond au nombre de grandeurs observables employées (nobs = 2 dans l'exemple précédent). $M_i^{k\text{ex}}$ serait, quant à elle, la $i^{\text{ème}}$ valeur expérimentale de la $k^{\text{ème}}$ grandeur observable. Cela permet de mesurer simultanément, en cours d'optimisation, l'influence qu'ont les différents paramètres à optimiser sur les différentes valeurs expérimentales.

D'autres formulations inspirées d'une approche statistique ont été proposées dans la littérature [3, 13]. Le problème d'optimisation est réduit ici à déterminer les paramètres qui maximisent la probabilité de prédiction par le calcul des grandeurs mesurées expérimentalement. Pour des distributions Gaussiennes, la fonction coût s'exprime en fonction des valeurs moyennes des observables mesurées $\tilde{m}(M_i^{k\text{ex}})$ — ces valeurs moyennes étant supposées égales aux valeurs calculées M_i^{kc} — et des déviations quadratiques dues aux erreurs de mesures : σ_i^{k2} . De même, on peut prendre en compte l'estimation initiale de certains paramètres — de façon à limiter la recherche dans le voisinage des valeurs initiales —, *via* des valeurs moyennes \tilde{P}_j et leur déviation standard correspondante σ_{pj}^2 . Finalement, le problème est réduit à la minimisation de la fonction objectif suivante :

$$Q = \sum_{k=1}^{\text{nobs}} \sum_{i=1}^s \lambda_i^k [\tilde{m}_i - M_i^{k,c}]^2 + \sum_{j=1}^r \gamma_j [P_j - \tilde{P}_j]^2 \quad (\text{III} - 10)$$

où $\lambda_i^k = 1/\sigma_i^{k,2}$ pour chaque $k = 1, \dots, \text{nobs}$ et $\gamma_j = 1/\sigma_{pj}^2$.

3.2 Généralités sur les algorithmes d'optimisation

Plusieurs méthodes de résolution peuvent être utilisées pour résoudre ce problème de minimisation [14, 15, 16] :

1. **Les méthodes d'évaluations successives de la fonction objectif** : les différents jeux de paramètres sont choisis selon des critères de recherche linéaire, génétique ou statistique. Cela peut se faire par :

- *Exploration systématique de l'espace modèle E* : cette méthode n'est applicable que si la dimension de l'espace E est petite car elle consiste à définir une grille suffisamment dense sur cet espace, puis à calculer $Q(P)$ en chaque point pour tenter d'approcher le minimum de $Q(P)$.
- *Estimations successives* : cette méthode qui présente la même limitation que la précédente consiste à donner une estimation initiale aux paramètres du modèle puis à les corriger en se basant sur des considérations physiques et sur l'intuition jusqu'à l'obtention d'une fonction $Q(P)$ suffisamment faible.
- *Relaxation* : à partir d'un point P_0 , on détermine le point suivant P_1 en fixant l'une de ses composantes (un paramètre) et en évaluant les autres de telles sortes que $Q(P)$ soit minimum. Toutes les composantes de P sont choisies successivement jusqu'à ce que les mises-à-jour soient sans effet sur $Q(P)$. La convergence de cette méthode est généralement très lente.
- *Les méthodes Monte-Carlo* : Utiles pour des problèmes « non-linéaires », ces méthodes regroupent toute méthode utilisant un générateur aléatoire de nombres. On commence par fixer un seuil Q_{seuil} . Tout vecteur paramétrique P pour lequel $Q(P)$ est inférieur à ce seuil est dit « modèle acceptable ». Des points aléatoires sont générés sur l'espace E jusqu'à ce qu'un nombre suffisant de modèles acceptables soit obtenu pour être représentatif d'un domaine acceptable de l'espace modèle.

2. **Les méthodes de type gradient** : ici, ces méthodes nécessitent le calcul de paramètres de descente (direction et amplitude) à partir desquels sont réalisées des approximations successives des paramètres. Cette méthode impose, comme son nom l'indique, d'évaluer simultanément la fonction coût et son gradient.

Les critères de choix d'une méthode parmi celles proposées ci-dessus sont généralement :

1. la méthode de calcul utilisée dans le modèle direct ;
2. le degré de complexité lié à la résolution ;
3. les caractéristiques de la fonction coût : convexité, existence de plusieurs minima locaux, présence de paliers ...

Pour des modèles non-linéaires, il est généralement conseillé d'utiliser des méthodes de type gradient. C'est ce que nous avons choisi de mettre en œuvre dans notre logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur.

3.3 Les méthodes de type gradient

Les méthodes de type gradient sont des méthodes itératives dont chaque itération, l , peut être décomposée de manière générale en deux étapes :

- une étape pendant laquelle l'algorithme recherche une direction de « descente » ΔP_l dans l'espace des paramètres d'optimisation, c'est-à-dire le sens de variation de P qui assure la décroissance de Q ;
- une autre au cours de laquelle l'algorithme calcule la longueur du « pas » α_l à effectuer, afin de minimiser la fonction coût Q dans la direction ΔP_l .

Les valeurs des paramètres pour l'itération suivante sont ensuite calculées avec la formule :

$$P_{l+1} = P_l + \alpha_l \Delta P_l \quad (\text{III} - 11)$$

Dans la suite de ce chapitre, nous commencerons par présenter quelques méthodes de calcul de la direction de descente ΔP , les méthodes de calcul du pas α (dénommé parfois « paramètre de recherche linéaire ») étant explicitées dans un second temps.

3.3.1 Méthode de la plus grande pente [17]

Il s'agit de l'algorithme le plus simple de type gradient. La direction qui provoque la plus grande décroissance de la fonction coût dans un petit voisinage de P est opposée au gradient de la fonction :

$$\Delta P = -\frac{\nabla Q}{\|\nabla Q\|} \quad (\text{III - 12})$$

où ∇Q est le gradient de Q par rapport au vecteur paramétrique P.

Cette méthode présente la particularité de n'utiliser aucune information sur la courbure de la fonction Q. En conséquence, sa convergence peut être très lente si la matrice des dérivées d'ordre deux de Q est mal conditionnée. Ainsi, dans le cas d'isovaleurs de la fonction coût elliptiques et « allongées », la progression ne pourra se faire qu'à l'aide de pas très petits et la convergence s'en trouvera ralentie.

3.3.2 Algorithme du gradient conjugué

Une alternative pour éviter cela est d'utiliser la matrice H (ou Hessien) des dérivées d'ordre deux de la fonction coût par rapport aux paramètres d'optimisation, de façon à générer une série de directions conjuguées, et à minimiser Q suivant ces directions.

L'algorithme du gradient conjugué est initialisé par une itération de type gradient simple. Ensuite, les directions de descente sont calculées à l'aide de la formule suivante :

$$\Delta P_i = -\nabla Q_i + \frac{\|\nabla Q_i\|}{\|\nabla Q_{i-1}\|} \Delta P_{i-1} \quad (\text{III - 13})$$

∇Q_i et ∇Q_{i-1} étant respectivement le gradient de la fonction coût à l'itération en cours i et à l'itération précédente (i-1). Pour des fonctions quadratiques, ces directions sont « H-conjuguées », c'est-à-dire que l'on a :

$$(\Delta P_k)^T H \Delta P_k = 0, \forall k \neq 1 \quad (\text{III - 14})$$

Dans ce cas, l'algorithme converge en un nombre d'itérations inférieur ou égal au nombre de paramètres. Cette propriété n'est plus vérifiée pour des fonctions non quadratiques. De plus, cet

algorithme présente l'inconvénient de cumuler les erreurs d'arrondi. Il s'avère donc nécessaire de « redémarrer » l'algorithme en cas de stagnation, ou encore de le preconditionner.

3.3.3 Algorithmes d'ordre deux : méthode de Newton

Le principe de cette méthode réside dans la résolution itérative de l'équation :

$$\nabla Q = 0 \quad (\text{III} - 15)$$

cette condition étant remplie au minimum de Q . A Chaque itération, on résout l'équation linéarisée :

$$H\Delta P = -\nabla Q \quad (\text{III} - 16)$$

soit

$$\Delta P = -H^{-1}\nabla Q \quad (\text{III} - 17)$$

où H correspond au Hessien de la fonction coût Q .

Cet algorithme permet d'accéder directement à la valeur de P à l'incrément suivant et ne nécessite *a priori* aucune recherche linéaire supplémentaire. S'il converge en une seule itération dans le cas d'une fonction coût quadratique, il présente, dans le cas de fonctions quelconques, une vitesse de convergence quadratique au voisinage de la solution, contrairement à l'algorithme du gradient simple qui, lui, présente une vitesse de convergence linéaire.

Si l'inconvénient majeur de la méthode réside dans le calcul du Hessien de la fonction coût, il est parfois possible sous certaines conditions d'alléger le calcul en négligeant les termes d'ordre deux ; c'est notamment le cas si la fonction coût est exprimée sous la forme de moindres carrés.

D'autres méthodes s'avèrent optimales lorsque la fonction coût s'exprime justement sous la forme d'une somme de carrés de fonction. C'est le cas par exemple pour la formulation générale de la fonction objectif donnée par l'expression (III – 8). Nous allons maintenant les détailler.

3.3.4 Méthodes spécifiques aux formulations de type « moindres carrés »

Dans ce cas précis, différentes méthodes ont été proposées pour résoudre le problème de minimisation :

- La méthode de **Gauss-Newton**, basée sur celle de Newton, introduit une linéarisation sur l'expression non-linéaire des termes représentant les observables calculées M_i^c en éliminant ses dérivées secondes ;
- Lorsque le problème est mal posé, il est courant d'utiliser des méthodes de régularisation qui permettent de limiter la zone de recherche des paramètres. La méthode de **Levenberg-Marquardt** en est un exemple ;
- La méthode de **quasi-Newton** est employée lorsque les fonctions M_i^c ne sont pas linéarisables, les deux méthodes précédentes ne pouvant alors s'appliquer.

3.3.4.1 Algorithme de Gauss-Newton

Tout comme la méthode de Newton, celle-ci est basée sur le développement en série de Taylor d'ordre 1 du gradient de la fonction coût. Cela permet de l'exprimer sous la forme récursive suivante :

$$\frac{dQ}{dP}(P + \Delta P) = \frac{dQ}{dP}(P) + \frac{d^2Q}{dP^2}(P) \cdot \Delta P + \theta(\Delta P^2) \quad (\text{III - 18})$$

Une approximation pertinente de la variation ΔP qu'il est nécessaire d'appliquer au vecteur paramétrique P pour que la fonction coût présente un *extremum* peut être obtenue si on impose que

$$\frac{dQ}{dP}(P + \Delta P) = 0 \quad (\text{III - 19})$$

et si on néglige les termes de degré supérieur à l'unité. On obtient alors un système linéaire qu'il est aisé de résoudre :

$$\begin{cases} A \cdot \Delta P + B = 0 \\ A = \frac{d^2Q}{dP^2}(P) \\ B = \frac{dQ}{dP}(P) \end{cases} \quad (\text{III - 20})$$

Si l'on reporte dans l'expression (III – 20), la fonction coût telle qu'elle est exprimée dans l'équation (III – 8), les composantes des matrices B et A s'expriment respectivement sous la forme :

$$B_k = \frac{dQ}{dP_k}(P) = 2 \sum_{i=1}^s \beta_i (M_i^c - M_i^{ex}) S_{ik} \quad (\text{III - 21})$$

et

$$A_{jk} = \frac{d^2Q}{dP_j dP_k}(P) = 2 \sum_{i=1}^s \beta_i (M_i^c - M_i^{ex}) \frac{d^2 M_i^c}{dP_j dP_k} + 2 \sum_{i=1}^s \beta_i \frac{dM_i^c}{dP_j} S_{ik} \quad (\text{III - 22})$$

avec

$$S_{ik} = \frac{dM_i^c}{dP_k} \quad (\text{III - 23})$$

où S_{ik} est appelée « matrice de sensibilité ».

La particularité de la méthode de **Gauss-Newton** consiste à négliger les dérivées d'ordre 2 des observables calculées par le modèle direct. L'équation (III – 22) devient alors :

$$A_{jk} = \frac{d^2Q}{dP_j dP_k}(P) \cong 2 \sum_{i=1}^s \beta_i \frac{dM_i^c}{dP_j} S_{ik} \quad (\text{III - 24})$$

La résolution du système linéaire (III – 20) repose alors entièrement sur la détermination des différentes composantes de la matrice S, c'est-à-dire sur le calcul des dérivées des observables par rapport à chacun des paramètres à identifier.

Les directions de descentes ΔP sont alors obtenues par inversion du système linéaire :

$$\Delta P = [S^T W S]^{-1} [S^T W] \Delta M \quad (\text{III - 25})$$

où W est une matrice **diagonale** dont les composantes sont définies par $W_{ii} = \beta_i = 1/[M_i^{ex}]^2$, où ΔM est le vecteur déviation exprimé par $\Delta M_i = M_i^c - M_i^{ex}$ ($i = 1, \dots, s$) et S^T la transposée de S.

L'approximation réalisée avec cette méthode est, bien entendu, d'autant plus précise que l'on est proche de la solution et que la fonction coût tend vers une valeur nulle. De part la forme de fonction coût, cette méthode est largement utilisée en identification de paramètres [18].

Cependant, la matrice A définie dans l'équation (III – 20) possède parfois des valeurs propres nulles. On dit alors qu'elle est « mal conditionnée ». Ce phénomène est souvent lié à la nature de la loi de comportement et plus précisément au nombre des paramètres utilisés pour décrire le comportement du matériau. Dans une telle situation, une brève étude de la sensibilité des observables vis-à-vis des paramètres à identifier peut suffire à régler le problème : il s'agit pour cela de vérifier que chacun des paramètres à identifier a une influence sur l'évolution des observables sélectionnées. Si tel n'est pas le cas, l'expérimentateur devra trouver d'autres grandeurs observables qui soient sensibles à ces paramètres.

Une autre solution consiste à recourir à des techniques dites « de régularisation » dont le principe est de limiter la zone de recherche des paramètres autour d'une valeur de référence (qui peut être, au choix, l'estimation initiale ou celle retenue à l'itération d'identification précédente). La solution consistera à déterminer le jeu de paramètres qui approche au mieux cette valeur.

3.3.4.2 Techniques de régularisation (Tikhonov, Levenberg et Levenberg-Marquardt)[4]

Les méthodes de régularisation les plus utilisées avec un algorithme de type Gauss-Newton sont celles de **Tikhonov**, **Levenberg** et **Levenberg-Marquardt**. Elles consistent toutes à introduire le terme de régularisation Q_r (différent d'une méthode à l'autre) par :

$$Q^* = (1 - \lambda_{reg.})Q + \lambda_{reg.} Q_r \text{ avec } \lambda_{reg.} \in [0,1] \quad \text{(III - 26)}$$

où $\lambda_{reg.}$ représente le paramètre de régularisation. Chacune de ces méthodes diffère des autres par la manière dont est déterminé le paramètre de régularisation $\lambda_{reg.}$.

a) La méthode de **Tikhonov**

La méthode de **Tikhonov** [19] utilise la forme générale de la fonction coût établie par la formulation statistique (III – 10) avec $\gamma_j=1$ et $\tilde{P}_j = P_j^0$. La fonction coût régularisée s'écrit sous la forme :

$$Q^* = (1 - \lambda_{\text{Tik.}}) \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^{\text{ex}} - M_i^c]^2 + \lambda_{\text{Tik.}} \sum_{j=1}^r [P_j - P_j^0]^2 \quad (\text{III - 27})$$

Dans ce cas, le gradient et les dérivées secondes sont données par :

$$\begin{cases} \frac{dQ^*}{dP_k}(\mathbf{P}) = 2(1 - \lambda_{\text{Tik.}}) \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^c - M_i^{\text{ex}}] \frac{dM_i^c}{dP_k} + 2 \cdot \lambda_{\text{Tik.}} [P_k - P_k^0] \\ \frac{d^2Q^*}{dP_j dP_k}(\mathbf{P}) \approx 2(1 - \lambda_{\text{Tik.}}) \sum_{i=1}^s \beta_i \frac{dM_i^c}{dP_j} \frac{dM_i^c}{dP_k} + 2 \cdot \lambda_{\text{Tik.}} \delta_{jk} \end{cases} \quad (\text{III - 28})$$

où δ_{jk} est le symbole de Kronecker. Si on note $\delta' = \frac{\lambda_{\text{Tik.}}}{1 - \lambda_{\text{Tik.}}}$, la variation paramétrique donnée par

(III – 25) dans le cas d'un algorithme de Gauss-Newton, s'obtient désormais après régularisation à l'aide de l'expression :

$$\Delta \mathbf{P} = [\mathbf{S}^T \mathbf{W} \mathbf{S} + \delta' \mathbf{I}]^{-1} \{ \mathbf{S}^T \mathbf{W} \Delta \mathbf{M} + \delta' \mathbf{I} [\mathbf{P} - \mathbf{P}^0] \} \quad (\text{III - 29})$$

I étant la matrice unicité.

Cette méthode de régularisation est particulièrement adaptée aux cas où la fonction coût Q présente des oscillations, mais la convergence est très lente et est très dépendante du choix du paramètre de régularisation $\lambda_{\text{Tik.}}$ (la valeur est choisie de façon à réaliser un compromis entre vitesse de convergence et stabilité de l'algorithme). C'est pourquoi d'autres techniques de régularisation ont été proposées.

b) La méthode de **Levenberg**

Le principe de la méthode consiste à déterminer le terme de régularisation en P de l'expression (III – 27) de manière itérative [20]. On cherche ainsi, à chaque itération l de l'algorithme de Gauss-Newton, à déterminer les valeurs P^l dans le voisinage des valeurs P^{l-1} obtenues à l'itération précédente, la direction de descente étant fixée de façon à réaliser un compromis entre la direction classique de Gauss-Newton ($\lambda_{\text{Lev.}}=0$) et la direction du gradient ($\lambda_{\text{Lev.}}=1$).

La fonction coût régularisée s'écrit sous la forme :

$$Q^{*l} = (1 - \lambda_{\text{Lev.}}) \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^{\text{ex}} - M_i^{c1}]^2 + \lambda_{\text{Lev.}} \sum_{j=1}^r [P_j - P_j^{l-1}]^2 \quad (\text{III - 30})$$

Dans ce cas, le gradient et les dérivées secondes sont données par :

$$\begin{cases} \frac{dQ^{*l}}{dP_k}(P^{l-1}) = 2(1 - \lambda_{Lev.}) \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^{c^l} - M_i^{ex}] \frac{dM_i^{c^l}}{dP_k} \\ \frac{d^2Q^{*l}}{dP_j dP_k}(P) \approx 2(1 - \lambda_{Lev.}) \sum_{i=1}^s \beta_i \frac{dM_i^{c^l}}{dP_j} \frac{dM_i^{c^l}}{dP_k} + 2 \cdot \lambda_{Lev.} \delta_{jk} \end{cases} \quad (III - 31)$$

La variation paramétrique s'obtient alors à l'aide de l'expression :

$$\Delta P^l = [S^{1T} W S^l + \delta'^l I]^{-1} [S^{1T} W] \Delta M^l \quad (III - 32)$$

I étant la matrice unicité. Cette méthode permet de converger plus rapidement que la méthode de Tikhonov mais la détermination d'un paramètre $\lambda_{Lev.}$ optimal demeure délicate. La technique de régularisation suivante permet de contourner cette difficulté.

c) La méthode Levenberg-Marquardt

Marquardt a proposé de modifier la valeur de λ à chaque itération l , de telle sorte qu'à l'approche du minimum de la fonction coût, le facteur de régularisation s'annule. L'idée est d'utiliser une direction de descente proche de celle du gradient pour des valeurs éloignées du minimum et une direction de type **Gauss-Newton** au voisinage du minimum. La fonction coût « régularisée » proposée s'écrit alors à l'itération m sous la forme :

$$Q^{*l} = (1 - \lambda_{L.M.}^l) \sum_{i=1}^s \beta_i [M_i^{ex} - M_i^{c^l}]^2 + \lambda_{L.M.}^l \sum_{j=1}^r \gamma_j^l [P_j^l - P_j^{l-1}]^2 \quad (III - 33)$$

ce qui revient à chercher, à chaque itération l , les nouvelles valeurs des r paramètres P^l dans le voisinage des valeurs obtenues au pas précédent P^{l-1} .

Les algorithmes classiques de type **Marquardt** utilisent des techniques empiriques pour définir le paramètre de régularisation à chaque itération de minimisation (par exemple la multiplication ou la division par 10) [10]. **Levenberg** a proposé quant à lui de déterminer ce même paramètre à l'aide de l'expression suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{L.M.}^1 = \frac{\delta^1}{1 + \delta^1} \\ \delta^1 = \frac{[\nabla Q][\gamma][\nabla Q]^T}{\sqrt{Q^1}} \end{array} \right. \quad (\text{III - 34})$$

et l'on choisit la matrice diagonale $[\gamma]$ de telle sorte que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_{i,j}^1 = 0 \text{ si } i \neq j \\ \gamma_{i,i}^1 = \sum_{i=1}^s \beta_i \left[\frac{dM_i^{c1}}{dP_i} \right]^2 \end{array} \right. \quad \text{pour } i, j = 1, \dots, s \quad (\text{III - 35})$$

En résumé, là où la méthode de **Tikhonov** nécessite un compromis entre la vitesse de convergence de l'algorithme et sa stabilité, et où celle de **Levenberg** pose le problème du choix du paramètre de régularisation, celle de **Levenberg-Marquardt** propose de faire évoluer la valeur de $\lambda_{L.M.}$ au fur et à mesure que l'on s'approche de la solution.

A. Gavrus [21] a montré que la régularisation devient quasiment nulle au voisinage du minimum de la fonction coût. Pour éviter des valeurs de régularisation trop importantes au début de la minimisation et pour accélérer la convergence vers le minimum, l'auteur a exprimé le coefficient λ_G^1 sous la forme :

$$\lambda_G^1 = \min(\lambda_G, \prod_{i=1}^{l-1} \lambda_G^i) \quad (\text{III - 36})$$

où λ_G est une valeur de référence de l'ordre de 10^{-3} ou 10^{-5} . Des tests établis pour la loi de comportement de Norton-Hoff attestent de la fiabilité de ce choix.

3.3.4.3 Algorithmes de quasi-Newton

Dans le but d'éviter le calcul du Hessien H de la fonction coût, les algorithmes de cette catégorie sont basés sur des approximations \tilde{H} de cette matrice, tout en respectant les conditions suivantes :

- La matrice \tilde{H} doit rester symétrique et définie positive ;
- Au cours des itérations, \tilde{H} doit s'approcher de plus en plus de la matrice H .

L'algorithme BFGS* est considéré comme l'un des plus performants de sa catégorie [22, 23]. Il utilise la formulation suivante :

$$\tilde{H}_{i+1} = \left[\begin{array}{c} \mathbf{I} - \frac{\mathbf{z}_i \mathbf{y}_i^T}{\mathbf{z}_i^T \mathbf{y}_i} \end{array} \right] \tilde{H}_i \left[\begin{array}{c} \mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_i \mathbf{z}_i^T}{\mathbf{y}_i^T \mathbf{z}_i} \end{array} \right] + \frac{\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^T}{\mathbf{z}_i^T \mathbf{y}_i} \quad (\text{III - 37})$$

où

$$\begin{cases} \mathbf{y}_i = \nabla Q_{i+1} - \nabla Q_i \\ \mathbf{z}_i = \mathbf{P}_{i+1} - \mathbf{P}_i \end{cases} \quad (\text{III - 38})$$

La vitesse de convergence de cet algorithme est comparable à celle de la méthode de Newton mais présente l'avantage par rapport à cette dernière de ne pas nécessiter le calcul des dérivées secondes.

Elle ne nécessite pas non plus de recherche linéaire exacte. Cette caractéristique rend cet algorithme intéressant pour des problèmes où le prix du calcul des dérivées de la fonction coût est négligeable par rapport à celui du calcul de la fonction coût elle-même.

3.3.4.4 Détermination de la matrice de sensibilité

Nous avons vu au cours des paragraphes précédents que les différents algorithmes d'optimisation reposent sur le point déterminant qu'est le calcul de la matrice de sensibilité S. Elle permet en effet de déterminer à la fois le gradient B et la matrice A du système linéaire à résoudre. Il est donc nécessaire de déterminer les dérivées des grandeurs M^c par rapport à tous les paramètres que l'on désire identifier.

L'étude bibliographique qu'ont réalisé **Tortorelli et al** sur le sujet [24] montre que l'analyse de sensibilité paramétrique peut être réalisée :

- par différences finies ;
- à l'aide d'un calcul analytique direct ;
- par la formulation d'un problème adjoint ;
- à l'aide d'une évaluation semi-analytique.

* Cet algorithme doit son nom aux initiales des chercheurs qui l'ont établi : Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno.

Chacune de ces méthodes est caractérisée par la précision avec laquelle est déterminée la matrice de sensibilité, le temps nécessaire au calcul et son degré de complexité.

a) La méthode des différences finies

Cette méthode consiste à déterminer à l'aide du modèle direct de simulation du test rhéologique, les valeurs $M^c(P)$ et $M^c(P+\delta P)$, où δP représente une petite perturbation du vecteur paramétrique. La définition d'une dérivée au sens de Gâteaux permet d'écrire :

- Pour une dérivée à droite ($\delta P > 0$) ou à gauche ($\delta P < 0$) :

$$S_{ik} = \frac{dM_i^c}{dP_k} \cong \frac{M_i^c(P + \delta P) - M_i^c(P)}{\delta P_k} \quad (\text{III - 39})$$

- Pour une dérivée centrée :

$$S_{ik} = \frac{dM_i^c}{dP_k} \cong \frac{M_i^c(P + \delta P) - M_i^c(P - \delta P)}{2\delta P_k} \quad (\text{III - 40})$$

où $i=1, \dots, s$ et $k=1, \dots, r$ et où $\delta P = (0, \dots, 0, \delta P_k, 0, \dots, 0)$, δP_k correspondant à la k-ième composante. Dans la pratique, les paramètres sont adimensionnalisés avant d'être perturbés de façon à ce que l'influence de la perturbation soit identique pour chacun d'entre eux. Cela peut se faire suivant la règle suivante :

$$\begin{cases} P' = \frac{P}{P^0} & \text{si } P^0 \neq 0 \\ P' = 1 - P^0 & \text{si } P^0 = 0 \end{cases} \quad (\text{III - 41})$$

P^0 étant la valeur initiale du vecteur paramétrique. Si P^0 n'est pas nul, l'équation (III - 39) devient alors :

$$S_{ik} = \frac{dM_i^c}{dP_k} \cong \frac{M_i^c(P^0 + [\delta P']) - M_i^c(P^0)}{P^0 \delta P'} \quad (\text{III - 42})$$

Théoriquement, le calcul des dérivées à l'aide des expressions précédentes est d'autant plus précis que $\delta P'$ est petit. En réalité, cette valeur est limitée par l'erreur commise lors du calcul de la

fonction coût elle-même, les erreurs liées aux arrondis étant d'autant plus importantes que l'expression de la fonction coût est complexe.

Ceci conduit souvent à choisir des valeurs de perturbation relativement importantes au détriment de la précision des dérivées [25]. **Beck et al** [4] ont proposé de choisir pour $\delta P'$ une valeur égale à 10^{-5} alors que d'autres auteurs autorisent un intervalle de variation plus large défini de telle sorte que $10^{-5}|P_k| \leq \delta P_k \leq 10^{-2}|P_k|$.

Par ailleurs, si r correspond au nombre de paramètres à identifier, on s'aperçoit que chaque détermination complète de la matrice de sensibilité S nécessite la réalisation de $(r+1)$ simulations si les dérivées sont à droite ou à gauche, et de $(2r+1)$ si elles sont centrées. Par conséquent, pour peu que le modèle direct soit complexe, les temps de calcul peuvent très rapidement devenir exorbitants, voire rédhibitoires. **Becker et al** [26] ont utilisé des différences finies dans le cadre de l'optimisation d'une opération de forgeage. Il s'agissait de trouver la forme de la préforme nécessaire à cette opération dans le but d'assurer une valeur minimale de la déformation dans toute la pièce finale. Un algorithme de type quasi-Newton (voir ch. II - § 2.2.3.4.3) a été utilisé et les dérivées ont été calculées selon la méthode décrite dans ce paragraphe. La solution optimale a été trouvée au prix de 255 simulations. **Schnur et al** [10] ont également fait usage de cette méthode pour identifier les paramètres élastiques d'un matériau.

Le gros avantage des « dérivées numériques » reste leur grande simplicité d'utilisation liée à leur caractère modulaire. Elles permettent en effet de dériver un grand nombre de modèles directs et nécessitent très peu de modifications lors de l'implémentation d'une nouvelle loi de comportement au cœur du modèle direct. Elles donnent de très bon résultats pour la minimisation de fonctions analytiques simples [14]. Par contre, de part la précision et le temps de calcul qui lui sont inhérents, la méthode des différences finies semble difficilement applicable à l'optimisation de systèmes très lourds.

b) La méthode analytique directe

Dans ce cas de figure, le calcul des termes de sensibilité est intimement lié à la méthode de résolution du problème direct. Afin d'expliquer son principe, supposons tout d'abord que les équations fondamentales (équation d'équilibres mécanique et thermique, lois de comportement) qui régissent la résolution du modèle direct peuvent se résumer à la formulation résiduelle suivante :

$$F(u(P), P) = 0 \quad \text{(III - 43)}$$

où F est le résidu (par exemple le résidu qui intervient dans la résolution par éléments finis du problème direct) et où $u(P)$ est un vecteur qui contient l'ensemble des variables internes qui dépendent du vecteur paramétrique P . Il peut s'agir de la vitesse si la résolution par éléments finis du modèle direct est une résolution en vitesse, mais aussi de la pression, des contraintes, de la température,

Supposons maintenant que les observables calculées (forces, diamètre minimal, ...) peuvent s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$M^c(P) = f(u(P), P) \quad (III - 44)$$

La Figure III - 2 représente schématiquement le principe général de résolution d'un tel modèle direct.

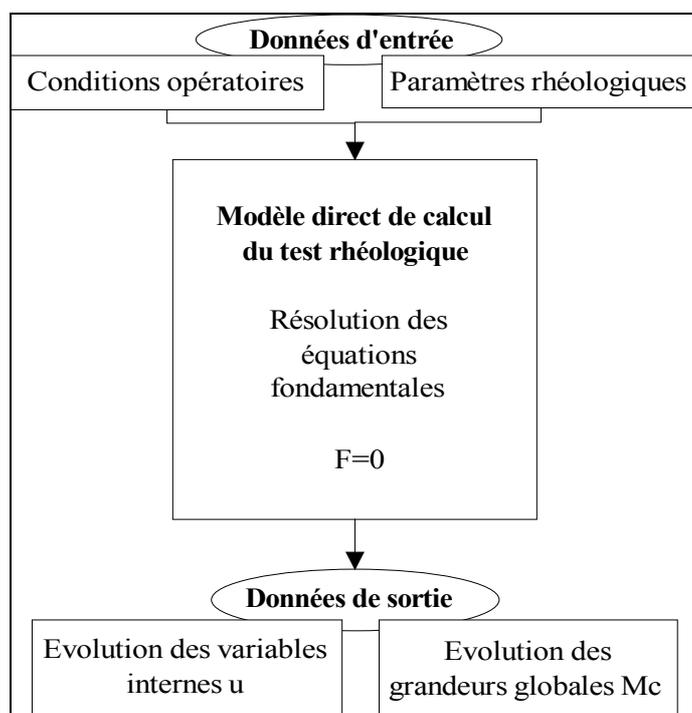


Figure III - 2 : Représentation schématique du modèle direct dans le cas d'un test rhéologique

La matrice de sensibilité peut s'obtenir par différentiation directe de l'équation (III - 44) par rapport à chaque paramètre à identifier. On obtient alors :

$$\frac{DM^c}{DP_k} = \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{Du}{DP_k} + \frac{\partial f}{\partial P_k} \quad (III - 45)$$

Dans l'expression précédente, les dérivées $\partial f/\partial u$ et $\partial f/\partial P_k$ sont des quantités explicites alors que la dérivée Du/DP_k est une quantité implicite puisque u est défini implicitement par l'équation (III - 44).

La caractéristique principale de la présente méthode réside justement dans le fait que la dérivée implicite Du/DP est évaluée en différentiant directement le résidu dans l'équation (III - 43), ce qui conduit à :

$$\frac{\partial F}{\partial u} \cdot \frac{Du}{DP_k} + \frac{\partial F}{\partial P_k} = 0 \quad \text{(III - 46)}$$

Après un réarrangement de cette équation, on parvient à déterminer la dérivée cherchée par :

$$\frac{Du}{DP_k} = - \left[\frac{\partial F}{\partial u} \right]^{-1} \frac{\partial F}{\partial P_k} \quad \text{(III - 47)}$$

Notons que, si F correspond au résidu qui intervient dans la résolution éléments finis de l'équilibre mécanique et si u correspond à la vitesse, alors le terme $\partial F/\partial u$ n'est autre que la matrice de raideur qui intervient dans le schéma itératif de Newton-Raphson utilisé dans la résolution éléments finis du modèle direct. On constate alors que le surcroît principal de calcul lié à l'identification résulte de la détermination de $\partial F/\partial P_k$ pour chacun des paramètres à identifier. Une fois Du/DP déterminé, la matrice de sensibilité est calculée à l'aide de l'équation (III - 45).

Cette méthode, particulièrement intéressante (du point de vue de l'effort supplémentaire qu'il est nécessaire de fournir en plus du modèle direct) lorsque le nombre d'observables dépasse la taille du vecteur paramétrique ($n_{obs} \geq r$), a été largement utilisée en optimisation structurale pendant ces deux dernières décennies. **Kusiak et al** [27] l'ont notamment appliquée en mise en forme, associée au procédé d'extrusion d'un matériau newtonien. **Michino et al** [28] l'ont appliquée quant à eux pour déterminer les paramètres d'un matériau soumis à de grandes déformations. **Gélin et al** [29] ont, de leur côté, dérivé analytiquement des forces afin d'identifier les paramètres de lois viscoplastiques pour des matériaux sollicités en bipoinçonnement. Enfin, **A. Gavrus** [18, 21] et **E. Massoni** [30] ont appliqué le principe de dérivation analytique à l'identification des paramètres rhéologiques de métaux sollicités en torsion, traction ou traction-torsion.

c) La méthode adjointe

Il existe des cas où le nombre de paramètres à identifier est supérieur à celui des grandeurs mesurées expérimentalement ($n_{obs} < r$). Le système de sensibilité (III – 46) peut atteindre une taille très importante. Pour diminuer l'effort de calcul qui en résulte, certains auteurs ont proposé d'utiliser la formulation du problème adjoint qui consiste à supprimer la dérivée implicite Du/DP de l'équation (III – 46). Pour cela, on utilise généralement la méthode du multiplicateur de Lagrange : les équations (III – 43) et (III – 44) sont combinées pour définir une nouvelle fonctionnelle *augmentée* :

$$\hat{M}^c = f(u(P), P) - \lambda_L(P) \cdot \underbrace{F(u(P), P)}_{=0} \quad (III - 48)$$

où λ_L est le multiplicateur de Lagrange. Notons que $\hat{M}^c = M^c$ puisque $F=0$ (équation III – 43). La différentiation de l'équation (III – 48) par rapport aux paramètres à identifier P_k conduit à :

$$\frac{D\hat{M}^c}{DP_k} = \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \frac{Du}{DP_k} + \frac{\partial f}{\partial P_k} - \lambda_L \cdot \underbrace{\left(\frac{\partial F}{\partial u} \cdot \frac{Du}{DP_k} + \frac{\partial F}{\partial P_k} \right)}_{=0} \quad (III - 49)$$

soit, en réarrangeant les différents termes :

$$\frac{D\hat{M}^c}{DP_k} = \left(\frac{\partial f}{\partial P_k} - \lambda \frac{\partial F}{\partial P_k} \right) + \frac{Du}{DP_k} \left[\left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)^T - \left(\frac{\partial F}{\partial u} \right)^T \lambda \right] \quad (III - 50)$$

Le terme de dérivée implicite Du/DP peut alors être éliminé de l'expression précédente si l'on prend soin de définir le multiplicateur de Lagrange de telle sorte que le terme entre crochet s'annule. Cela nécessite de trouver la solution du problème adjoint suivant :

$$\lambda_L = \left[\frac{\partial F}{\partial u} \right]^{-T} \left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)^T \quad (III - 51)$$

Une fois ce calcul accompli, la matrice de sensibilité est construite à l'aide de la relation :

$$\frac{DM_c}{DP_k} = \frac{DM_c}{DP_k} = \frac{\partial f}{\partial P_k} - \lambda_L \cdot \frac{\partial F}{\partial P_k} \quad (III - 52)$$

Par conséquent, la méthode adjointe nécessite de trouver la solution d'un problème adjoint pour chaque observable M^e . Ceci explique qu'elle n'est utilisée que lorsque le nombre de paramètres à identifier est supérieur au nombre d'observables mesurées.

Cette méthode a été utilisée avec succès par **Chen et al** [31] dans le cadre de l'optimisation de procédés de mise en forme stationnaires (extrusion et laminage).

d) La méthode semi-analytique ou mixte

Certains auteurs [18] proposent d'utiliser une méthode mixte qui consiste à calculer les termes les plus complexes par différences finies et les autres à l'aide de la méthode directe. On peut alors imaginer d'innombrables variantes.

3.4 Traitement des contraintes

Les paramètres à identifier sont souvent assujettis à des contraintes d'égalité ou d'inégalité. En mise en forme, le volume non-rempli après une opération de forgeage, volume qui doit être nul, est un exemple de contrainte d'égalité utilisée par **Fourment et al** [32]. Ces contraintes mathématiques peuvent être traitées de plusieurs manières. Face au nombre important de problèmes contraints et de solutions proposées dans la littérature pour traiter ces problèmes, seul sera évoqué ici le cas de contraintes bornées (pour son intérêt évident en identification de paramètres rhéologiques). Le principe général de ces méthodes consiste à ramener un problème sous contraintes à une succession de problèmes sans contraintes, de façon à pouvoir utiliser l'ensemble des algorithmes d'optimisation évoqués précédemment. Pour avoir une vision plus exhaustive, le lecteur pourra se référer à quelques ouvrages [14, 17].

Dans le cadre de l'identification des paramètres rhéologiques, chaque paramètre est généralement contraint d'évoluer à l'intérieur d'un intervalle de variation prédéfini, de façon à conserver un sens physique ou tout simplement pour restreindre les recherches sur un domaine donné. La stratégie la plus naturelle consiste à *projeter* les contraintes c_i sur les hyperplans définis par les valeurs limites ($c_{i,min}$ et $c_{i,max}$). On définit ainsi l'opérateur de projection Pr par :

$$Pr(c_i) = \begin{cases} c_i & \text{si } c_{i,min} \leq c_i \leq c_{i,max} \\ c_{i,min} & \text{si } c_i < c_{i,min} \\ c_{i,max} & \text{si } c_i > c_{i,max} \end{cases} \quad \text{(III - 53)}$$

Dans certains cas, c_i peut avoir des valeurs constantes partout. Son gradient est nul et rend toute identification impossible. **A. Gavrus** [21] a alors défini une procédure telle que la valeur de c_i soit constante en un ensemble discret de points. Ceci l'a amené à déterminer c_i sous la forme :

$$\begin{cases} \hat{c}_i = -\frac{\pi}{2} + \frac{c_i - c_{i,\min}}{c_{i,\max} - c_{i,\min}} \pi \\ c_i = \frac{c_{i,\max} - c_{i,\min}}{2} + \frac{c_{i,\max} - c_{i,\min}}{\pi} \arcsin[\sin(\hat{c}_i)] \end{cases} \quad (\text{III - 54})$$

Cette formulation lui a permis de maintenir en permanence les valeurs de c_i entre $c_{i,\min}$ et $c_{i,\max}$.

3.5 Algorithmes de recherche linéaire

Après avoir déterminé une direction de descente ΔP d'un algorithme de type gradient, il est courant de calculer la longueur du pas α à effectuer dans cette direction (équation III – 11) de façon à accélérer la convergence. Généralement, ce problème consiste à encadrer le minimum à l'aide de trois paramètres $\alpha_g, \alpha_m, \alpha_d$ qui doivent impérativement respecter les règles suivantes :

$$0 \leq \alpha_g \leq \alpha_m \leq \alpha_d \quad (\text{III - 55})$$

et

$$Q(P + \alpha_g \Delta P) > Q(P + \alpha_m \Delta P) < Q(P + \alpha_d \Delta P) \quad (\text{III - 56})$$

La seconde étape consiste à réduire l'intervalle d'encadrement. Deux méthodes au choix sont généralement utilisées pour parvenir à ce résultat : la méthode de la section d'or et la méthode d'interpolation polynomiale.

3.5.1 La méthode de la section d'or

Cette méthode est à l'optimisation ce que la dichotomie est à la résolution d'une équation. A chaque itération, le minimum est encadré à l'aide des trois points déterminés précédemment ($\alpha_g, \alpha_m, \alpha_d$). Un nouveau point est généré à partir de ceux-ci à l'aide de l'expression suivante [33] :

$$\alpha_n = \begin{cases} \alpha_g + 0,38197(\alpha_d - \alpha_g) & \text{si } \alpha_m - \alpha_g > \alpha_d - \alpha_m \\ \alpha_d - 0,38197(\alpha_d - \alpha_g) & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{III - 57})$$

Sur les quatre points disponibles, on retient les trois qui encadrent le minimum et on recommence. Cette méthode présente une vitesse de convergence linéaire.

3.5.2 La méthode de l'interpolation parabolique

Cette méthode consiste à choisir le quatrième point α_n au minimum de la parabole qui passe par les trois autres points déjà disponibles [33] :

$$\alpha_n = \alpha_d - \frac{1}{2} \frac{(\alpha_d - \alpha_g)^2(Q_d - Q_m) - (\alpha_d - \alpha_m)^2(Q_d - Q_g)}{(\alpha_d - \alpha_g)(Q_d - Q_m) - (\alpha_d - \alpha_m)(Q_d - Q_g)} \quad (\text{III - 58})$$

Cette méthode possède une vitesse de convergence super-linéaire. Néanmoins, la formule (III – 58) peut indiquer aussi bien un minimum qu'un maximum, selon les valeurs de Q aux trois points. Il est donc sage de vérifier *a posteriori* (à chaque itération) que le nouveau point correspond bien à un minimum et, le cas échéant, de le générer à l'aide de la méthode de la section d'or. Une autre solution consisterait à utiliser les valeurs de Q en deux points et le gradient de la fonction coût pour l'interpolation parabolique, ou encore des interpolations d'ordre supérieur [14].

3.5.3 Critères d'arrêt

Généralement, on stoppe la recherche linéaire :

1. lorsque la largeur de l'intervalle d'encadrement devient trop faible (critère de stagnation) ;
2. lorsque la fonction coût devient inférieure à une valeur prédéfinie (critère de convergence).

Wolfe [34], quant à lui, propose d'arrêter la recherche linéaire lorsque les deux conditions ci-dessous sont satisfaites :

$$\begin{cases} Q_{i+1} \leq Q_i + w_1 \alpha_i \Delta P_i \nabla Q_i \\ \left| \frac{\Delta P_i \nabla Q_{i+1}}{\Delta P_i \nabla Q_i} \right| < w_2 \end{cases} \quad (\text{III - 59})$$

où les paramètres w_1 et w_2 vérifient :

$$0 < w_1 < w_2 < 1 \quad (\text{III} - 60)$$

Ce critère d'arrêt est particulièrement adapté aux méthodes d'optimisation de quasi-Newton car il permet de garantir que la matrice de quasi-Newton reste définie positive.

4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons pu constater qu'un problème d'identification de paramètres n'est en fait qu'un problème d'optimisation dont l'ultime objectif est de minimiser une fonction coût Q . Nous avons pu constater que les fonctions « écart » de type « moindres carrés » semblent particulièrement bien adaptées à notre problème. Il est relativement aisé d'y introduire de nouvelles observables lorsque l'identification le nécessite. Plusieurs algorithmes d'optimisation ont été présentés et nous sommes désormais en mesure de décrire chaque étape nécessaire à la résolution de notre problème :

1. Choix d'observables expérimentales pertinentes ;
2. Choix d'une loi de comportement pertinente, les observables expérimentales devant être sensibles aux paramètres que l'on cherche à identifier;
3. Définition de la fonction coût ;
4. Choix d'un modèle direct de simulation ;
5. Choix d'un algorithme d'optimisation en apportant une attention toute particulière à la méthode utilisée pour déterminer les termes de la matrice de sensibilité ;
6. Choix d'un critère d'arrêt.

Dans le chapitre suivant, nous allons mettre toutes ces informations en pratique de façon à identifier les paramètres caractéristiques du comportement des polymères solides étudiés au cours du chapitre II.

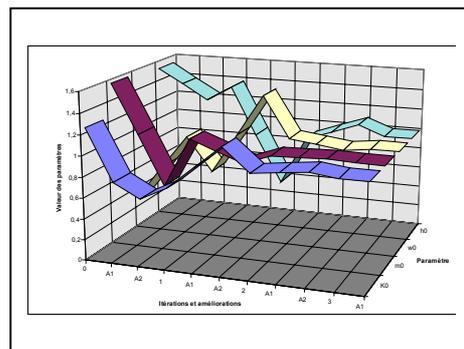
Bibliographie du chapitre 3

- [1] A. TARANTOLA, *Inverse Problem Theory*, Elsevier, (1987)
- [2] H. D. BUI, *Introduction aux problèmes inverses en mécanique des matériaux*, Eyrolles, Paris, (1993)
- [3] J. P. NORTON, « An introduction to Identification », *Ed. Academic Press*, London, (1986)

-
- [4] **J. V. BECK, K. J. ARNOLD**, « Parameter Estimation in Engineering and Science », *Ed. John Wiley & Sons*, (1977)
- [5] **J. W. MACQUEENE, R. L. AKAU, G. W. KRUTZ, R. J. SCHOENHALS**, « Development of Inverse Finite Element Techniques for Evaluation of Measurements Obtained from Welding Process », *Numerical Properties and Methodologies in Heat Transfer*, pp. 149 – 164, (1981)
- [6] **R. C. MEHTA, T. JAYACHANDRAN**, « Determination of Heat Transfer Coefficient Using Transient Temperature Response Chart », *Wärme- und Stoffübertragung*, **26**, pp. 1 – 5, (1990)
- [7] **J. D. COLLINS, G. C. HART, T. K. HASSELMAN, B. KENNEDY**, « Statistical Identification of Structures », *AIAA Journal*, **12**, n° 2, pp. 185 – 190, (1974)
- [8] **L. FOURMENT, T. BALAN, J. L. CHENOT**, « Shape Optimal Design in Metal Forming », *Proc. of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes – Numiform '95*, Balkema, pp. 557 – 562, (1995)
- [9] **BADRINARAYANAN, A. CONSTANTINESCU, N. ZABARAS**, « Preform in Metal Forming », *Proc. of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes – Numiform '95*, Balkema, pp. 533 – 538, (1995)
- [10] **D. S. SCHNUR, N. ZABARAS**, « An Inverse Method for Determining Elastic Material Properties and a Material Interface », *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **33**, pp. 2039 – 2057, (1992)
- [11] **G. CAILLETAUD, P. PILVIN**, « Identification and Inverse Problem : a Modular Approach », *Winter Annual Meeting Symposium on Material Parameter Estimation for Modern Constitutive Equations*, New Orleans, LA, (1993)
- [12] **I. N. TRENDAFILOVA, S. ODEEN, B. LUNDBERG**, « Identification of Viscoelastic Materials from Electro-optical Displacement measurements at Two Sections of an Impacted Rod Specimen », *Eur. J. Mech., A/Solids*, **13**, n° 6, pp. 793 – 802, (1994)
- [13] **M. BONNET**, « Un aperçu des approches existantes pour la description mathématique et la résolution des problèmes inverses », *Note interne 14*, Laboratoire de Mécanique des Solides, (1989, réactualisation en 1992)
- [14] **P. E. GILL, W. MURRAY, M. H. WRIGHT**, « Practical Optimization », *Ed. Academic Press*, London, (1981)
- [15] **D. M. BATES, D. G. WATTS**, « Nonlinear Regression Analysis and Its Applications », John Wiley & Sons, (1988)
- [16] **W. J. MINKOWYCZ, E. M. SPARROW, G. E. SCHNEIDER, R. H. PLETCHER**, « Handbook of Numerical Heat Transfer », John Wiley & Sons, Inc., (1988)
- [17] **A. J. MORRIS**, « Foundations of Structural Optimization : a Unified Approach », Wiley Series in Numerical Methods in Engineering, Wiley & Sons, Chichester, (1982)
- [18] **A. GAVRUS, E. MASSONI, J.-L. CHENOT**, « Constitutive Parameter Identification Using a Computer Aided Rheology Approach », in Shen, Dawson (editeurs), *Simulation of Materials Processing : Theory, Methods and Applications*, pp. 563 – 568, Balkema : Rotterdam, (1995)
- [19] **A. TIKHONOV, V. ARSENINE**, « Méthodes de résolution de problèmes mal posés », Ed. Mir. Moscou, (1974)
- [20] **W. J. MINKOWYCZ, E. M. SPARROW, G. E. SCHNEIDER, R. H. PLETCHER**, « Handbook of Numerical Heat Transfer », John Wiley & Sons, Inc., (1988)

-
- [21] **A. GAVRUS**, « Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1996)
- [22] **K. SCHITTKOWSKI, C. ZILLOBER, R. ZOTEMANTEL**, « Numerical Comparison of Nonlinear Programming Algorithms for Structural Optimization », *Structural Optimization*, **7**, pp. 1 – 19, (1994)
- [23] **HAFTKA**, « Element of Structural Optimization », Dordrecht : Kluwer Academic Publisher, p. 481, (Solid Mechanics and its Application : **11**), (1992)
- [24] **D.A. TORTORELLI, P. MICHALERIS**, «Design Sensitivity Analysis : Overview and Review », *Inverse Problems in Engineering*, **1**, pp. 71 – 105, (1991)
- [25] **T. BALAN**, « Optimisation de forme des outils de forgeage par méthode inverse », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (1996)
- [26] **M. BECKER, R. KOPP**, « A New Approach to Optimization of Metal Forming Processes », in E.G. Thompson et al, *Numiform '89*, Balkema : Rotterdam, pp. 107 – 113, (1989)
- [27] **J. KUSIAK, E. G. THOMPSON**, « Optimization Techniques for Extrusion Die Shape Design », in E. G. THOMPSON et al. (Ed.), *Numiform '89*, pp. 569 – 574, Balkema : Rotterdam, (1989)
- [28] **M. MICHINO, M. TANAKA**, « FC-method : an Inverse Method to Determine Flow Stress up to Large Strain », in Shen, Dawson (Ed.), *Simulation of Materials Processing : Theory, Methods and Applications*, Balkema : Rotterdam, (1995)
- [29] **J.-C. GELIN, O. GHOUATI**, « Inverse Identification Methods for Materials Parameters Estimation in Large Plastic Deformations », in The Fourth International Conference on Computational Plasticity (COMPLAS), Barcelone (Espagne), Pineridge Press Edition, pp. 767 – 778, (1995)
- [30] **E. MASSONI**, *Séminaire de plasticité : éléments finis et mise en forme des métaux*, Chap. XX, Ecole des Mines de Paris, CEMEF, (1994)
- [31] **M. F. CHEN, A. M. MANIATY**, « An Inverse Technique for the Optimization of some Forming Processes », in Shen, Dawson (Ed.), *Simulation of Materials Processing : Theory, Methods and Applications*, Balkema : Rotterdam, pp. 545 – 550, (1995)
- [32] **L. FOURMENT, J.-L. CHENOT**, « Optimal Design for Non-steady-state Metal Forming Processes – I. Shape Optimization Method », *Int. J. Num. Meth. Engng.*, **39**, n° 1, pp. 33 – 51, (1996)
- [33] **W. H. PRESS, S. A. TEULOLSKY, W. T., VETTERLING, B. P. FLANNERY**, *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2° Edition, (1992)
- [34] **P. WOLFE**, « Convergence Condition for Ascent Methods », *SIAM Review*, **13**, pp. 185 – 188, (1971)

**IDENTIFICATION DES PARAMETRES
RHEOLOGIQUES PAR L'ANALYSE INVERSE
D'UN MODELE ELEMENTS FINIS**



1	Introduction	149
1.1	La symétrie	150
1.2	Le cadre général de la loi de comportement	151
1.3	Les effets thermiques	151
1.4	Expérimental	152
2	Présentation des problèmes à résoudre	153
2.1	Formulation continue du problème mécanique	153
2.1.1	Les équations d'équilibre	154
2.1.2	Loi de frottement	158
2.2	Formulation continue du problème thermique	160
2.3	Synthèse sur la résolution du modèle direct	162
2.4	Présentation de FORGE2®	163
2.4.1	Formulation en vitesse	164
2.4.2	Discrétisation par éléments finis	165
2.4.2.1	Discrétisation spatiale de l'équilibre mécanique	166
2.4.2.2	Discrétisation spatiale de l'équilibre thermique	170
2.4.2.3	Discrétisation temporelle de l'équilibre mécanique	172
2.4.2.4	Discrétisation temporelle de l'équilibre thermique	173
2.4.2.5	Synthèse du couplage thermo-mécanique dans FORGE2®	175
2.4.2.6	Calcul des grandeurs globales caractéristiques des essais rhéologiques	176
3	Validation du modèle direct	176
3.1	Validation mécanique	177
3.2	Validation thermique	179
4	Présentation du modèle inverse	183
5	Validation de l'algorithme de minimisation	189
5.1	Création de l'espace « expérimental » artificiel	190
5.2	Test de convergence	191
5.3	Test de stabilité	194
5.4	Influence de l'espace expérimental	196
5.5	Influence du maillage	198
6	Conclusions	199

1 Introduction

Nous avons vu au cours du second chapitre que, pour augmenter la précision de l'analyse du comportement des matériaux, il était nécessaire d'intégrer toute la complexité de l'écoulement liée aux phénomènes thermomécaniques que sont la localisation de la déformation ou encore la présence de gradients thermiques importants. Dans le cas de l'identification rhéologique par analyse inverse, c'est au sein du modèle direct que l'ensemble de ces renseignements doivent être pris en compte. Nous allons nous attacher dans un premier temps à présenter les caractéristiques essentielles que doit posséder le modèle direct. Nous préciserons ensuite plus particulièrement le principe de fonctionnement du modèle direct que nous avons retenu et nous nous assurerons qu'il est capable de répondre aux besoins requis par l'identification de paramètres par analyse inverse. Nous présenterons ensuite comment s'articule le passage entre modèles direct et inverse, en décrivant l'algorithme d'optimisation que nous avons développé dans le cadre de cette étude. Une campagne de validations numériques permettra de vérifier la faisabilité du logiciel et de préciser les limites de la Rhéologie Assistée par Ordinateur.

Pour un essai rhéologique, le modèle direct doit être capable de calculer les états locaux de déformations, de contraintes et de température dans l'éprouvette et d'exprimer la réponse globale de l'éprouvette en fonction des sollicitations auxquelles elle est soumise. Par exemple, dans le cas d'un essai de traction, il doit être capable de fournir au module d'optimisation l'évolution de la force en fonction du déplacement de la traverse, et cela pour diverses conditions opératoires (vitesse, température initiale ...).

Il doit reproduire le test en totalité en termes de conditions aux limites et de conditions cinématiques. Ainsi, si comme dans l'essai d'impact ou de compression, il existe un frottement entre le dispositif expérimental et le polymère, le code de calcul doit en tenir compte. Le fait de ne traiter que des grandeurs technologiques impose aussi une connaissance et/ou une modélisation de tout le dispositif. Il faut, en particulier, veiller aux glissements dans les mors, à la rigidité du dispositif ... Toutes les conditions opératoires doivent être reproduites : modélisation de toute l'éprouvette, des zones d'emprises, de contact ... En fait, toutes les conditions aux limites doivent être correctement reproduites. En outre, le code doit être le plus général possible, c'est-à-dire qu'il ne doit pas être basé sur des hypothèses simplificatrices trop importantes quant à :

- la symétrie de l'éprouvette et de la sollicitation ;
- l'isotropie du matériau ;

- la loi de comportement ;
- les effets dynamiques.

De ce que nous savons du comportement des matériaux en général, un code de calcul à trois dimensions anisotrope serait nécessaire. Cependant, n'oublions pas que l'identification de paramètres suppose trois conditions préliminaires :

- la robustesse et la fiabilité numérique du calcul ;
- la pertinence des modèles physiques utilisés dans le code ;
- l'identification de tous les paramètres caractéristiques de ces modèles (coefficients thermiques, tribologiques ...).

Notre objectif est d'abord de jeter les bases et de montrer la faisabilité et les potentialités de l'analyse inverse dans le domaine de l'identification rhéologique des polymères solides. La durée de l'étude ne permettait pas de répondre de façon satisfaisante à tous les points fondamentaux soulevés ici (numérique, physique et expérimental). Nous utiliserons donc des approches simplifiées sachant pertinemment qu'elles imposeront des contraintes d'utilisation et introduiront des limites de validité. Toutefois, l'utilité de la démarche sera triple :

- Apporter des réponses, certes partielles mais immédiates, aux besoins actuels des calculs de structure.
- Aider à l'établissement de démarches plus générales en élargissant la gamme d'essais expérimentaux exploitables.
- Préparer la mise en place d'une analyse inverse plus « rigoureuse ».

Dans ce troisième objectif, nous veillerons à ce que nos codes conservent une possibilité d'évolution ou de transformation suffisante. Nous allons détailler nos choix et leurs conséquences dans ce qui suit. Nous utiliserons souvent le mot « outil » pour désigner toute partie du dispositif en contact avec l'éprouvette (par analogie avec la mise en forme des matériaux).

1.1 La symétrie

Nous souhaitons mettre en place la méthode. C'est pourquoi nous préférons utiliser des codes rapides et fiables. C'est pour cela que nous utiliserons un modèle direct à deux dimensions. Ceci n'est pas une limitation de fond. Cela imposera simplement des limites quant à la géométrie des cas tests envisagés. En outre, le modèle direct que nous avons choisi n'autorise de traiter que des cas

axisymétriques ou de déformations planes. Nous ne pourrions donc pas traiter, par exemple, le cas de la traction d'éprouvettes plates. Par contre, nous pourrions utiliser un code validé depuis plusieurs années, ce qui conservera à notre travail un caractère progressif.

1.2 Le cadre général de la loi de comportement

Il a été démontré que des approches simples autorisent d'approcher le comportement macroscopique des polymères en situation d'impact [1]. Nous choisirons donc en première approche d'assimiler le polymère à un corps viscoplastique, incompressible, isotrope et obéissant à une loi d'écoulement associée au critère de plasticité de von Mises.

Nos déterminations autoriseront donc une approximation du comportement macroscopique du polymère dans une fenêtre expérimentale donnée : un mode de sollicitation et une gamme de vitesse. On peut toutefois espérer que la juxtaposition des résultats de notre analyse dans différentes configurations aide à l'établissement de lois plus générales. En tout état de cause, notre analyse, qui n'est pas fondamentalement plus riche d'un point de vue physique que les approches de laboratoire actuelles, sera plus précise et élargira la fenêtre expérimentale. Ajouté au fait qu'elle aidera au développement de lois physique mieux adaptées, l'analyse inverse sera une grande amélioration.

1.3 Les effets thermiques

Les effets thermiques doivent par contre absolument être traités, car comme nous l'avons constaté au cours du chapitre II, l'adoucissement thermique dont les polymères sont le siège au delà de 10^{-2} s^{-1} est prépondérant [1, 2]. Ceci suppose l'utilisation d'un code thermo-mécanique couplé et donc :

- d'une rhéologie thermodépendante ;
- d'une résolution de l'équation d'énergie, c'est-à-dire la connaissance des grandeurs représentatives que sont la capacité calorifique, la conductivité thermique, les coefficients d'échanges avec l'extérieur ;
- d'une prise en compte de la dissipation visqueuse et donc la connaissance du coefficient de conversion du travail en chaleur.

S'il est possible, en prenant certaines précautions, de déterminer la capacité calorifique et la conductivité thermique, les termes d'échanges avec l'extérieur, qu'ils soient convectifs, radiatifs ou

conductifs (contact avec l'outil) sont très délicats à dimensionner. D'ailleurs, leur détermination donne également lieu au développement d'analyses inverses [3]. Le terme d'efficacité (conversion du travail mécanique en chaleur) a lui aussi son importance [1]. Le déterminer supposerait une connaissance intime du comportement (part de la viscoélasticité) ou des processus fondamentaux de déformation (part des changements conformationnels). Il serait tentant de le considérer comme un paramètre rhéologique et de l'identifier avec les autres coefficients. Malheureusement, son effet est indiscernable des effets thermiques et l'identification serait impossible.

Nous choisirons *a priori* de considérer ces paramètres connus, étant bien entendu que l'identification rhéologique et sa précision, seront subordonnées à la précision avec laquelle ils seront définis et à la pertinence de leur prise en compte.

1.4 Expérimental

Les frottements entre le dispositif expérimental et l'éprouvette sont de première importance. S'ils sont trop importants en compression et en impact, ils modifient la déformation et donc la réponse macroscopique de l'éprouvette. S'ils sont trop faibles dans les mors de traction, ils autorisent un glissement des têtes de l'éprouvette, interdisant ainsi de relier le déplacement des mors à la déformation de l'éprouvette.

Prendre en compte le frottement suppose de posséder un modèle tribologique adapté (loi de frottement) et ses paramètres associés (coefficients de frottement). L'influence et la difficulté de la tribologie en mise en forme des matériaux nous incitent à penser que ce problème est une étude en soi, surtout lorsqu'il s'agit de contacts métaux-polymères à grandes vitesses.

Même si nous montrons qu'avec quelques précautions, on peut, à terme, espérer dans certains cas identifier simultanément frottement et rhéologie, ce n'est pas le cas général et une connaissance *a priori* de la tribologie restera nécessaire. Faute de pouvoir chiffrer précisément le phénomène, nous tenterons d'en limiter les effets en forçant expérimentalement un contact soit collant (pas de glissement), soit glissant par lubrification. Il ne s'agit bien entendu là que d'approximations.

De même que les frottements, les artefacts de mesure, liés par exemple à un manque de rigidité du dispositif expérimental sont inévitables. Il serait dès lors illusoire de les reproduire précisément et de les prendre en compte de manière générale : ils dépendent en effet du dispositif utilisé. Ceci constitue une limite de l'analyse numérique. C'est l'expérimentateur qui doit prendre en compte ce

problème. Nous choisirons, pour notre part, de supprimer les erreurs connues de ce type des résultats expérimentaux pour ne modéliser que des essais parfaits.

Quant aux bruits d'origine électronique ou électrique, tout aussi inévitables, nous choisissons bien sûr d'en limiter l'importance en réalisant des essais « propres ». Nous analyserons toutefois leurs effets sur l'identification à l'aide de tests numériques.

Enfin, les incertitudes et la dispersion des mesures devront être prises en compte lors de la construction de l'espace expérimental : l'ensemble des essais doit être représentatif. Là encore, une analyse numérique permettra de chiffrer la précision maximale que l'on est en droit d'espérer sur les paramètres identifiés compte tenu de la précision avec laquelle sont enregistrées les mesures expérimentales.

2 Présentation des problèmes à résoudre

Pour calculer les états de déformation, de contrainte et de température, et ainsi en déduire la réponse globale d'une éprouvette aux sollicitations qu'elle subit, le modèle direct dispose généralement d'un certain nombre d'équations. Dans les paragraphes suivants, nous allons montrer dans un premier temps comment s'expriment ces différentes équations (compte tenu des restrictions que nous nous sommes imposées) et dans un second temps quels outils permettent de les résoudre.

Le problème se décompose donc en un problème mécanique et en un problème thermique couplés.

2.1 Formulation continue du problème mécanique

Les équations dont nous disposons pour résoudre le problème mécanique se divisent en plusieurs catégories, parmi lesquelles on trouve, outre une loi de comportement associée à l'écoulement que nous avons déjà largement évoquée :

- la loi de frottement ;
- un ensemble d'équations qui permettent de définir l'équilibre mécanique ;
- des conditions limites.

2.1.1 Les équations d'équilibre

Les équations du problème mécanique à résoudre sont constituées des équations d'équilibre et de continuité et de leurs conditions aux limites (Figure IV - 1).

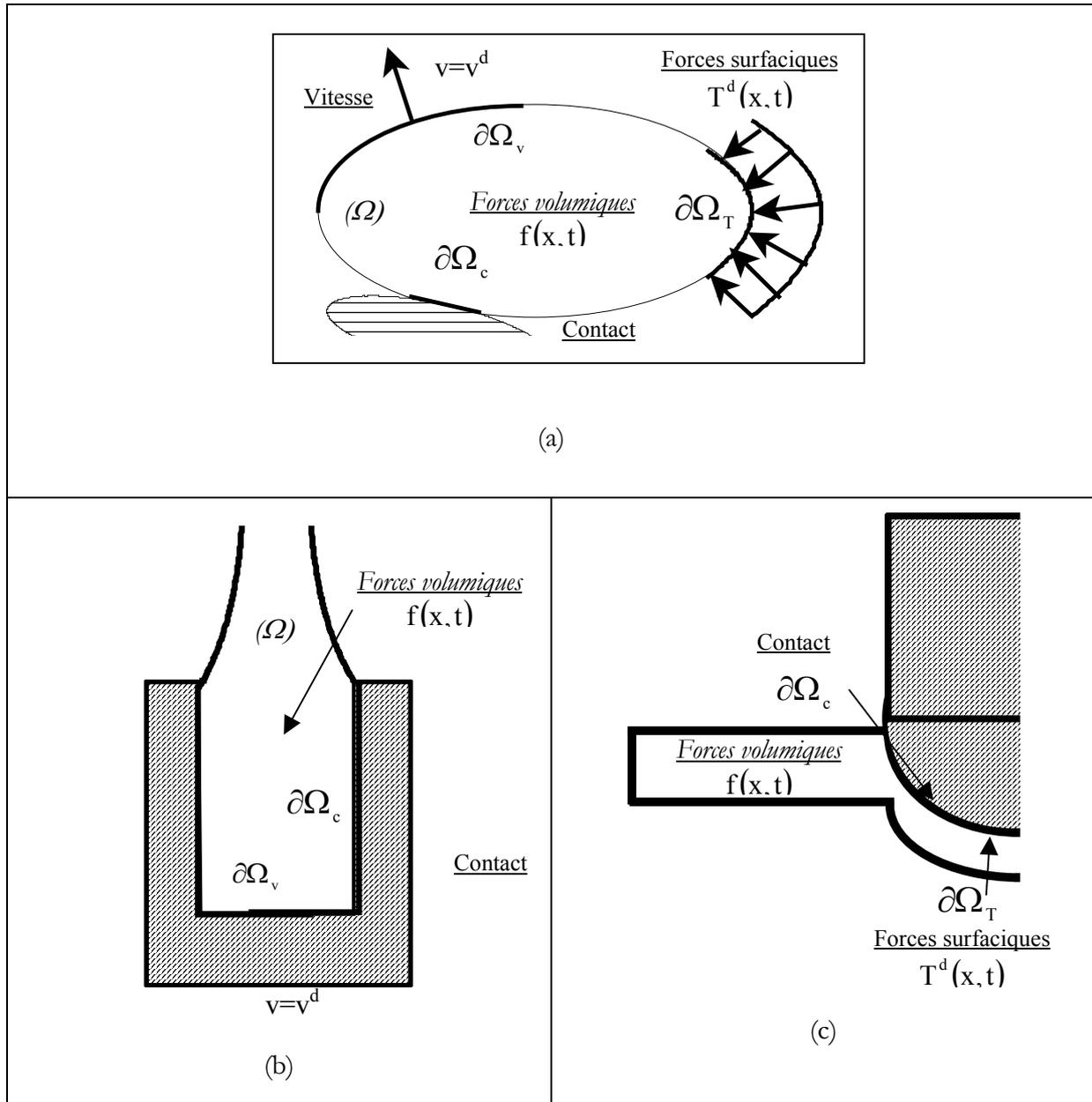


Figure IV - 1: Configuration mécanique d'un système pièce-outil (a) – Application à une éprouvette (b) de traction et (c) d'impact.

Considérons un système Ω , dans un état initial que nous prendrons comme référence, et auquel on impose des sollicitations diverses (forces surfaciques, forces de masse, déplacements imposés à la frontière ...) pendant un intervalle de temps. Les données du problème à résoudre sont (Figure IV - 1) :

- la configuration initiale Ω^0 avec la masse volumique initiale $\rho(\underline{x}, t = 0)$, \underline{x} correspondant au vecteur position ;
- les forces surfaciques $\underline{T}^d(\underline{x}, t)$ imposées au cours du temps sur une partie $\partial\Omega_T$ de $\partial\Omega$;
- les vitesses $\underline{v}^d(\underline{x}, t)$ ou les déplacements $\underline{u}^d(\underline{x}, t)$ imposés au cours du temps sur la frontière $\partial\Omega_v$;
- les forces volumiques au cours du temps $\underline{f}(\underline{x}, t)$;
- les contacts avec l'outil (mors, poinçon, ...) sur $\partial\Omega_c$;

t étant le temps.

Résoudre le problème revient à déterminer l'histoire, en termes de mouvement, déformations et contraintes, des éléments de matière constituant le système Ω . Pour cela, il est nécessaire de calculer en tout point de Ω et à tout instant :

- le champ de vitesse ou de déplacement au cours du temps :

$$\underline{v}(\underline{x}, t) \text{ ou } \underline{u}(\underline{x}, t) \quad (\text{IV - 1})$$

- le champ du tenseur des contraintes de Cauchy :

$$\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}, t) \quad (\text{IV - 2})$$

- la masse volumique :

$$\rho(\underline{x}, t) \quad (\text{IV - 3})$$

On déduit de \underline{v} (ou \underline{u}) le domaine Ω^t occupé par le système à l'instant t ainsi que les déformations ou vitesses de déformation. Afin de déterminer ces inconnues, il est nécessaire d'avoir recours entre autre aux relations fondamentales de la mécanique qui sont :

- la conservation de la masse (équation de continuité) qui nous donne :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \underline{v}) = 0 \quad (\text{IV - 4})$$

Si le matériau est incompressible, cette équation se réduit à :

$$\operatorname{div}(\underline{\underline{v}}) = 0 \quad (\text{IV} - 5)$$

- la relation fondamentale de la dynamique conduit à la relation suivante :

$$\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} + \rho \underline{\underline{f}} = \rho \underline{\underline{\gamma}} \quad (\text{IV} - 6)$$

où $\underline{\underline{\gamma}}$ est l'accélération. Si gravité et inertie peuvent être négligées, cette équation se réduit alors à :

$$\operatorname{div} \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (\text{IV} - 7)$$

Note : Nous prenons quant à nous le parti de ne pas chercher à tenir compte d'éventuels effets d'inertie. En effet, il est apparu lors d'études précédentes [1] que ces effets ne sont pas très sensibles si on envisage une utilisation « classique » des polymères. D'un point de vue plus scientifique, les problèmes d'identification apparaissent bien en deçà des effets dynamiques. Ceci nous interdira de traiter des essais trop rapides. A charge pour l'utilisateur de s'assurer (expérimentalement) du caractère quasi-statique de ses mesures.

Les conditions aux limites sont quant à elles (si $\underline{\underline{n}}$ désigne la normale sortante à Ω) :

$$\begin{cases} \text{Champ de vitesse imposé : } \underline{\underline{v}}(\underline{\underline{x}}, t) = \underline{\underline{v}}^d(\underline{\underline{x}}, t) \text{ pour } \underline{\underline{x}} \in \partial\Omega_v \\ \text{Champ de contrainte imposé : } \underline{\underline{\sigma}}(\underline{\underline{x}}, t) \cdot \underline{\underline{n}}(\underline{\underline{x}}, t) = \underline{\underline{T}}^d(\underline{\underline{x}}, t) \text{ pour } \underline{\underline{x}} \in \partial\Omega_T \\ \text{Condition de non pénétration : } (\underline{\underline{v}} - \underline{\underline{v}}_{\text{outil}}) \cdot \underline{\underline{n}} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_C \\ \text{Loi de frottement sur } \partial\Omega_C \end{cases} \quad (\text{IV} - 8)$$

Il peut y avoir des surfaces mixtes, c'est-à-dire ayant plusieurs natures de conditions aux limites.

Enfin, la loi de comportement permet d'écrire $\underline{\underline{\sigma}}$ sur Ω .

L'ensemble des équations (IV – 1) à (IV – 8) constitue ce que l'on appelle le **problème continu fort** (problème en vitesse et contrainte).

Si les lois de comportement et de frottement dérivent d'un potentiel (φ_{frot} pour la loi de frottement (IV – 5) et $\varphi_{\text{L.C.}}$ pour la loi de comportement), il est possible de montrer que le champ de vitesse $\underline{\underline{v}}$ solution faible des équations du problème (IV – 1) à (IV – 8) réalise le minimum de la fonctionnelle ϕ suivante :

$$\phi(\underline{v}) = \int_{\Omega} \varphi_{L.C.} dV + \int_{\partial\Omega_c} \varphi_{frot} dS - \int_{\partial\Omega_T} \underline{T}^d \cdot \underline{v} dS \quad (IV - 9)$$

ϕ est une fonction convexe, ce qui permet d'établir l'existence et l'unicité de la solution du problème. Comme ϕ est différentiable, on montre que la condition de minimisation de ϕ est équivalente au **Principe des Puissances Virtuelles** (PPV) : « *La puissance virtuelle des quantités d'accélération d'un système est égale à la puissance de toutes les forces appliquées au système, tant intérieures qu'extérieures, quel que soit le mouvement virtuel du système considéré* ». Cela se traduit par la **formulation faible en vitesse – contrainte** (formulation intégrale) du problème mécanique, soit :

$$\forall \underline{v}^* \in V^0, \int_{\Omega} \rho \underline{\gamma} \cdot \underline{v}^* dV = \int_{\Omega} \rho \underline{f} \cdot \underline{v}^* dV + \int_{\partial\Omega_T} \underline{T}^d \cdot \underline{v}^* dS - \int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^* dV \quad (IV - 10)$$

En négligeant les termes de gravité et d'inertie, l'expression (IV – 10) devient :

$$\forall \underline{v}^* \in V^0, \int_{\Omega} \underline{\sigma} : \underline{\dot{\epsilon}}^* dV = \int_{\partial\Omega_c} \underline{\tau} \cdot \underline{v}^* dS + \int_{\partial\Omega_T} \underline{T}^d \cdot \underline{v}^* dS \quad (IV - 11)$$

$\underline{\tau}$ étant la cission de frottement, V^0 l'espace des champs de vitesse à énergie finie, incompressibles et \underline{v}^* vérifiant les conditions limites homogènes, c'est-à-dire que :

$$\begin{cases} \text{div} \underline{v}^* = 0 \text{ sur } \Omega \\ \underline{v}^* = 0 \text{ sur } \partial\Omega_v \\ \underline{v}^* \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_c \end{cases} \quad (IV - 12)$$

La fonctionnelle viscoplastique ϕ sert en fait essentiellement à établir la preuve de l'existence et de l'unicité de solution. C'est un résultat important mais en ce qui concerne la résolution même du problème, compte tenu des difficultés rencontrées pour construire l'espace V^0 des champs de vitesse incompressibles, on préfère utiliser une formulation faible des équations (IV – 1) à (IV – 8) qui consiste à trouver le champ de vitesse \underline{v} appartenant à un espace V_q tel que :

$$\begin{cases} \forall \underline{v}^* \in V_q^0, \int_{\Omega} \text{div} \underline{\sigma} \cdot \underline{v}^* dV = 0 \\ \forall p \in Q, \int_{\Omega} p^* \text{div} \underline{v} dV = 0 \end{cases} \quad (IV - 13)$$

où V_q et V_q^0 sont respectivement les espaces des champs de vitesse quasiment cinématiquement admissibles et quasiment cinématiquement admissibles à 0. Cela signifie que les champs qui les composent ne vérifient pas nécessairement la condition d'incompressibilité :

$$\underline{v} \in V_q \Rightarrow \begin{cases} \underline{v} = \underline{v}^d & \text{sur } \partial\Omega_v \\ (\underline{v} - \underline{v}_{\text{outil}}) \cdot \underline{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_c \end{cases} \quad (\text{IV - 14})$$

où $\underline{v}_{\text{outil}}$ est la vitesse de l'outil en contact avec le matériau (Figure IV - 2).

$$\underline{v} \in V_q^0 \Rightarrow \begin{cases} \underline{v} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_v \\ \underline{v} \cdot \underline{n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega_c \end{cases} \quad (\text{IV - 15})$$

En décomposant le tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ en déviateur $\underline{\underline{s}}$ et pression p suivant la relation $\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{\sigma}} + p\underline{1}$, on obtient **la formulation continue faible en vitesse et pression** (\underline{v}, p) du problème.

Il s'agit de trouver les champs de vitesse \underline{v} et de pression p tels que :

$$\begin{cases} \forall \underline{v}^* \in V_q^0, \int_{\Omega} \underline{\underline{s}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^* dV - \int_{\Omega} p \operatorname{div} \underline{v}^* dV - \int_{\partial\Omega_c} \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{v}^* dS - \int_{\partial\Omega_T} \underline{\underline{T}}^d \cdot \underline{v}^* dS = 0 \\ \forall p^* \in Q, \int_{\Omega} p^* \operatorname{div} \underline{v} dV = 0 \end{cases} \quad (\text{IV - 16})$$

Q est un espace de fonctions tests pour l'équation d'incompressibilité.

2.1.2 Loi de frottement

Il est possible de choisir une loi de frottement similaire à la loi de comportement. Bien que cela ne soit pas obligatoire, ce choix permet éventuellement d'interpréter la cission de frottement comme étant la cission de cisaillement d'un troisième corps compris entre l'outil et le matériau, ce troisième corps obéissant à la même loi de comportement que le matériau lui-même. Ainsi, pour un matériau viscoplastique, nous utiliserons une loi de type puissance ou loi de Norton.

Il s'agit d'une loi sans seuil. Le glissement se produit dès les plus petites valeurs de la cission. Cette loi s'exprime sous la forme suivante :

$$\underline{\underline{\tau}} = -\alpha_f K \left\| \underline{\underline{\Delta V}}_g \right\|^{p_f - 1} \underline{\underline{\Delta V}}_g \quad (\text{IV - 17})$$

où $\underline{\Delta V}_g$ est le vecteur vitesse relative de glissement du matériau au contact, c'est-à-dire la composante tangentielle du différentiel des vitesses matière-outil (Figure IV - 2) :

$$\underline{\Delta V}_g = \underline{v} - \underline{v}_{\text{outil}} - [(\underline{v} - \underline{v}_{\text{outil}}) \cdot \underline{n}] \underline{n} \quad (\text{IV} - 18)$$

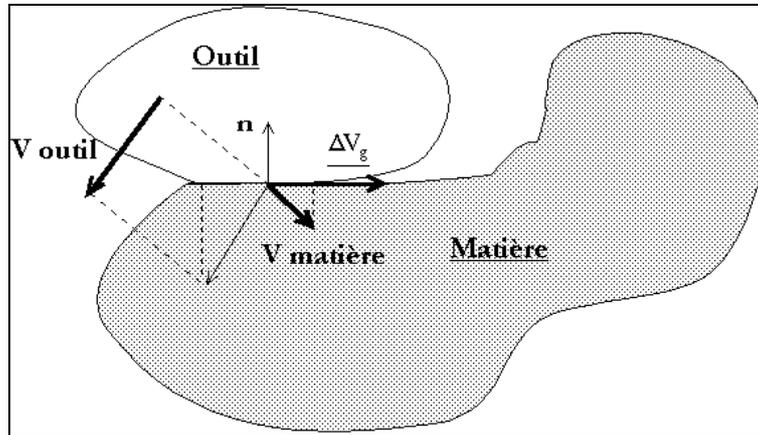


Figure IV - 2 : Contact matière-outil.

Apparaît également dans l'équation (IV - 17) une consistance K , caractéristique mécanique du matériau, alors que les paramètres de frottement α_f et p_f caractérisent l'ensemble de l'interface (aussi bien l'état de surface de l'éprouvette que celui de l'outillage et la prise en compte d'un éventuel lubrifiant). Quant à $\underline{\tau}$, il s'agit du vecteur cisson de frottement (composante tangentielle du vecteur contrainte à l'interface) ; il est défini de la façon suivante :

$$\underline{\tau} = \underline{\underline{\sigma}} \underline{n} - (\underline{\underline{\sigma}} \underline{n} \cdot \underline{n}) \underline{n} \quad (\text{IV} - 19)$$

\underline{n} étant la normale extérieure à la matière.

En outre, on peut montrer que la loi de frottement (IV - 17) dérive d'un potentiel différentiable Φ_{frot} et on peut écrire :

$$\underline{\tau} = \frac{\partial \Phi_{\text{frot}}}{\partial \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}} \quad (\text{IV} - 20)$$

avec

$$\Phi_{\text{frot}}(\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}) = \frac{\alpha_f K}{p_f + 1} \|\underline{\Delta V}_g\|^{p_f + 1} \quad (\text{IV} - 21)$$

Cette loi de frottement est celle implémentée dans le modèle direct que nous utilisons. Elle n'a pas été validée dans les cas que nous traitons ici. C'est pourquoi nous choisirons d'en minimiser l'importance en contrôlant (en lubrifiant) les interfaces. Une étude exhaustive du frottement serait en effet une tâche trop longue dans le cadre de ce travail.

2.2 Formulation continue du problème thermique

Le problème est défini dans un domaine Ω où nous adopterons l'équation de la chaleur sous la forme :

$$\rho c \frac{dT}{dt} = \text{div}(k \text{ grad}T) + \dot{q}_v \quad (\text{IV} - 22)$$

où ρ est la masse volumique du matériau, c sa chaleur massique, k sa conductivité thermique. Le terme additionnel \dot{q}_v provient de la conversion partielle de la puissance mécanique en énergie thermique, son expression générale est donc :

$$\dot{q}_v = f \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (\text{IV} - 23)$$

où f est le taux de conversion.

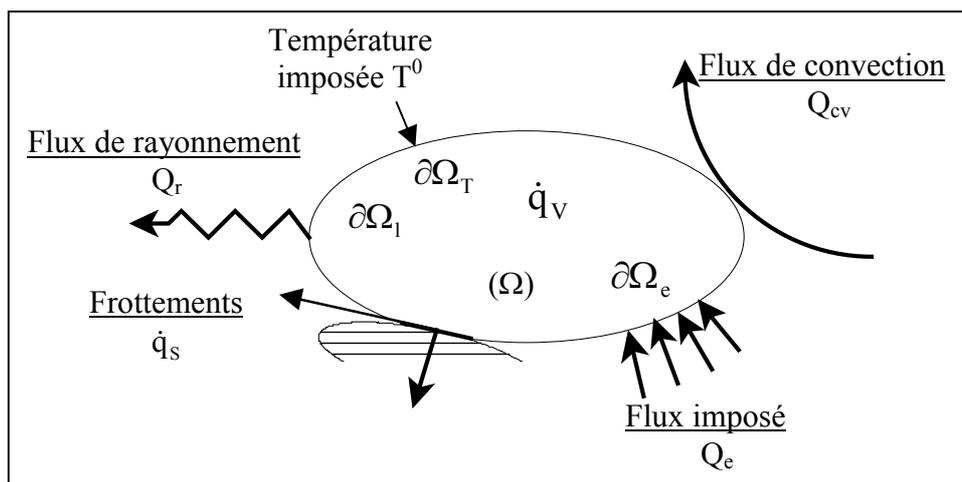


Figure IV - 3 : Configuration thermique d'un système pièce-outil.

Sur la frontière de Ω , les conditions aux limites peuvent être de différentes formes :

- température imposée T^0 sur la frontière $\partial\Omega_T$;

- flux imposé Q_e sur la frontière $\partial\Omega_e$:

$$-k \frac{\partial T}{\partial \underline{n}} = Q_e \quad (\text{IV - 24})$$

où \underline{n} est la normale à la surface $\partial\Omega_e$.

- flux de convection Q_{cv} et flux de rayonnement Q_r sur la surface libre de la pièce $\partial\Omega_l$. Lorsque convection et rayonnement sont simultanés, il est pratique et courant de les regrouper en une relation unique :

$$Q_{cv} + Q_r = -k \text{grad } T = (h_{cv} + h_r)(T - T_a) \quad (\text{IV - 25})$$

où T_a est la température ambiante, h_{cv} le coefficient de convection avec l'air, h_r le coefficient de radiation donné par la relation de Stephan-Boltzman

$$h_r = \varepsilon^r \sigma^r (T^2 + T_a^2)(T + T_a) \quad (\text{IV - 26})$$

ε^r est l'émissivité du corps considéré (toujours compris entre 0 et 1) et σ^r est la constante de Stephan ($\sigma^r = 5,66961 \cdot 10^{-8} \text{ kg/s}^3 \cdot \text{K}^4$).

- terme de conduction avec le milieu extérieur (les mors par exemples) sur la frontière $\partial\Omega_c$:

$$-k \frac{\partial T}{\partial \underline{n}} = -\text{grad } T \cdot \underline{n} = \alpha_c (T - T_{\text{Out}}) \quad (\text{IV - 27})$$

où α_c et T_{Out} sont respectivement les coefficients de conduction avec l'extérieur et la température extérieure au domaine Ω (celle des mors par exemple).

- éventuellement flux ϕ_f ayant pour origine le frottement à l'interface entre la pièce et l'outil. On admettra que c'est une fraction de l'énergie de frottement \dot{q}_s , proportionnelle à l'effusivité b , soit :

$$\begin{cases} \phi_f = \beta \dot{q}_s & \text{avec } \beta = \frac{b}{b + b_{\text{Out}}} \\ \dot{q}_s = -\underline{\tau} \cdot \underline{\Delta v} \\ b = \sqrt{\rho c k} \end{cases} \quad (\text{IV - 28})$$

où $\underline{\Delta v}$ est la différence de vitesse tangentielle entre la pièce et l'outil. b et b_{out} sont respectivement les effusivités du polymère et de l'outil.

Contrairement au problème mécanique, aucune fonctionnelle ne correspond à l'équation de la chaleur dans le cas d'un processus instationnaire. Cependant, tout comme pour le problème mécanique, on peut montrer que le problème thermique défini par les équations (IV - 22) à (IV - 28) peut s'exprimer, moyennant les conditions aux limites décrites précédemment, sous la forme intégrale (méthode de **Galerkin**) :

$$\begin{aligned} \forall \psi, \quad & \int_{\Omega} \rho c \frac{dT}{dt} \psi \, dV + \int_{\Omega} k \text{grad} T \cdot \text{grad} \psi \, dV - \int_{\Omega} \dot{q}_v \psi \, dV \\ & - \int_{\partial\Omega_c} [\alpha_c (T - T_{out}) - \beta \underline{\tau} \cdot \underline{\Delta v}] \psi \, dS - \int_{\partial\Omega_e} Q_e \psi \, dS \\ & - \int_{\partial\Omega_1} [(h_{cv} + h_r)(T - T_a)] \psi \, dS = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV} - 29)$$

où ψ est une fonction test qui s'annule sur la partie de la frontière où la température est imposée ($\psi = 0$ sur $\delta\Omega_T$). La résolution du problème thermique se réduit alors à trouver la fonction T définie dans Ω , telle que $T = T^0$ sur $\partial\Omega_T$ et qui vérifie la relation (IV - 29).

2.3 Synthèse sur la résolution du modèle direct

Dans la réalité, les trois familles d'équations (thermiques, cinématiques et rhéologiques/tribologiques) que nous venons de traiter séparément ne sont pas indépendantes pour plusieurs raisons :

1. Les variations de température au sein d'un milieu continu occasionnent des variations de caractéristiques rhéologiques du milieu.
2. La déformation du milieu modifie les conditions d'échange thermique avec le milieu environnant.
3. Ainsi qu'il l'a été constaté au cours du chapitre II en suivant la déformation d'éprouvettes par thermographie infrarouge, selon le comportement rhéologique, une fraction de la puissance de déformation peut être transformée en puissance calorifique. De même, le frottement peut influencer directement sur la dissipation en surface.

Il y a donc bien couplage entre la thermique et la mécanique et la prise en compte simultanée de ces deux aspects peut être à l'origine d'un certain nombre de difficultés lors de la résolution du problème direct.

Plusieurs stratégies ont été proposées dans la littérature pour résoudre ces équations :

1. **Lahoti et al.** [4] ne résolvent pas le problème mécanique, mais partis d'une analyse simplifiée d'un test de compression et de torsion, résolvent l'équation de la chaleur à l'aide de la méthode des différences finies. *A posteriori*, ils ont ainsi pu prédire l'autoéchauffement au sein de l'éprouvette.
2. D'autres auteurs [5] ont résolu, dans le cadre d'un essai de torsion, à la fois l'équilibre mécanique et l'équilibre thermique par la méthode des tranches, en partant d'une hypothèse de distribution radiale uniforme de la déformation, de la contrainte et de la température.
3. Parfois, seul l'équilibre mécanique a été résolu localement en utilisant la méthode des différences finies [6].
4. Enfin, et c'est l'option choisie ici dans le logiciel FORGE2[®], la prise en compte du couplage thermomécanique a été rendue possible grâce à la résolution locale de l'ensemble des équations d'équilibres par la méthode des éléments finis.

Nous allons développer ce point au cours du paragraphe suivant.

2.4 Présentation de FORGE2[®]

Le code FORGE2[®] est un code de simulation numérique par éléments finis développé au CEMEF. Il s'agit d'un code 2D (déformation plane ou axisymétrique) développé initialement pour simuler la mise en forme à chaud des métaux (version viscoplastique) et à froid (version élasto-viscoplastique). Le logiciel a ensuite été étendu à l'étude d'autres matériaux (dont les polymères) ainsi qu'à d'autres types de sollicitation. La résolution temporelle sur laquelle est basé le code FORGE2[®] est de type incrémental et suit une formulation de type Lagrangien réactualisé. Le maillage est modifié automatiquement pour éviter les dégénérescences. Le choix que nous avons fait quant à la loi de comportement nous autorise à utiliser la version viscoplastique de FORGE2[®]. La description des grandeurs rhéologiques du matériau y est basée sur la loi de comportement de NORTON-HOFF écrite sous sa forme tensorielle :

$$\underline{\underline{s}} = 2K(T, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, \dots) \left(2\underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} : \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \right)^{\frac{m-1}{2}} \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \quad (\text{IV - 30})$$

Etant donné qu'il n'y a pas de puissance dissipée réversible, comme cela est le cas pour une loi de comportement élastique, la thermodynamique montre que la loi de Norton-Hoff dérive d'un potentiel différentiable. Cela signifie qu'il existe une fonction $\varphi_{\text{L.C.}}$ de $\underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}}$ telle que :

$$\underline{\underline{s}} = \frac{\partial \varphi_{\text{L.C.}}}{\partial \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}}} \quad (\text{IV - 31})$$

Le potentiel de Norton-Hoff vaut :

$$\varphi_{\text{L.C.}} = \varphi_{\text{N-H}}(\underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}}) = \frac{K}{m+1} \left(2\underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} : \underline{\underline{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}} \right)^{\frac{m+1}{2}} \quad (\text{IV - 32})$$

Nous avons vu précédemment que la formulation forte du problème mécanique comporte 9 inconnues : 3 en vitesses et 6 en contraintes. Compte tenu du fait qu'en mise en forme des matériaux (ce à quoi était dédié à l'origine le logiciel FORGE2[®]), les conditions aux limites sont exprimées en vitesse et que l'évolution géométrique est un résultat important du calcul, il faut nécessairement conserver les inconnues en vitesse. La formulation mixte vitesse – contrainte est très lourde. C'est pourquoi on lui préfère généralement la formulation mixte vitesse – pression qui permet de réduire le nombre d'inconnues à déterminer. Elle est couramment employée en mécanique des fluides. La formulation employée dans la version du code FORGE2[®] que nous avons utilisée est encore plus économique. Il s'agit d'une formulation en vitesses. Mais comme nous allons le voir, le gain en temps de calcul est obtenu au détriment de quelques difficultés liées à l'incompressibilité.

2.4.1 Formulation en vitesse

L'approche utilisée dans la version V2.6 viscoplastique de FORGE2[®] pour faire disparaître la variable pression du problème mécanique, consiste à employer une méthode de résolution par pénalisation. Cela permet en effet de rendre la résolution moins coûteuse en temps de calcul. Par contre, pour limiter les erreurs commises dans le cadre de cette formulation en vitesse, il est nécessaire de supposer que le matériau admet une certaine compressibilité visqueuse. Pour cela, on pose :

$$\operatorname{div} \underline{\mathbf{v}} = -\frac{1}{\rho_p} \mathbf{p} \approx 0 \quad (\text{IV - 33})$$

soit après réarrangement des termes :

$$\mathbf{p} = -\rho_p (\operatorname{div} \underline{\mathbf{v}}) \quad (\text{IV - 34})$$

où ρ_p est un coefficient de pénalisation numérique.

Le système (IV – 16) correspondant à la formulation faible mixte en vitesse – pression du problème mécanique se résume alors à l'unique équation :

$$\begin{aligned} \forall \underline{\mathbf{v}}^* \in \mathbf{V}_q^0, \int_{\Omega} \underline{\underline{\mathbf{S}}} : \underline{\underline{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}}}^* dV + \int_{\Omega} \rho_p \operatorname{div} \underline{\mathbf{v}} \operatorname{div} \underline{\mathbf{v}}^* dV - \int_{\partial\Omega_c} \underline{\boldsymbol{\tau}} \cdot \underline{\mathbf{v}}^* dS \\ - \int_{\partial\Omega} \underline{\mathbf{T}}^d \cdot \underline{\mathbf{v}}^* dS = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV - 35})$$

La fonctionnelle Φ_p associée s'écrit :

$$\Phi_p(\underline{\mathbf{v}}) = \int_{\Omega} \varphi_{N-H} dV + \int_{\partial\Omega_c} \varphi_{\text{frot}} dS - \int_{\partial\Omega_T} \underline{\mathbf{T}}^d \cdot \underline{\mathbf{v}} dS + \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\rho_p}{2} (\operatorname{div} \underline{\mathbf{v}})^2 dV}_{\text{Terme de pénalisation}} \quad (\text{IV - 36})$$

La valeur donnée à ρ_p détermine l'influence du terme de pénalisation.

Lorsque ρ_p tend vers l'infini, la solution tend vers la solution du problème mixte vitesse – pression. Désormais, résoudre le problème revient à déterminer le champ de vitesse $\underline{\mathbf{v}}$, qui vérifie la relation (IV –35) ou encore qui minimise la relation (IV - 36). Dans la pratique, ρ_p est adimensionnalisé à l'aide d'une expression du type :

$$\rho_p = \rho \cdot K(\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}, T, \dots) \quad (\text{IV - 37})$$

où ρ est un coefficient numérique très grand de l'ordre de 10^5 à 10^7 .

2.4.2 Discrétisation par éléments finis

Afin de résoudre les différentes équations caractéristiques, le logiciel FORGE2® utilise la méthode des éléments finis dont le principe repose sur la discrétisation spatiale du domaine Ω étudié.

2.4.2.1 Discrétisation spatiale de l'équilibre mécanique

Nous nous limitons dans cette étude à la simulation de tests présentant une symétrie axiale, ce qui rend le problème bidimensionnel. Le domaine Ω représentant l'éprouvette est discrétisé à l'aide d'éléments isoparamétriques (de type triangle quadratique) pour interpoler la vitesse \underline{v} , c'est-à-dire que l'on utilise les mêmes fonctions d'interpolation N pour les coordonnées d'espace et pour la vitesse. Cela se traduit en termes mathématiques par les équations :

- Vecteur position :

$$\underline{x}_h = \sum_{k=1}^{\text{Nbnoeuds}} N_k \underline{X}_k \quad (\text{IV} - 38)$$

- Vecteur vitesse :

$$\underline{v}_h = \sum_{k=1}^{\text{Nbnoeuds}} N_k \underline{V}_k \quad (\text{IV} - 39)$$

- Pression :

$$p_h = \sum_{l=1}^{\text{Nbpre}} \bar{N}_l P_l \quad (\text{IV} - 40)$$

où Nbnoeuds est le nombre de nœuds de l'élément. Nbpre est le nombre de points d'interpolation de la pression. \underline{X}_k est le vecteur des coordonnées du nœud k . \underline{V}_k est le vecteur vitesse au nœud k . P_l est la pression au point l . L'indice h est destiné à bien différencier dans la suite la formulation discrète (éléments finis) de la formulation continue.

Les éléments de discrétisation employés par la version viscoplastique de FORGE2[®] utilisée sont des triangles à 6 nœuds de type P2P0 (Figure IV - 4).

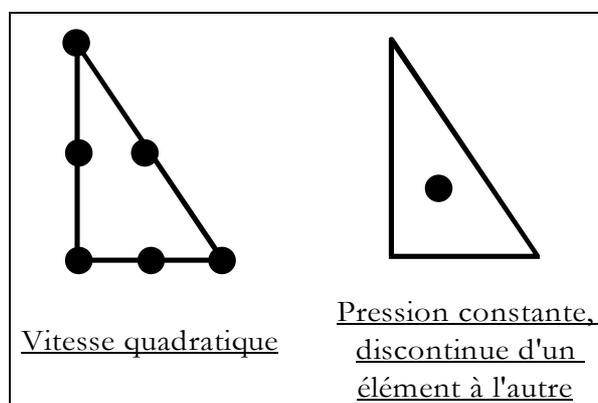


Figure IV - 4 : Eléments 2D isoparamétriques de type P2P0.

Ces éléments sont de classe C^0 (Figure IV - 5). Cela signifie que les grandeurs définies en leurs nœuds, u_i , sont continues, de dérivée $\partial u/\partial t$ continue sur chaque côté, mais que $\partial u/\partial n$ est discontinue.

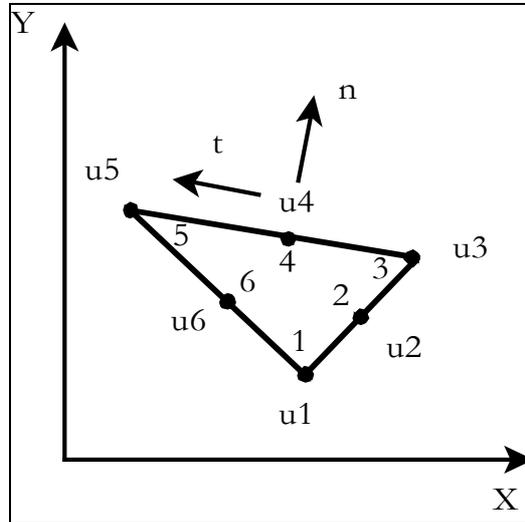


Figure IV - 5 : Élément de classe C^0 [7].

La pression, quant à elle, est constante sur l'élément et donc discontinue sur l'ensemble du domaine.

Formulation discrète de l'équilibre mécanique

Le tenseur des vitesses de déformation s'exprime en fonction du gradient du champ de vitesse et de son transposé à l'aide de la relation :

$$\underline{\dot{\epsilon}}_h = \frac{1}{2}(\text{grad} \underline{v}_h + \text{grad}^T \underline{v}_h) \tag{IV - 41}$$

En introduisant un opérateur B, construit à partir des dérivées des fonctions d'interpolation par rapport aux coordonnées nodales, on obtient la forme condensée [18] :

$$\underline{\dot{\epsilon}}_h = \sum_{k=1}^{N_{\text{noeuds}}} B_k \underline{V}_k \tag{IV - 42}$$

Pour obtenir la formulation discrète de l'équilibre mécanique, il suffit d'exprimer la fonctionnelle associée au problème mécanique continu faible en vitesse (IV – 36) en fonction des valeurs nodales de la vitesse, sur le domaine discrétisé Ω_h . Dans ce cas, en utilisant l'opérateur B et les fonctions d'interpolations définies de (IV – 38) à (IV –40) et en introduisant les expressions discrètes φ_{N-H_h}

et $\varphi_{\text{frot h}}$ des potentiels définis respectivement en (IV - 32) et en (IV - 21), la formulation variationnelle discrète consiste à déterminer le champ de vitesse nodale \underline{v}_h qui minimise la fonctionnelle définie par :

$$\begin{aligned} \Phi_h(\underline{v}_h) = & \frac{K}{m+1} \int_{\Omega_h} \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\text{Nbnoeuds}} \left(\frac{\partial N_k}{\partial X_j} v_{ik} + \frac{\partial N_k}{\partial X_i} v_{jk} \right) \right) \right)^{m+1} dV \\ & + \int_{\Omega_h} \rho \frac{K}{2} \left(\frac{\partial N_k}{\partial X_i} v_{ik} \right)^2 dV \\ & + \int_{\partial\Omega_{hc}} \frac{\alpha_f K}{p_f + 1} \left(\sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\text{Nbnoeuds}} (v_{ik} - v_{ik}^{\text{Out}}) N_k \right) \right)^{\frac{p_f+1}{2}} dS \\ & + \int_{\partial\Omega_{hT}} T_{di} \cdot v_{ik} \cdot N_k dS \end{aligned} \quad (\text{IV - 43})$$

que l'on peut encore écrire par analogie avec l'expression continue (IV - 36) sous la forme :

$$\Phi_h(\underline{v}) = \int_{\Omega_h} \varphi_{N-H_h} dV + \int_{\partial\Omega_{hc}} \varphi_{\text{frot h}} dS - \int_{\partial\Omega_{hT}} T^d \cdot \underline{v}_h dS + \int_{\Omega_h} \frac{\rho_p}{2} (\text{div } \underline{v}_h)^2 dV \quad (\text{IV - 44})$$

avec

$$\varphi_{N-H_h} = \frac{K}{m+1} \left(2 \underline{\dot{\varepsilon}}_h : \underline{\dot{\varepsilon}}_h \right)^{\frac{m+1}{2}} \quad (\text{IV - 45})$$

et

$$\varphi_{\text{frot h}} = \frac{\alpha_f K}{p_f + 1} \left\| \Delta \underline{V}_{gh} \right\|^{p_f+1} \quad (\text{IV - 46})$$

Les équations (IV - 43) et (IV - 44) doivent en outre être complétées par des conditions aux limites en vitesse, soit :

- pour les nœuds k appartenant à la frontière $\partial\Omega_{hc}$:

$$\left(\underline{v}_k - \underline{v}_k^{\text{Outil}} \right) \underline{\hat{n}} = 0 \quad (\text{IV - 47})$$

où $\underline{\hat{n}}$ représente la normale correspondant au nœud k qui appartient à la frontière discrétisée.

- pour les nœuds k appartenant à la frontière $\partial\Omega_{hV}$:

$$\underline{V}_k = \underline{V}_k^d \quad (IV - 48)$$

La convexité de la fonctionnelle discrète permet d'écrire que la condition nécessaire et suffisante pour obtenir son minimum est :

$$\mathbf{R}_k(\underline{v}_h) = \frac{d\Phi_h}{d\underline{V}_k} = 0 \quad (IV - 49)$$

avec $k=1, \dots, N_{bnoeuds}$. \mathbf{R}_k est le résidu du problème éléments finis correspondant au nœud k et $N_{bnoeuds}$ correspond au nombre de nœuds total auquel on soustrait ceux devant répondre aux conditions limites en vitesse.

Si l'on tient compte de l'expression du potentiel $\Phi_h(\underline{v})$ donnée en (IV - 44), les composantes nodales du résidu s'expriment sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_k = \frac{\partial\Phi_h(\underline{v}_h)}{\partial\underline{V}_k} = & \int_{\Omega_h} 2K \left(2\underline{\dot{\epsilon}}_h : \underline{\dot{\epsilon}}_h \right)^{\frac{m-1}{2}} \underline{\dot{\epsilon}}_h : \mathbf{B}_k dV \\ & + \int_{\partial\Omega_{hc}} \alpha_f K \left\| \Delta V_{gh} \right\|^{p_f-1} \Delta V_{gh} \mathbf{N}_k dS \\ & - \int_{\partial\Omega_{hT}} \mathbf{T}^d \cdot \mathbf{N}_k dS \\ & + \int_{\Omega_h} \rho_p (\text{div } \underline{v}_h) \text{tr}(\mathbf{B}_k) dV \end{aligned} \quad (IV - 50)$$

Pour résoudre le système non-linéaire (IV - 49), la méthode la plus puissante et la plus utilisée est probablement la méthode de Newton-Raphson décrite en détail dans la littérature [8].

Résolution des systèmes non linéaires par la méthode de Newton-Raphson

La méthode itérative de Newton-Raphson nécessite une initialisation de \underline{v} , soit $\underline{v}^{(0)}$. Si, au début de l'itération r , on suppose connues toutes les grandeurs à l'itération précédente (notées avec l'exposant $(r-1)$), une nouvelle approximation de \underline{v} s'obtient par :

$$\underline{v}^{(r)} = \underline{v}^{(r-1)} + \lambda_{NR} \Delta \underline{v}^{(r)} \quad (IV - 51)$$

L'introduction de (IV – 51) dans l'expression du résidu, suivie d'un développement en série de Taylor à l'ordre 1 conduit à :

$$\mathbf{R}^{(r)} = \mathbf{R}(\underline{\mathbf{v}}^{r-1} + \lambda_{\text{NR}} \Delta \underline{\mathbf{v}}^r) = \mathbf{R}^{(r-1)} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \underline{\mathbf{v}}}(\underline{\mathbf{v}}^{r-1}) \cdot \lambda_{\text{NR}} \Delta \underline{\mathbf{v}}^r \quad (\text{IV - 52})$$

La dérivée de \mathbf{R} est une matrice d'ordre k qui joue le rôle de la matrice de raideur (ou Hessien) et que nous noterons :

$$H_{kl} = \frac{dR_k}{dV_l} = \frac{d^2\Phi_h}{dV_k dV_l} \quad (\text{IV - 53})$$

avec $l=1, \dots, \text{Nbnoeuds}'$ et $k=1, \dots, \text{Nbnoeuds}'$. En égalant le second membre de l'expression (IV – 52), on obtient une approximation de l'incrément de vitesse :

$$\Delta \underline{\mathbf{v}}^{(r)} = -(\lambda_{\text{NR}} \mathbf{H}^{(r-1)})^{-1}(\underline{\mathbf{v}}^{(r-1)}) \quad (\text{IV - 54})$$

λ_{NR} est un coefficient de descente optimisé de telle sorte que l'algorithme de résolution atteigne le champ de vitesse solution en un nombre minimum d'itérations. Des tests de convergence permettent de déterminer si, au cours des itérations, le champ calculé est suffisamment proche de la solution réelle. Dans l'affirmative, le champ de vitesse est pris comme solution.

Finalement, si on tient compte de la dépendance des différents termes du résidu vis-à-vis de la rhéologie et des variables mécaniques et thermiques, il est possible d'écrire l'équation caractéristique associée à la résolution du champ de vitesse (IV – 51) sous la forme condensée suivante :

$$\mathbf{R}(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}, \underline{\mathbf{X}}, \underline{\mathbf{V}}, \mathbf{T}, t) = 0 \quad (\text{IV - 55})$$

2.4.2.2 Discrétisation spatiale de l'équilibre thermique

Pour la résolution du problème thermique, on utilise la même discrétisation géométrique que celle présentée dans le paragraphe précédent. La méthode des éléments finis permet de transformer la relation (IV – 29) en un système de Nbnoeuds équations où les inconnues sont les températures aux nœuds du maillage.

Formulation semi-discrétisée de l'équilibre thermique

En introduisant le vecteur \underline{T}_h des températures nodales T_k , on écrit l'interpolation dans Ω de la température T sous la forme usuelle :

$$\underline{T}_h = \sum_{k=1}^{N_{\text{noeuds}}} N_k T_k \quad (\text{IV - 56})$$

Le choix des fonctions d'interpolation N comme fonctions tests permet d'exprimer la relation (IV – 29) à l'aide du système différentiel suivant :

$$C \frac{d\underline{T}_h}{dt} + K \underline{T}_h = F \quad (\text{IV - 57})$$

où C est la matrice de capacité telle que :

$$C_{ij} = \int_{\Omega_h} \rho c N_i N_j dV \quad (\text{IV - 58})$$

K est la matrice de conductivité avec :

$$K_{ij} = \int_{\Omega_h} k \text{grad} N_i \text{grad} N_j dV + \int_{\partial\Omega_{hl}} (h_{cv} + h_r) N_i N_j dS + \int_{\partial\Omega_{hc}} \alpha_c N_i N_j dS \quad (\text{IV - 59})$$

Le coefficient de rayonnement h_r est déterminé à partir des valeurs discrètes de la température en surface à l'aide de la relation :

$$h_r = \varepsilon^r \sigma^r (\underline{T}_h^2 + T_a^2) (\underline{T}_h + T_a) \quad (\text{IV - 60})$$

F contient les termes de source et de flux thermique :

$$F_j = - \int_{\Omega_h} \dot{q}_v N_j dV + \int_{\partial\Omega_{hc}} \phi_r N_i dS - \int_{\partial\Omega_{he}} Q_{e_h} N_j dS - \int_{\partial\Omega_{hc}} \alpha_c T_a N_j dS - \int_{\partial\Omega_{hl}} (h_{cv} + h_r) T_a N_j dS \quad (\text{IV - 61})$$

L'équation matricielle (IV – 57) présente plusieurs particularités :

- il s'agit d'une équation différentielle du premier ordre. Cela implique de choisir un schéma d'intégration pour obtenir la solution cherchée ;

- Le comportement du matériau du point de vue thermique peut être évalué selon deux options : si les caractéristiques thermiques du matériau (masse volumique, capacité calorifique et conductivité thermique) sont considérées comme constantes sur la gamme de température balayée par la sollicitation, le système (IV – 57) est linéaire et la résolution est immédiate. En revanche, si ces paramètres sont thermodépendants, les équations dérivant de l'équation de la chaleur discrétisée sur le domaine deviennent non linéaires. Ce dernier cas nécessite d'utiliser des méthodes de résolution spécifiques à ce type d'équation [10] ;

Parallèlement au problème mécanique, l'équation caractéristique du problème thermique peut s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$\mathbf{S}(\mathbf{P}, \bar{\varepsilon}, \underline{\mathbf{X}}, \underline{\mathbf{V}}, T, t) = 0 \quad (\text{IV} - 62)$$

2.4.2.3 Discrétisation temporelle de l'équilibre mécanique

Jusqu'à présent, les équations d'équilibre du problème mécanique ont été écrites à un instant t quelconque, le temps n'intervenant pas de manière explicite dans ces équations. Or, pour résoudre un problème instationnaire, il est nécessaire de résoudre les équations d'équilibre à chaque instant t . La résolution devra donc être incrémentale et la durée totale simulée devra être divisée en petits intervalles de temps Δt . Pour exprimer les variables de déformation, on utilise une formulation de type Lagrangien réactualisé. Ainsi, on résout le problème à un instant t sur la configuration correspondante Ω_t en supposant l'équilibre réalisé à l'instant précédent $t - \Delta t$. Connaissant le champ de vitesse pour la configuration Ω_t , la réactualisation de la configuration géométrique $\Omega_{t+\Delta t}$ et de la déformation à l'instant $t + \Delta t$ s'obtient à l'aide d'un schéma explicite de type **Euler** sous la forme :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{X}}(t + \Delta t) = \underline{\mathbf{X}}(t) + \underline{\mathbf{V}}(t) \cdot \Delta t \\ \bar{\varepsilon}(t + \Delta t) = \bar{\varepsilon}(t) + \dot{\bar{\varepsilon}}(t) \cdot \Delta t \end{cases} \quad (\text{IV} - 63)$$

Ce schéma est simple comparé à d'autres [9], mais requiert des pas de temps relativement petits, puisque l'on fait l'hypothèse que le champ de vitesse reste constant pendant l'intervalle de temps. De plus, les pertes de volume sont d'autant plus importantes que le pas de temps est grand. Cette méthode nécessite donc des petits pas de temps pour ne pas trop s'éloigner de la solution réelle. Si l'évolution de l'éprouvette pendant la déformation plastique conduit, à un instant donné, à une pénétration de la matière dans l'outil (cela peut être le cas en compression par exemple), la zone de contact est redéfinie par la projection orthogonale du volume de matériau qui tend à pénétrer dans

l'outil. On notera qu'il pourra en résulter des « pertes numériques de volume ». Par ailleurs, pour éviter que les nœuds de la surface libre du maillage ne pénètrent dans les outils, on adapte le pas de temps de telle façon qu'un seul nœud arrive en contact à chaque incrément.

2.4.2.4 Discrétisation temporelle de l'équilibre thermique

Le système différentiel (IV – 57) est résolu suivant un schéma de différences finies. La température T^t à l'instant t et sa dérivée \dot{T}^t par rapport au temps sont définies à l'aide des relations (t étant compris entre t et $t+\Delta t$) :

$$\begin{cases} T^t = \alpha_1 T^{t-\Delta t} + \alpha_2 T^t + \alpha_3 T^{t+\Delta t} \\ \dot{T}^t = (1-\gamma)\dot{T}^t + \gamma\dot{T}^{t+\Delta t} \\ \dot{T}^t = \frac{T^t - T^{t+\Delta t}}{\Delta t} \end{cases} \quad (\text{IV - 64})$$

Δt étant un pas de temps donné. Pour que le schéma soit du second ordre, on montre [10] que les coefficients α_1 , α_2 et α_3 doivent être reliés à l'aide des expressions :

$$\begin{cases} \alpha_1 = \alpha \\ \alpha_2 = \left(\frac{3}{2} - 2\alpha - \gamma \right) \\ \alpha_3 = \left(\alpha - \frac{1}{2} + \gamma \right) \end{cases} \quad (\text{IV - 65})$$

où α et γ sont des coefficients numériques choisis de façon à rendre la solution stable. Les principaux schémas proposés sont résumés dans le Tableau IV - 1 :

Schéma	α	γ
Lees	1/3	1/2
Dupont	1/4	1
Cranck-Nicholson	0	1
Implicite	0	3/2

Tableau IV - 1 : Principaux schéma d'intégration temporelle du problème thermique.

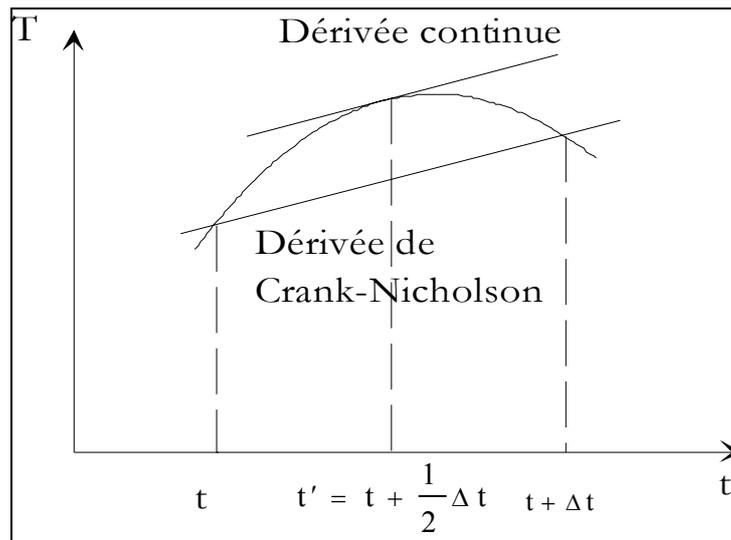


Figure IV - 6 : Schéma de Crank-Nicholson.

Dans la version de FORGE2[®] que nous avons utilisée, le schéma d'intégration temporelle du système sélectionné est par défaut un schéma de **Crank-Nicholson** (Figure IV - 6). Les expressions de la température et de sa première dérivée sont alors :

$$\begin{cases} T^{t'} = \frac{1}{2}(T_{t+\Delta t} + T_t) \\ \dot{T}^{t'} = \frac{dT}{dt} = \frac{(T_{t+\Delta t} - T_t)}{\Delta t} \end{cases} \quad (\text{IV - 66})$$

Si le système est non-linéaire, pour éviter une résolution itérative lourde, une linéarisation des matrices C, K et F est généralement effectuée [11]. Dans le cas d'un schéma d'intégration de Crank-Nicholson, et en supposant que les pas de temps sont constants, on obtient pour une matrice A quelconque choisie parmi C, K et F :

$$A^* = \frac{3}{2}A_t - \frac{1}{2}A_{t-\Delta t} \quad (\text{IV - 67})$$

Le système (IV - 54) devient alors :

$$C^* \frac{(T_{t+\Delta t} - T_t)}{\Delta t} + K^* \frac{1}{2}(T_{t+\Delta t} + T_t) = F^* \quad (\text{IV - 68})$$

soit

$$\left(C^* + K^* \frac{\Delta t}{2} \right) T_{t+\Delta t} = F^* \Delta t + C^* T_t - K^* \frac{T_t}{2} \quad (\text{IV - 69})$$

Le système (IV – 64) est alors résolu par une méthode directe de **Crout** en $T_{t+\Delta t}$.

2.4.2.5 Synthèse du couplage thermo-mécanique dans FORGE2®

Nous avons vu dans ce qui précède que le couplage thermomécanique peut avoir plusieurs origines. Du point de vue de l'éprouvette, la résolution du problème de couplage entre les équations thermiques et mécaniques peut se faire de plusieurs manières. Il est tout à fait envisageable de résoudre l'ensemble des équations de façon simultanée [12], mais cela est particulièrement coûteux en temps de calcul et pas toujours nécessaire. Il est plus courant de découpler les équations et de les résoudre séparément, soit en faisant des itérations jusqu'à convergence à chaque incrément [13], soit sans itération [10] : le champ de température, connu au début de chaque incrément, est introduit dans l'équation thermomécanique et le champ de vitesse déterminé par la solution de ce système non linéaire est introduit à son tour pour calculer la température à l'incrément suivant.

Finalement, la résolution incrémentale du couplage thermomécanique peut s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{R}(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t, \underline{\mathbf{X}}^t, \underline{\mathbf{V}}^t, T^t) = 0 \\ \mathbf{S}(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t, \underline{\mathbf{X}}^t, \underline{\mathbf{V}}^t, T^t, T^{t'}, \dot{T}^t, \dot{T}^{t'}, \underline{\mathbf{V}}^{t-\Delta t}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{t-\Delta t}, T^{t-\Delta t}, \dot{T}^{t-\Delta t}) = 0 \end{cases} \quad (\text{IV} - 70)$$

L'algorithme du couplage thermomécanique tel qu'il est résolu au sein de FORGE2® est représenté schématiquement sur la Figure IV - 7.

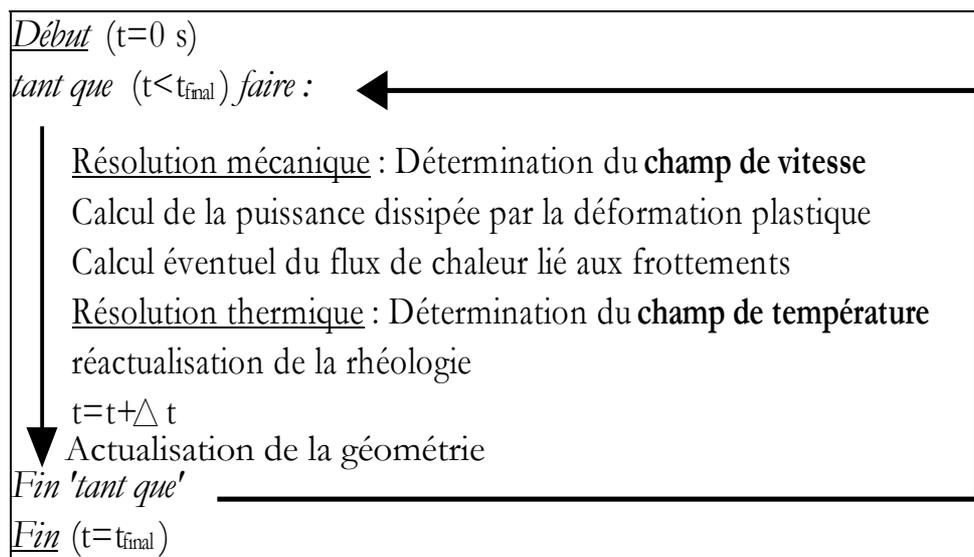


Figure IV - 7 : Algorithme du solveur de FORGE2®.

2.4.2.6 Calcul des grandeurs globales caractéristiques des essais rhéologiques

La résolution par éléments finis permet de connaître, à chaque instant t , les valeurs de toutes les variables internes $q = \{\bar{\epsilon}, \underline{X}, \underline{V}, T \dots\}$ qui caractérisent localement la déformation plastique. Ceci permet d'évaluer certaines grandeurs globales, M^c , caractéristiques des tests mécaniques comme la force dans le cas du test de traction, de poinçonnement ou de Poids Tombant Instrumenté .

Dans le logiciel que nous utilisons, les efforts F^c sont calculés sur les éléments en contact avec l'outillage. On réalise donc une approximation des grandeurs globales à partir des valeurs nodales des contraintes à un instant t .

3 Validation du modèle direct

Le logiciel FORGE2[®] est développé depuis plusieurs années et a donné lieu à de nombreuses validations. Nous avons toutefois vérifié sa pertinence sur quelques essais. Nous avons pour cela utilisé les essais de traction dont les échauffements en cours de mesure sont connus. Les conditions « opératoires » retenues pour la simulation ont été choisies de façon à reproduire fidèlement les conditions expérimentales.

Les expériences retenues pour ce test correspondent aux essais de traction « moyennes vitesses » réalisées sur le polyéthylène et sur le polycarbonate (chapitre II). Les données thermiques expérimentales proviennent des mesures effectuées par thermographie infrarouge (chapitre II).

Pour obtenir des résultats fiables avec un code de calcul éléments finis, il est indispensable d'introduire dans le code des informations aussi précises que possible sur les caractéristiques du matériau, des outils (mors) et des interfaces outil/éprouvette et éprouvette/environnement. Pour cela, la structure de l'information du logiciel FORGE2[®] rassemble, outre la description de l'outillage, la rhéologie du matériau, un ensemble de données générales concernant les données thermiques et tribologiques relatives au système étudié. Cela suppose :

- de déterminer précisément les coefficients de transferts thermiques (par convection et par rayonnement). Comme indiqué en Annexe 1, en l'absence de données précises, ces coefficients peuvent être estimés moyennant quelques approximations ;
- d'introduire une loi de comportement qui soit capable de reproduire le comportement thermomécanique des polymères étudiés.

Le Tableau IV - 2 regroupe l'ensemble des données rhéologiques et thermiques qui ont été associées à la loi de comportement de G'Sell pour chacun des deux polymères. Les coefficients rhéologiques ont été ajustés à l'aide d'une méthode laborieuse d'essais/erreurs en partant des paramètres déterminés au chapitre II. La difficulté majeure réside dans la détermination du coefficient de sensibilité à la vitesse du polyéthylène. Le critère d'ajustement est l'évolution de la force.

		Polycarbonate	Polyéthylène	
Rhéologie	Loi de comportement « polymères solides »			
	$\bar{\sigma} = K \exp\left(\frac{a}{T}\right) (1 - \exp(-w \cdot \bar{\epsilon})) (1 + b \cdot \exp(-c \cdot \bar{\epsilon})) \exp(h \cdot \bar{\epsilon}^n) \bar{\epsilon}^m$			
	K =	2691 kPa	4819 kPa	
	a =	774 K	466 K	
	w =	30	32,7	
	b =	2	0	
	c =	15	0	
	h =	1,7	0,59	
	n =	2	2	
	m =	0,037	0,096	
	Température initiale = 23 °C			
Tribologie		Contact outil/éprouvette : collant, bilatéral Pas de frottement		
Thermique	<i>Matériau</i>	Masse volumique	1,2.10 ⁻⁶ kg.mm ⁻³	0,9.10 ⁻⁶ .kg.mm ⁻³
		Conductivité thermique	200 kg.mm.s ⁻³ .K ⁻¹	330 kg.mm.s ⁻³ .K ⁻¹
		Capacité calorifique	1,17.10 ⁹ mm ² .K ⁻¹ .s ⁻²	2,5.10 ⁹ mm ² .K ⁻¹ .s ⁻²
		Efficacité	1	
	<i>Interface Outil/Éprouvette</i>	Coefficient de transfert	10 ³ W.K ⁻¹ .mm ⁻²	
		Température (outil)	23 °C	
		Température (interface)	23 °C	
	<i>Interface Matériau/Face libre</i>	Effusivité (outil)	12400 J.°C ⁻¹ .mm ⁻² s ^{-1/2}	
		Coef. de transf. global	17,3 W.K ⁻¹ .mm ⁻²	
		Température (ambiante)	23 °C	
	Emissivité	0,9		
		Convection libre		

Tableau IV - 2 : Informations nécessaires à FORGE2® pour la simulation.

3.1 Validation mécanique

Comme le prouve la Figure IV - 8, les simulations pour le polycarbonate et le polyéthylène montrent un bon accord avec l'expérience du point de vue de l'évolution de la force en fonction du déplacement (Figure IV - 8a et b). Seuls la phase élastique et la limite d'élasticité semblent, dans le cas du polycarbonate, légèrement surestimés aux plus hautes vitesses par la simulation, le reste de la courbe étant quasiment équivalent à l'expérience. Compte tenu du caractère instable du crochet, on peut admettre que ces résultats sont corrects.

Les résultats sont également très bons en ce qui concerne l'évolution géométrique des éprouvettes au cours de la déformation. Les profils simulés coïncident parfaitement avec les profils expérimentaux aussi bien avant et pendant l'amorçage de la striction (Figure IV - 9a et Figure IV - 9b). Il en va de même après sa propagation (Figure IV - 9c).

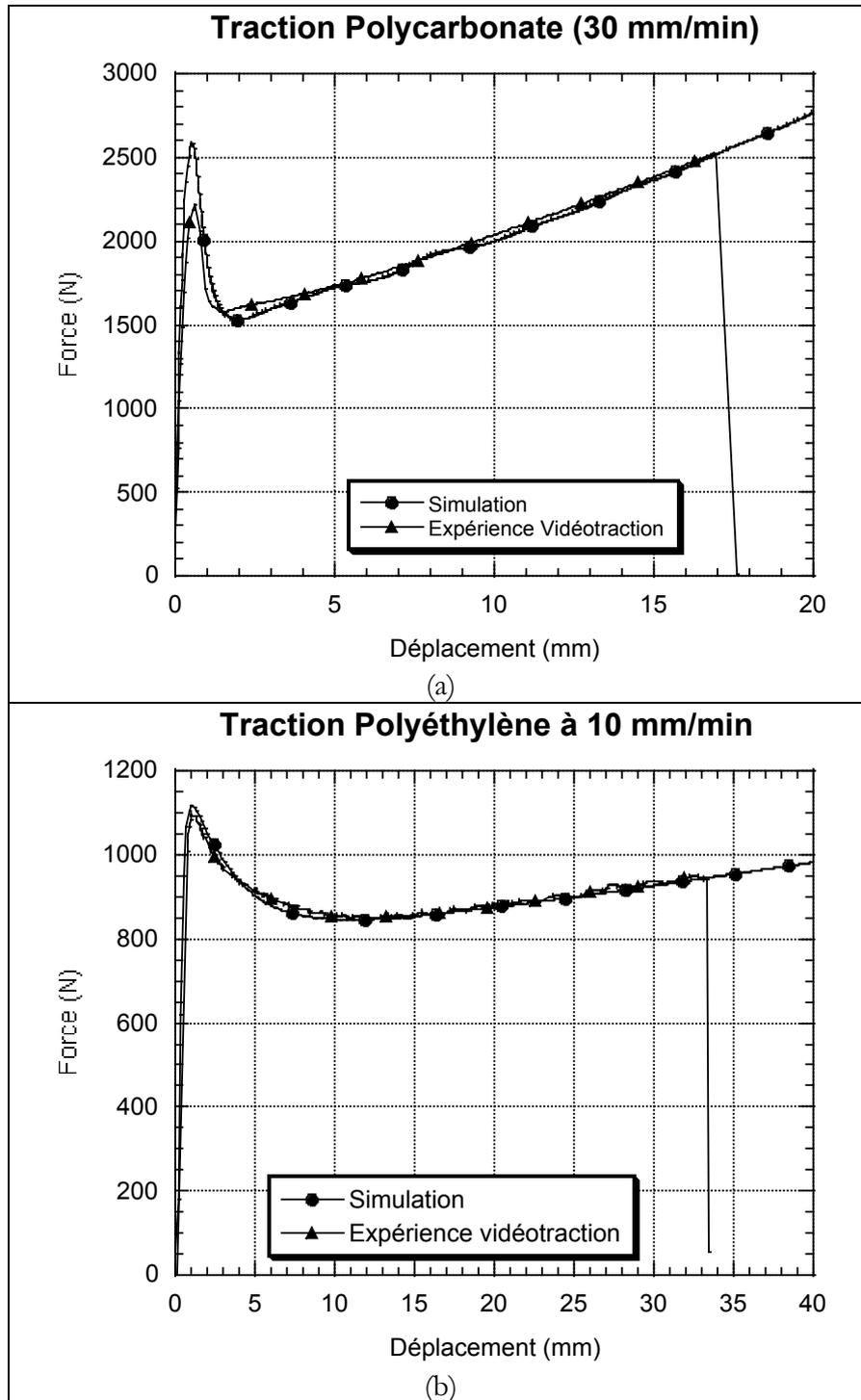


Figure IV - 8 : Comparaison des forces expérimentales et simulées à l'aide de FORGE2® pour le polyéthylène et le polycarbonate (essais à vitesse de traverse constante).

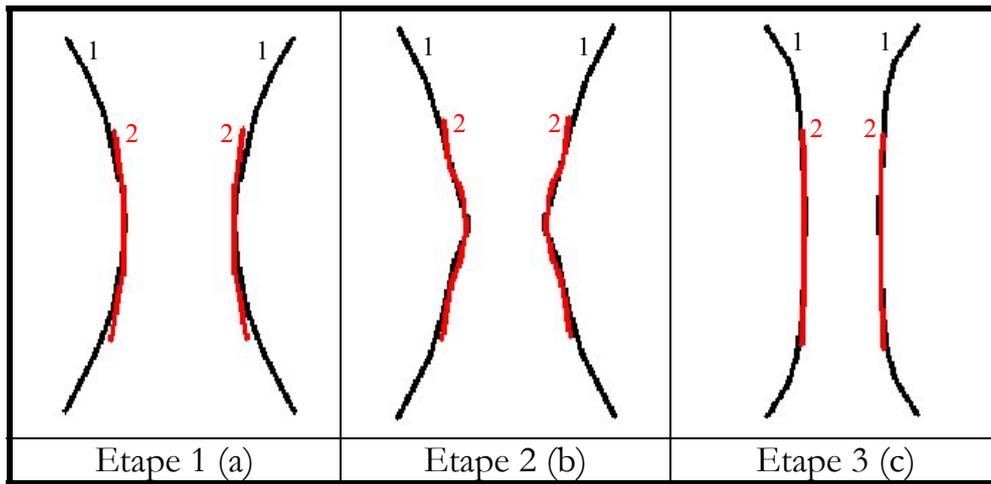


Figure IV - 9 : Comparaison des profils expérimentaux (1) et simulés (2) pour un essai de traction à 30 mm/min sur du polycarbonate.

Les résultats étant probant en ce qui concerne l'évolution des variables mécaniques, l'étape suivante consiste à valider le module thermique du logiciel en se basant sur les autoéchauffements déduits des mesures par thermographie infrarouge.

3.2 Validation thermique

Comme l'indique Figure IV - 10, la courbe simulée représentant l'évolution de la température maximale au cœur d'une éprouvette de polycarbonate en fonction du temps a une allure correcte.

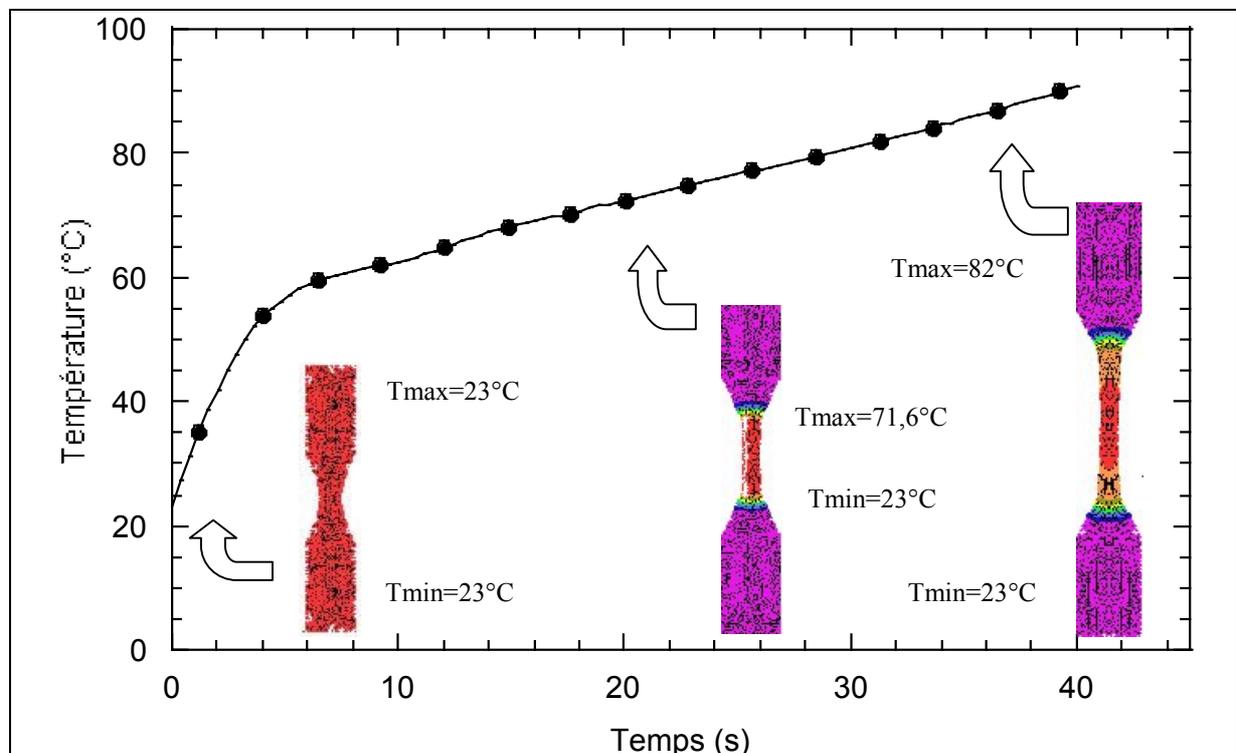


Figure IV - 10 : Evolution de la température simulée pour un essai de traction sur du polycarbonate à 30 mm/min.

On retrouve notamment l'absence de plateau lié au durcissement structural important du polycarbonate. En outre, conformément aux observations expérimentales, les *maxima* de température sont atteints au cœur de la zone strictionnée.

Si l'on se place à l'instant où l'éprouvette rompt expérimentalement (instant que le code de simulation n'est pas en mesure de prédire), on s'aperçoit que pour un essai de traction conduisant à des vitesses de déformation généralisées de l'ordre de $5 \cdot 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, FORGE2® prédit, dans le cas du polycarbonate, une température à cœur d'environ 82°C .

Un grossissement de la zone de diamètre minimal (Figure IV - 11) à ce même instant révèle la présence d'un gradient thermique significatif de l'ordre de 4°C le long du raton de l'éprouvette. Ceci est en accord avec les observations, en particulier l'augmentation de la température mesurée au moment du pivotement de la face rompue de l'éprouvette.

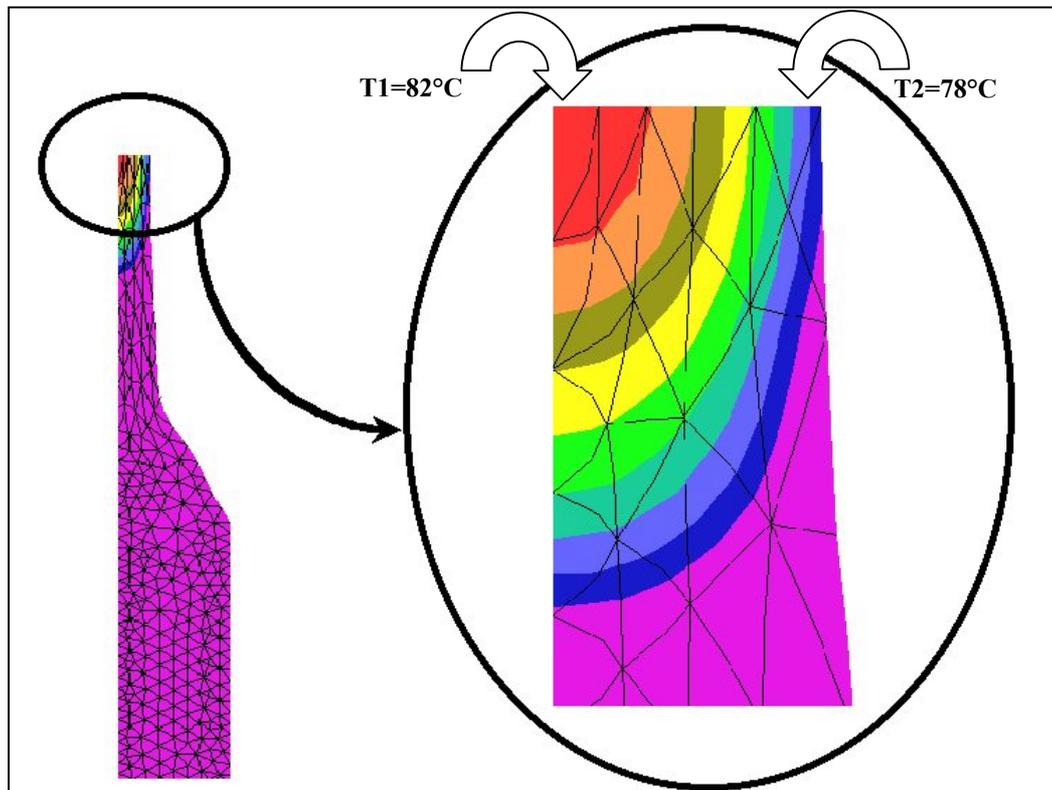


Figure IV - 11 : La simulation révèle la présence d'un gradient thermique de 4°C à l' « instant de la rupture » lors de l'étirage d'un polycarbonate à 30 mm/min .

Cet accord qualitatif avec l'expérience doit toutefois être tempéré au regard de l'aspect quantitatif. La température maximale simulée demeure en effet supérieure (Tableau IV - 3) en moyenne aux températures relevés expérimentalement (environ vingt degrés dans le cas du polycarbonate).

Polycarbonate			
Vitesse de traverse (mm/min)	Température maximale expérimentale (°C)	Température maximale simulée (°C)	Ecart
10	46	~ 55	~ 10
30	60	~ 80	~ 20
100	70	~ 100	~ 30

Tableau IV - 3 : Comparaison des températures expérimentales et simulées pour plusieurs vitesses de traction dans le cas du polycarbonate.

Le calcul thermique dans FORGE2® suppose par défaut que tout le travail mécanique est transformé en chaleur [$f=1$ dans l'équation (IV – 23)]. Or, certaines études [14] ont montré que la part du travail transformé en chaleur serait plutôt de l'ordre de 90%. Plus récemment, d'autres études [15, 16] ont permis de mettre en évidence que, dans le cas du polycarbonate, l'énergie interne stockée et restituable, serait de l'ordre de 50 %. Cela sous-entend que seul 50% du travail mécanique contribueraient à l'autoéchauffement du polycarbonate en cours de traction. Ceci peut expliquer la surestimation de la simulation par rapport à l'expérience. Bisilliat [1] a montré que cette correction du facteur d'efficacité au sein du code de calcul permettait toujours dans le cas du polycarbonate d'éviter un adoucissement « artificiel » auquel conduisait initialement la simulation pour des vitesses de sollicitation élevées. Pour notre part, une étude numérique de sensibilité de la température au paramètre d'efficacité, basée sur les résultats de thermographie infrarouge (Ch. II) nous a permis d'estimer ce paramètre aux alentours de 0,7. Cela sous-entend que, tout autre paramètre étant posé, il faudrait que f soit égal à 0,7 pour que les simulations reproduisent les températures observées expérimentalement.

Mais la surestimation peut avoir d'autres origines :

- Une mauvaise détermination du coefficient de thermodépendance peut entraîner des écarts importants sur l'estimation des autoéchauffements.
- Le fait de ne pas prendre en compte la thermodépendance des coefficients rhéologiques eux-mêmes (chapitre II) peut conduire à des valeurs de température erronées dans les simulations les plus extrêmes (grandes déformations et grandes vitesses).
- Comme le prouve la Figure IV - 12, une indétermination sur les coefficients d'échanges thermiques (convection, radiation, conduction) peut également être à l'origine d'un écart entre les températures simulées et effectives.

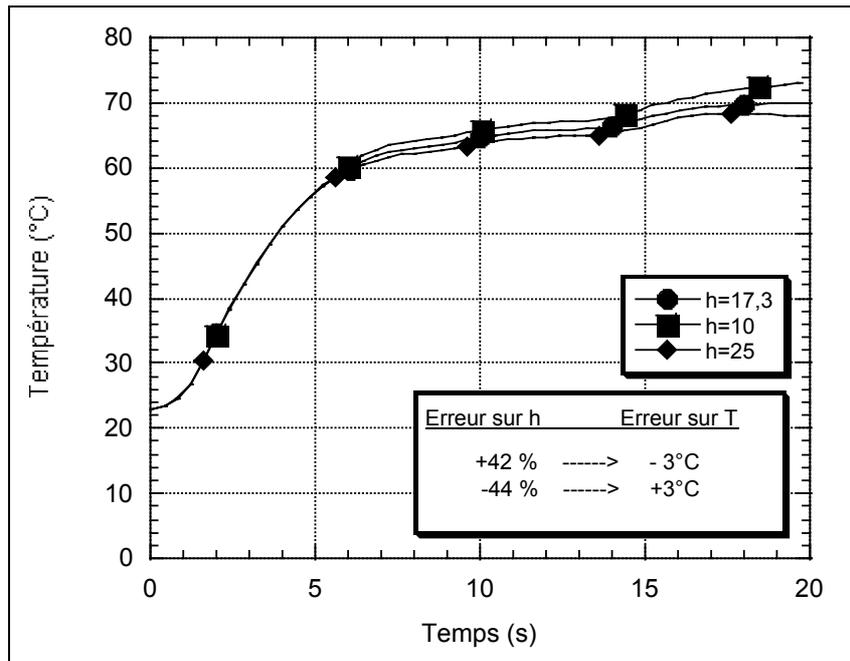


Figure IV - 12 : Influence du coefficient d'échange thermique global sur l'évolution de la température (traction du polycarbonate à 100 mm/min)

A toutes ces raisons peut s'ajouter le fait que l'on utilise la version viscoplastique de FORGE2[®], celle-ci autorisant un dégagement de chaleur aux très faibles déformations. En effet, toute la déformation est alors traitée dans un formalisme viscoplastique, y compris la phase de déformation élastique. Après vérification, il semble que cela soit négligeable.

Il faut de plus conserver à l'esprit que les mesures expérimentales sont elles-aussi entachées d'incertitudes : elles sont, d'une part, le résultat d'une extrapolation dont la précision peut être estimée à plus ou moins 5°C et d'autre part, le résultat d'une mesure moyenne sur une certaine profondeur de pénétration. Nous pouvons, malgré tout, penser que le code de calcul surestime les autoéchauffements si f est posé à 1. Nous concluons que, compte tenu du niveau de validation du code, nous sommes assez confiant quant à son algorithme. Par contre, il est évident que la qualité des données thermiques utilisées conditionne la précision de l'identification. En l'état actuel de nos connaissances, nous ne pouvons que signaler l'importance de ces coefficients et en particulier celle de l'efficacité.

La simulation d'essais rhéologiques à l'aide du logiciel FORGE2[®] nous paraît donc suffisamment robuste (à cette restriction près) pour servir de modèle direct au sein du logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur. Nous allons maintenant présenter le module d'optimisation que nous avons couplé au logiciel FORGE2[®].

4 Présentation du modèle inverse

L'algorithme de minimisation de type Gauss-Newton développé au cours du chapitre précédent (Ch. III, § 3.3.4.1.) a été appliqué au modèle direct décrit ici. Comme il l'a été indiqué par ailleurs, le point déterminant du modèle inverse réside dans la détermination de la matrice de sensibilité [S], dont les composantes sont les dérivées des grandeurs observables par rapport aux paramètres à identifier. Les termes de cette matrice sont déterminés à l'aide de la méthode des différences finies explicitée en détail dans le chapitre précédent (Ch. III, § 3.3.4.4.a) et qui consiste à calculer « numériquement » les dérivées. Un algorithme de recherche linéaire inspiré de la méthode de la section d'or (chapitre III, § 3.5.1) lui a été adjoint.

La Figure IV - 13 permet de relier chacune des étapes rencontrées au cours du processus d'identification.

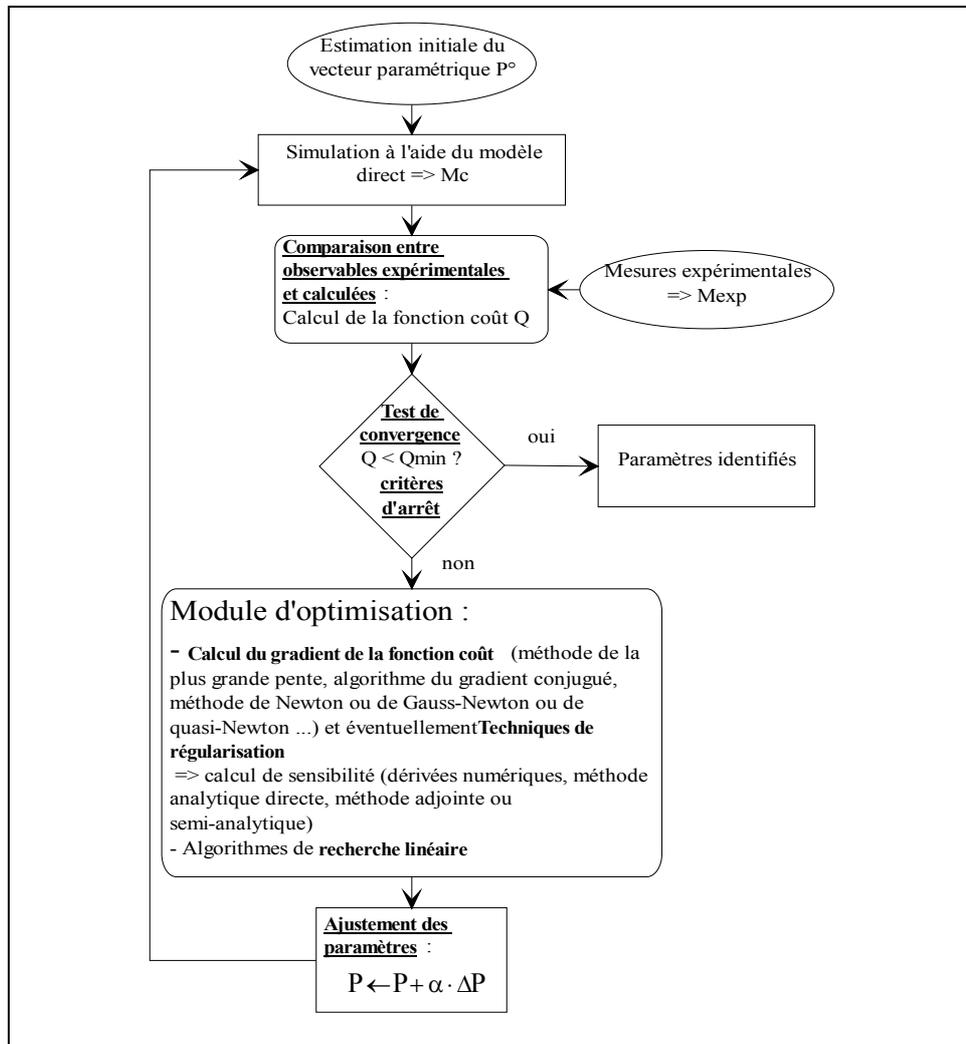


Figure IV - 13 : Schéma d'identification global

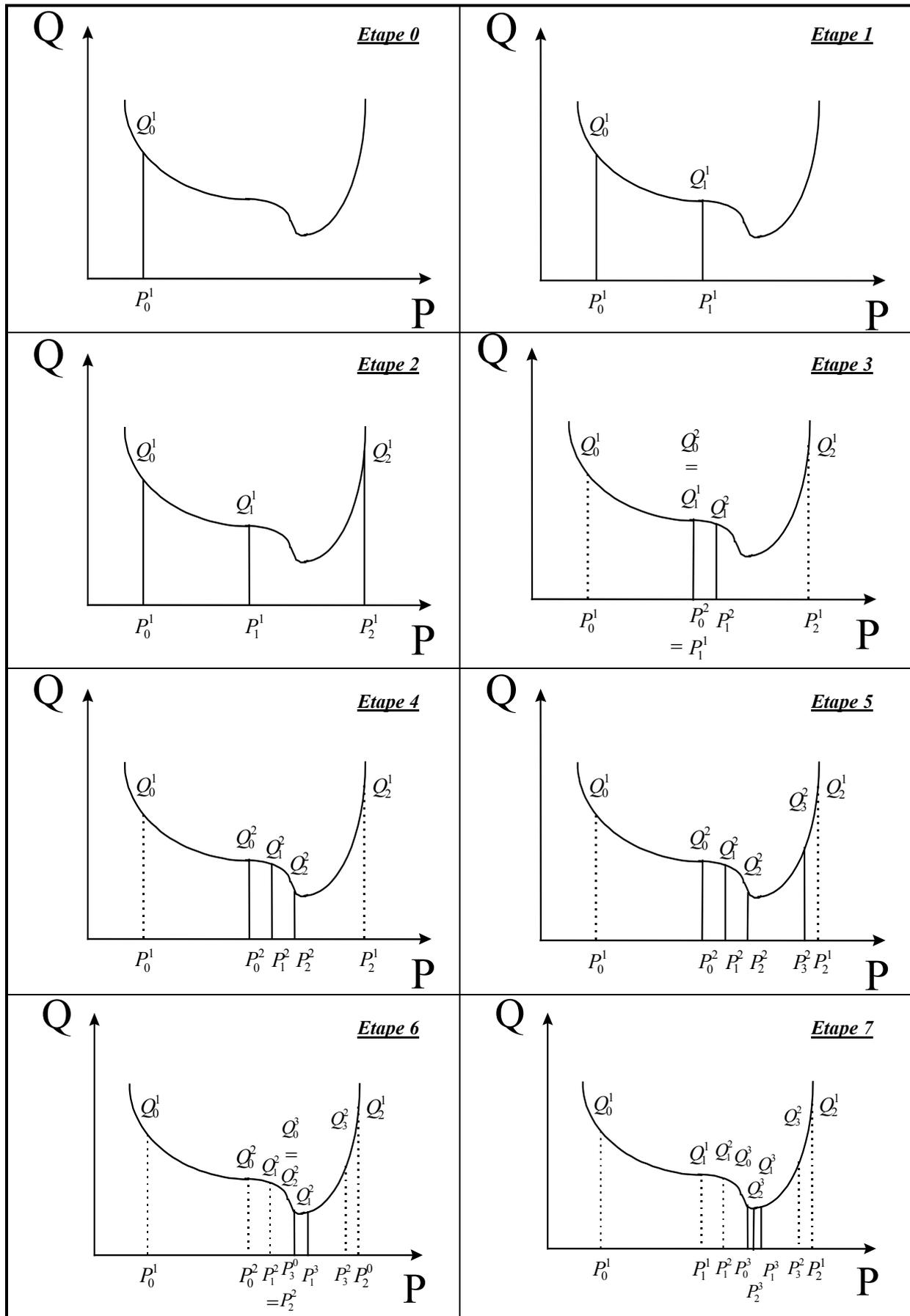


Figure IV - 14 : Didacticiel sur l'algorithme de minimisation.

Le processus de recherche linéaire développé dans le cadre de ce travail tente d'optimiser la direction de descente ΔP issue du système (III – 20) dont la résolution a été développée dans le chapitre III. L'algorithme employé consiste à rechercher le minimum de la fonction coût dans le sens initial indiqué par l'algorithme de Gauss-Newton soit en diminuant l'amplitude de variation à imposer aux paramètres (amélioration de type 1) soit en l'augmentant (amélioration de type 2). Si l'algorithme d'optimisation stagne avant d'atteindre une valeur suffisamment faible de la fonction coût (valeur imposée par l'utilisateur), la recherche est effectuée dans le sens opposé (amélioration de type 3). Cette situation peu probable est parfois rencontrée lorsque la fonction coût est très proche du minimum ou lorsque son gradient n'est pas calculé avec suffisamment de précision. Plusieurs critères d'arrêt ont été prévus en cas de stagnation de l'algorithme, c'est-à-dire lorsqu'il n'y a plus aucune amélioration possible ou si les dernières variations apportées au vecteur paramétrique sont infinitésimales. Un autre critère consiste à stopper l'identification en cas de divergence de l'algorithme. L'origine d'un tel problème provient généralement du modèle direct : non convergence au niveau d'une itération de Newton-Raphson.

Afin de mieux comprendre le cheminement de cet algorithme, imaginons une fonction coût « idéale » (Figure IV - 14) et suivons pas-à-pas le processus de minimisation. Pour simplifier, nous nous plaçons ici dans le cas simple où l'on identifie un paramètre unique. Dans ce qui suit, les diverses variables sont décrites à l'aide de la nomenclature X_α^β où β correspond au numéro de l'itération de minimisation courante et α à celui des sous-itérations liées aux améliorations.

• **Etape 0 :**

Itération	1
Amélioration	aucune
Paramètre d'amélioration	aucun
Valeur du paramètre	P_0^1
Fonction coût	Q_0^1

Commentaire : Il s'agit ici de la configuration de base. Le programme d'optimisation commence par déterminer la variation ΔP^1 supposée diminuer la fonction coût.

Etape 1 :

Itération	1
Amélioration	1
Paramètre d'amélioration	$\alpha_1^1 \leftarrow 1$
Valeur du paramètre	$P_1^1 \leftarrow P_0^1 + \alpha_1^1 \cdot \Delta P^1$
Fonction coût	Q_1^1

Test : $Q_1^1 < Q_0^1$

Conclusion : La solution étant meilleure, on tente la méthode d'amélioration numéro 2.

Actualisation : $\alpha_2^1 \leftarrow 2$

• **Etape 2 :**

Itération	1
Amélioration	2
Paramètre d'amélioration	$\alpha_2^1 \leftarrow 2$
Valeur du paramètre	$P_2^1 \leftarrow P_0^1 + \alpha_2^1 \cdot \Delta P^1$
Fonction coût	Q_2^1

Test : $Q_2^1 > Q_1^1$

Conclusion : La solution est moins bonne que la précédente. On revient à la solution précédente.

Actualisation : $P_0^2 \leftarrow P_1^1$
 $Q_0^2 \leftarrow Q_1^1$

Test de stagnation : On suppose que la variation apportée au paramètre est suffisamment importante. Il n'y a pas stagnation. On passe alors à l'itération suivante. Le programme d'optimisation détermine la nouvelle variation ΔP^2 .

• **Etape 3 :**

Itération	2
Amélioration	1
Paramètre d'amélioration	$\alpha_1^2 \leftarrow 1$
Valeur du paramètre	$P_1^2 \leftarrow P_0^2 + \alpha_1^2 \cdot \Delta P^2$
Fonction coût	Q_1^2

Test : $Q_1^2 < Q_0^2$

Conclusion : La solution étant meilleure, on tente la méthode d'amélioration 2.

Actualisation : $\alpha_2^2 \leftarrow 2$

Etape 4 :

Itération	2
Amélioration	2 (1)
Paramètre d'amélioration	$\alpha_2^2 \leftarrow 2$
Valeur du paramètre	$P_2^2 \leftarrow P_0^2 + \alpha_2^2 \cdot \Delta P^2$
Fonction coût	Q_2^2

Test : $Q_2^2 < Q_1^2$

Conclusion : La solution étant encore meilleure, on tente une seconde amélioration de même type.

Actualisation : $\alpha_3^2 \leftarrow 4$

• **Etape 5 :**

Itération	2
Amélioration	2 (2)
Paramètre d'amélioration	$\alpha_3^2 \leftarrow 4$
Valeur du paramètre	$P_3^2 \leftarrow P_0^2 + \alpha_3^2 \cdot \Delta P^2$
Fonction coût	Q_3^2

Test : $Q_3^2 > Q_2^2$

Conclusion : La solution est moins bonne que la précédente. On revient à la solution précédente.

Actualisation : $P_0^3 \leftarrow P_2^2$
 $Q_0^3 \leftarrow Q_2^2$

Test de stagnation : Si l'on suppose qu'il n'y a pas stagnation, on passe à l'itération suivante. Le programme détermine la nouvelle variation ΔP^3 .

Etape 6 :

Itération	3
Amélioration	1 (1)
Paramètre d'amélioration	$\alpha_1^3 \leftarrow 1$
Valeur du paramètre	$P_1^3 \leftarrow P_0^3 + \alpha_1^3 \cdot \Delta P^3$
Fonction coût	Q_1^3

Test : $Q_1^3 > Q_0^3$

Conclusion : La variation apportée au paramètre est trop importante. On tente une seconde amélioration de type 1 en diminuant la valeur du paramètre d'amélioration.

Actualisation : $\alpha_2^3 \leftarrow \frac{\alpha_1^3}{2}$

Etape 7 :

Itération	3
Amélioration	1 (2)
Paramètre d'amélioration	$\alpha_2^3 \leftarrow 1/2$
Valeur du paramètre	$P_2^3 \leftarrow P_0^3 + \alpha_2^3 \cdot \Delta P^3$
Fonction coût	Q_2^3

Test : $Q_2^3 < Q_1^3$

Conclusion : La solution est meilleure.

Actualisation : $P_0^4 \leftarrow P_2^3$

Test de stagnation : Si l'on suppose que la fonction coût a atteint l'écart minimal imposé par l'utilisateur, la dernière valeur obtenue pour le paramètre à identifier P_0^4 peut être considérée comme optimale.

La Figure IV - 15 détaille finalement l'algorithme de minimisation « optimisé » que nous avons couplé au logiciel FORGE2® V2.6 « viscoplastique ».

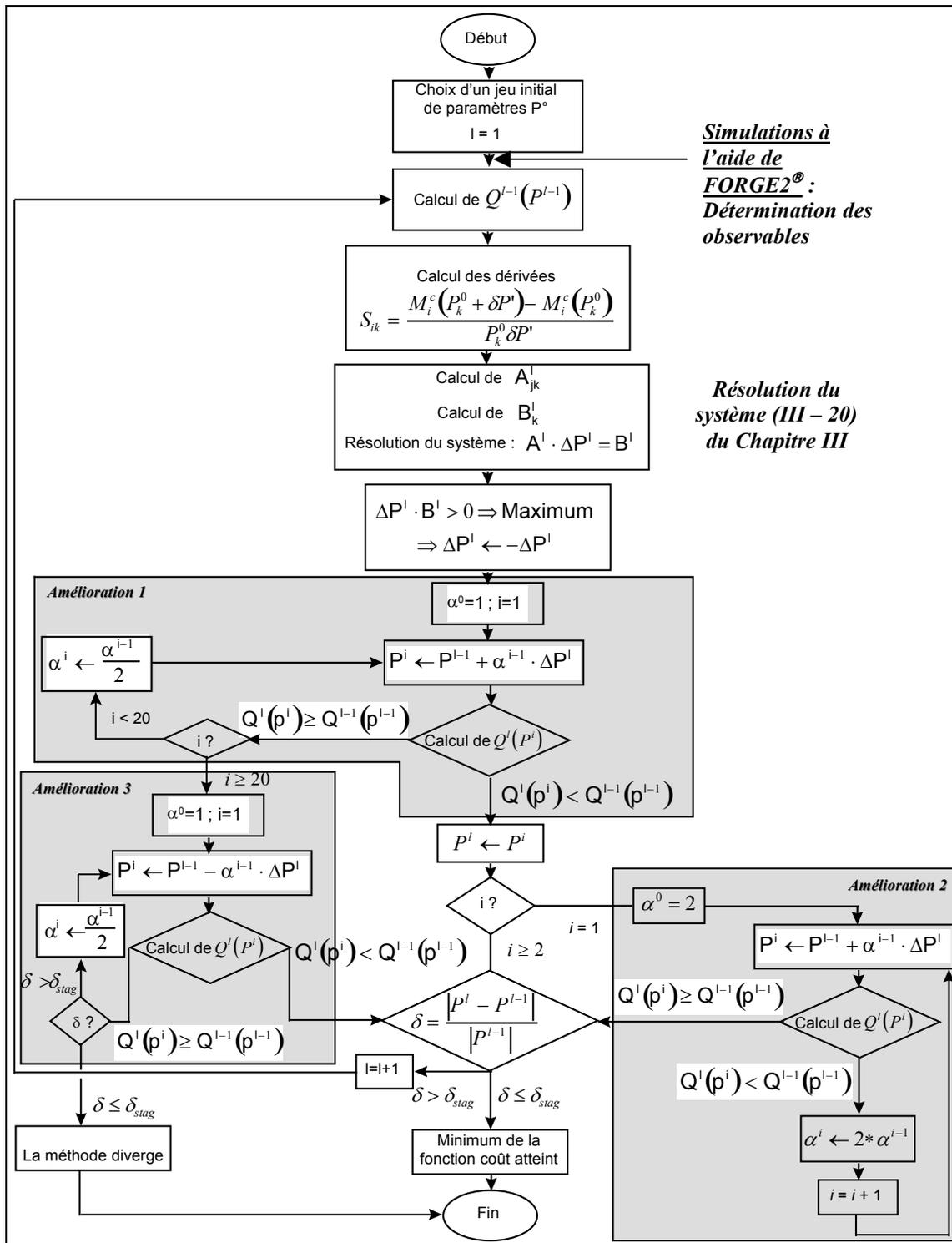


Figure IV - 15 : Algorithme de minimisation « optimisé ».

Dans le cas où à l'étape 7, deux améliorations 1 n'auraient pas permis de diminuer la fonction coût, ces mêmes améliorations auraient pu être répétées jusqu'à vingt fois. Le cas où la solution n'a pu être améliorée malgré vingt sous-itérations d'amélioration 1 n'a pas été évoqué ici. Dans ce cas, il est

prévu, comme cela est indiqué sur la Figure IV - 15, d'employer une troisième technique d'amélioration qui consiste à inverser le sens de la recherche. Si l'amélioration 1 est indispensable dans certains cas (ΔP calculé trop important) pour permettre la convergence de l'algorithme, la technique d'amélioration 2 est, quant à elle, facultative. Elle ne sert en effet qu'à accélérer la convergence car elle permet, dans certains cas de figure, d'éviter une itération supplémentaire de l'algorithme de Gauss-Newton, c'est-à-dire une détermination de la matrice de sensibilité. Le gain minimum que l'on est en droit d'attendre est de $r*c$ (nombre de paramètres à identifier * nombre de courbes constituant l'espace expérimental) appels du modèle direct. En cas d'échec, la méthode coûte c simulations, c'est-à-dire une simulation de chaque courbe expérimentale.

5 Validation de l'algorithme de minimisation

Pour valider l'algorithme de minimisation (Figure IV - 15) implémenté dans FORGE2®, il est nécessaire de réaliser un test de convergence.

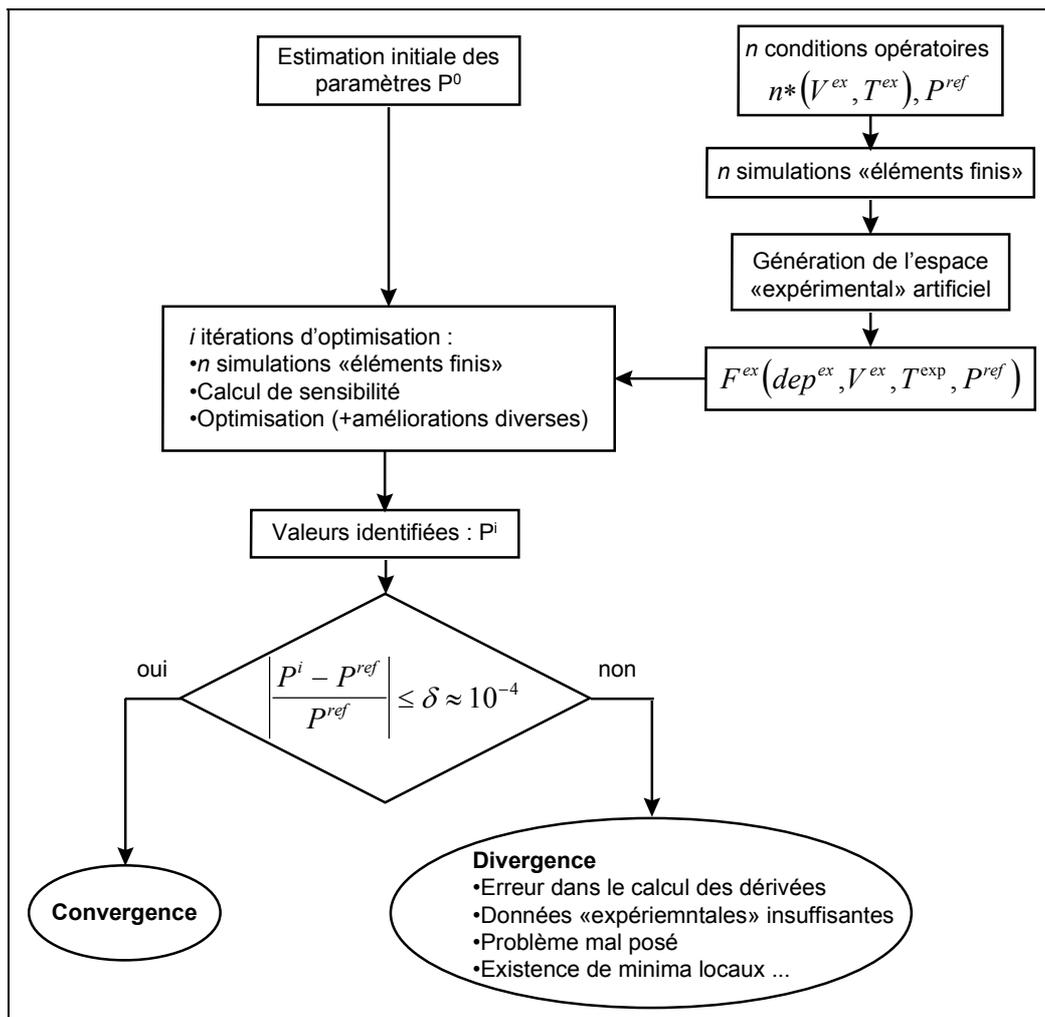


Figure IV - 16 : Principe d'étude de la convergence d'un logiciel d'identification

L'objectif de ce test est d'analyser la capacité du module d'identification à retrouver les valeurs nominales des paramètres qui ont servi à bâtir un espace « expérimental » artificiel de référence, en partant de différentes valeurs P^0 . La Figure IV - 16 explique le principe d'une telle étude de convergence. La stratégie de ce test consiste à construire des courbes force σ déplacement en fixant une loi rhéologique réaliste. Le modèle direct est utilisé pour créer une série fictive d'essais. On demande ensuite au modèle inverse d'identifier la rhéologie. Le test est concluant quand le module d'optimisation retrouve la rhéologie choisie. On s'affranchit ainsi des incertitudes expérimentales et des incertitudes quant à la validité du modèle physique choisi pour ne tester que l'outil numérique. A l'aide d'un tel test, il est alors possible d'estimer l'influence qu'auront sur la convergence des facteurs aussi divers que :

- la configuration de l'espace expérimental (nombre de courbes et nombre de points par courbe),
- le maillage initial de l'éprouvette,
- l'estimation initiale des paramètres,
- les régularisations éventuelles de l'algorithme d'identification.

5.1 Création de l'espace « expérimental » artificiel

Un espace « expérimental » artificiel a été créé en introduisant dans FORGE2® la possibilité de réaliser des simulations multiples consécutives. Celles-ci sont basées sur l'utilisation d'une même loi de comportement de type « polymère solide » :

$$\bar{\sigma} = K \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) \left(1 - e^{-w \cdot \dot{\epsilon}}\right) e^{h \bar{\epsilon}^n} \dot{\epsilon}^m \quad (\text{IV} - 71)$$

Rhéologie	Paramètres	K	β	m	w	h	n
		4818,0	466	0,096	32,7	0,590	2
Courbes	Nombre de courbes	3					
	Nombre de points / courbe	128					
	Vitesses / Températures simulées	V_1, T_1	V_2, T_2		V_3, T_3		
		20 mm/min, 23 °C	50 mm/min, 23 °C		100 mm/min, 23 °C		

Tableau IV - 4 : Conditions opératoires nécessaires à l'obtention de l'espace « expérimental » artificiel

Les conditions opératoires qui ont permis de générer l'espace « expérimental » artificiel sont reportées dans le Tableau IV - 4. De façon à conserver un sens physique aux paramètres, ceux-ci sont inspirés de ceux identifiés pour le polyéthylène en traction.

5.2 Test de convergence

Pour ce test de convergence, le nombre de paramètres à identifier a été volontairement limité à quatre (β et n sont fixés).

<i>Paramètre</i>	<i>Valeur initiale</i>	<i>Valeur minimale autorisée</i>	<i>Valeur maximale autorisée</i>
<i>K</i>	6000,0	3000,0	10000,0
<i>m</i>	0,150	0,050	0,150
<i>w</i>	10,0	10,0	50,0
<i>h</i>	0,900	0,900	2,000

Tableau IV - 5 : Valeurs initiales et intervalles de variation des paramètres à identifier

Le Tableau IV - 5 regroupe les valeurs initiales P^0 à partir desquelles l'identification des paramètres a été réalisée. En outre, de façon à ce que ces paramètres aient une signification physique tout au long de l'identification, mais aussi pour limiter le temps de calcul, il est utile d'imposer un intervalle de variation à chacun de ces paramètres. Les valeurs extrêmes sont également reportées dans le tableau précédent.

Le Tableau IV - 6 permet quant à lui de suivre l'évolution des divers paramètres ainsi que celle de la fonction coût au cours du processus d'optimisation. Les notations A1 et A2 font référence respectivement aux améliorations de type 1 et 2.

Itération	1	1	1	2	2	2	3	3	3	4	4
Amélioration	-	A1	A2	-	A1	A2	-	A1	A2	-	A1
K	6000,0	3628,0	3000,0*	3628,0	4666,5	5705,1	4666,5	4816,1	4965,8	4816,1	4819
m	0,150**	0,104	0,058	0,104	0,095	0,086	0,095	0,096	0,097	0,096	0,096
w	10,0*	20,7	31,4	20,7	33,7	46,78	33,7	32,7	31,6	32,7	32,7
h	0,900*	0,814	0,727	0,814	0,534	0,254	0,534	0,590	0,645	0,590	0,590
Ecart (%)	21,6	18,6	20,2	18,6	7,3	31,2	7,3	0,06	7,1	0,06	3.10 ⁻⁴

Tableau IV - 6 : Suivi des paramètres et de la fonction coût au cours de l'identification
 (* : valeur minimale / ** : valeur maximale de l'intervalle de variation)

L'écart minimal accepté est de 10^{-5} , soit 10^{-3} % d'erreurs entre les courbes simulées et « expérimentales ». On impose, en outre, que le processus d'identification stagne si la variation du vecteur paramétrique ΔP est inférieure à 10^{-3} entre 2 itérations.

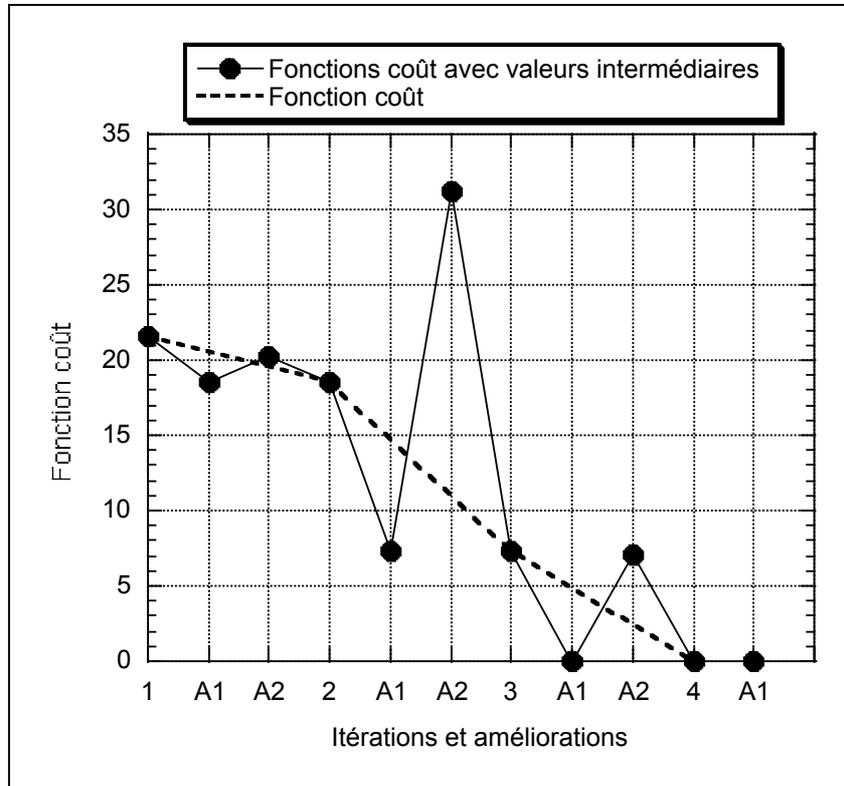


Figure IV - 17 : Evolution de la fonction coût au cours des itérations d'identification.

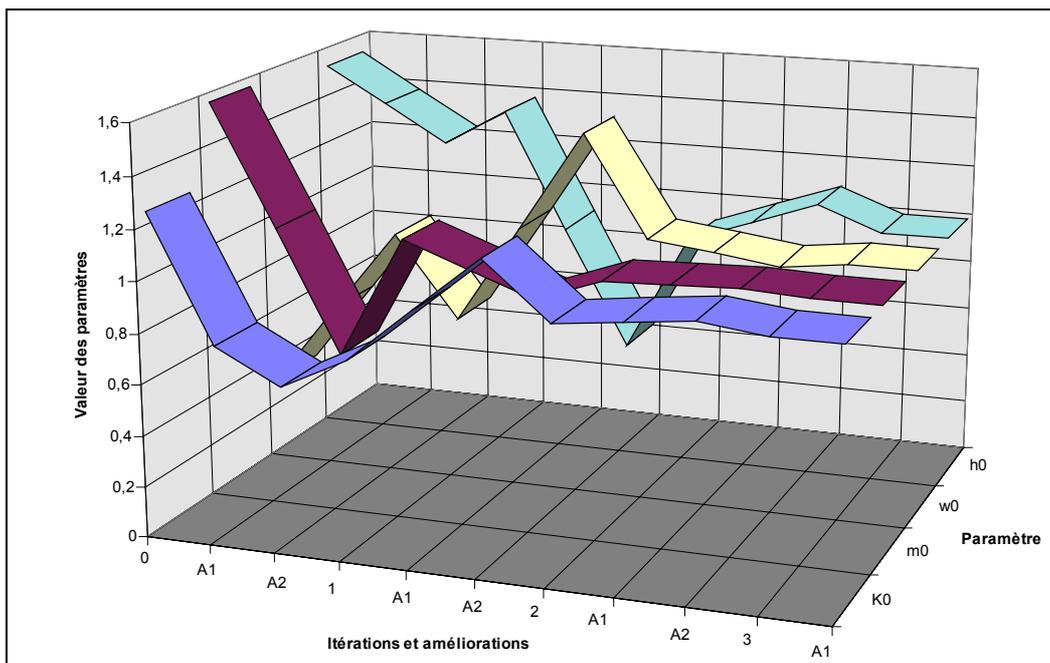


Figure IV - 18 : Evolution des paramètres au cours de l'identification

La Figure IV - 17 et la Figure IV - 18 permettent respectivement de suivre graphiquement l'évolution de la fonction coût et celle des différents paramètres rhéologiques à identifier au cours des itérations d'identification. Les paramètres ont été adimensionnalisés, de telle sorte que la valeur recherchée soit égale à l'unité. Les différents pics correspondent aux tentatives d'améliorations. Ces résultats nous permettent de mettre en évidence l'efficacité du code d'optimisation. Cette identification, réalisée en trois itérations, a nécessité 9 h 45 min de calcul pour atteindre un écart final inférieur 3.10^{-4} %. Pour cela, il a fallu réaliser 81 simulations qui se décomposent comme suit (Tableau IV - 7) :

	Améliorations	Détail	Total
Itération 1	0	(n paramètres + 1) x c courbes	(4+1) x 3 = 15
	A1	1 tentative d'amélioration x c courbes (réussie)	1 x 3 = 3
	A2	1 tentative d'amélioration x c courbes (échec)	1 x 3 = 3
Itération 2	0	(n paramètres + 1) x c courbes	(4+1) x 3 = 15
	A1	1 tentative d'amélioration x c courbes (réussie)	1 x 3 = 3
	A2	1 tentative d'amélioration x c courbes (échec)	1 x 3 = 3
Itération 3	0	(n paramètres + 1) x c courbes	(4+1) x 3 = 15
	A1	1 tentative d'amélioration x c courbes (réussie)	1 x 3 = 3
	A2	1 tentative d'amélioration x c courbes (échec)	1 x 3 = 3
Itération 4	0	(n paramètres + 1) x c courbes	(4+1) x 3 = 15
	A1	1 tentative d'amélioration x c courbes (réussie)	1 x 3 = 3
Total			81

Tableau IV - 7 : Détail du nombre de simulations nécessaires au test de convergence

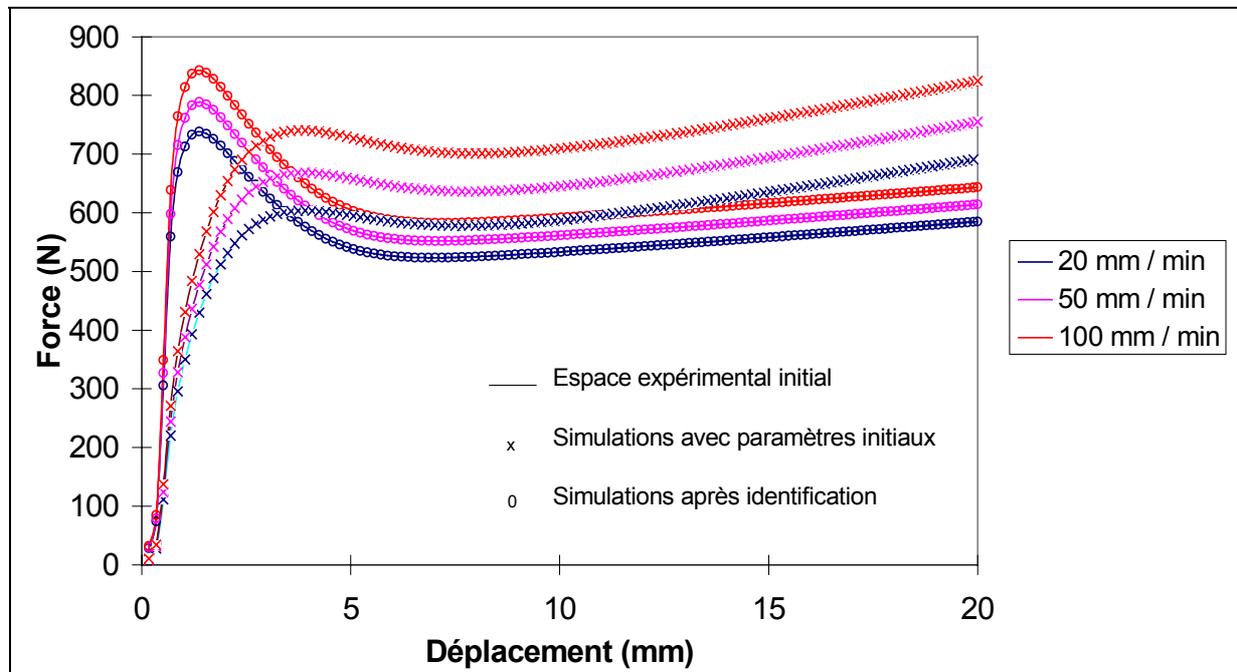


Figure IV - 19 : Résultat du test de convergence en termes d'évolution de la force en fonction du déplacement.

En termes d'évolution de la force en fonction du déplacement, la Figure IV - 19 confirme le parfait accord entre les courbes calculées (avant et après identification) et les courbes de référence, et ce, malgré des paramètres initiaux éloignés de leur vraie valeur. Ces tests ont été répétés en modifiant les paramètres initiaux. Tant que ceux-ci restent « physiquement » admissibles, la convergence a toujours été bonne.

5.3 Test de stabilité

Une caractéristique importante d'une procédure d'identification est sa propriété de stabilité par rapport à une perturbation (bruit) des données expérimentales. Pour étudier cette propriété, il s'agit de quantifier l'influence d'un bruit sur les données expérimentales sur les paramètres rhéologiques identifiés. On dit alors qu'un algorithme d'identification est stable si pour de petites variations des données expérimentales ($\Delta M^{\text{ex}} \leq \varepsilon$), les valeurs des paramètres identifiés se trouvent toujours dans le voisinage de leur valeur moyenne obtenue pour $\Delta M^{\text{ex}} = 0$. Pour tester cette stabilité, il a donc été nécessaire de construire un espace expérimental faiblement perturbé. Celui-ci a été obtenu à partir de l'espace artificiel précédent, la perturbation étant définie comme :

$$\hat{M}_j^{\text{ex}} = M_j^{\text{ex}} + \Delta M_j^{\text{ex}} \text{ pour } j=1, \dots, s \quad (\text{IV} - 72)$$

où ΔM^{ex} représente le niveau de perturbation, que l'on peut définir comme étant égal à une constante ($\Delta M^{\text{ex}} = \varepsilon$), ou qui peut être généré aléatoirement à l'aide d'une fonction de type « random » ($\Delta M^{\text{ex}} = \varepsilon \text{RAN}(x)M^{\text{ex}}$). Le niveau d'erreur ε correspond à l'ordre de grandeur de la perturbation désirée. Le choix de la distribution des tirages aléatoires a été effectué de façon à approcher au maximum la distribution des erreurs de mesures expérimentales que l'on suppose être de type gaussien. Dans ce cas on utilise l'expression définie précédemment (IV - 72) en déterminant l'erreur ΔM à l'aide d'une fonction aléatoire normale.

Les résultats d'identification obtenus pour des valeurs de ε croissantes (Tableau IV - 8) montrent que la fonction coût est du même ordre de grandeur que la perturbation imposée (l'écart 1 correspond à la valeur de la fonction coût en fin d'identification). En outre l'écart par rapport à l'identification réalisée sur l'espace expérimental non perturbé (l'écart 2 est obtenu en soustrayant à l'écart 1 la valeur de la perturbation imposée ε) ne devient perceptible qu'au delà de 10 % de perturbation des mesures, niveau d'erreur que tout expérimentateur consciencieux rejetterait (Figure IV - 21).

ε	K	ΔK	m	Δm	w	Δw	h	Δh	Ecart 1	Ecart 2
0 %	4819		0,096		32,7		0,590		3.10 ⁻⁴ %	~0 %
0,1 %	4818,8	-4,1 10 ⁻⁵ %	0,096	0 %	32,7	0 %	0,590	0 %	0,1 %	~0 %
1 %	4817,8	-2,1 10 ⁻⁴ %	0,096	0 %	33,0	9,1 10 ⁻³ %	0,591	1,7 10 ⁻³ %	1,0 %	~0 %
3%	4813,7	-1,1 10 ⁻³ %	0,096	0 %	33,7	3,0 10 ⁻² %	0,594	6,8 10 ⁻³ %	3,0 %	~0 %
10%	4799,0	-4,1 10 ⁻³ %	0,097	1,0 10 ⁻² %	36,2	1,0 10 ⁻¹ %	0,605	2,5 10 ⁻² %	10,1 %	~0,1 %

Tableau IV - 8 : Influence de la perturbation sur la fonction coût.

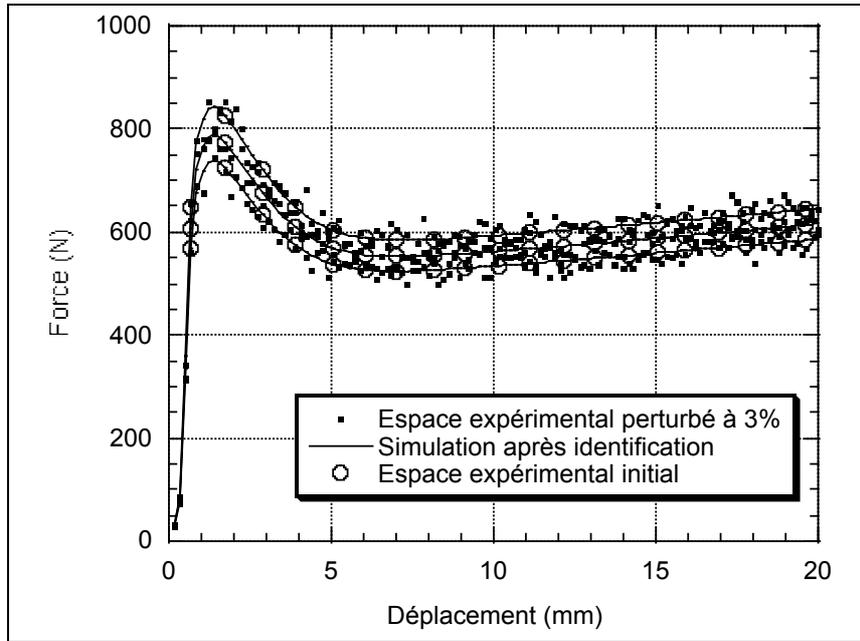


Figure IV - 20 : Résultat du test de stabilité pour une perturbation de l'espace expérimental de l'ordre de 3 % et pour trois vitesses de traction (20, 50 et 100 mm/min).

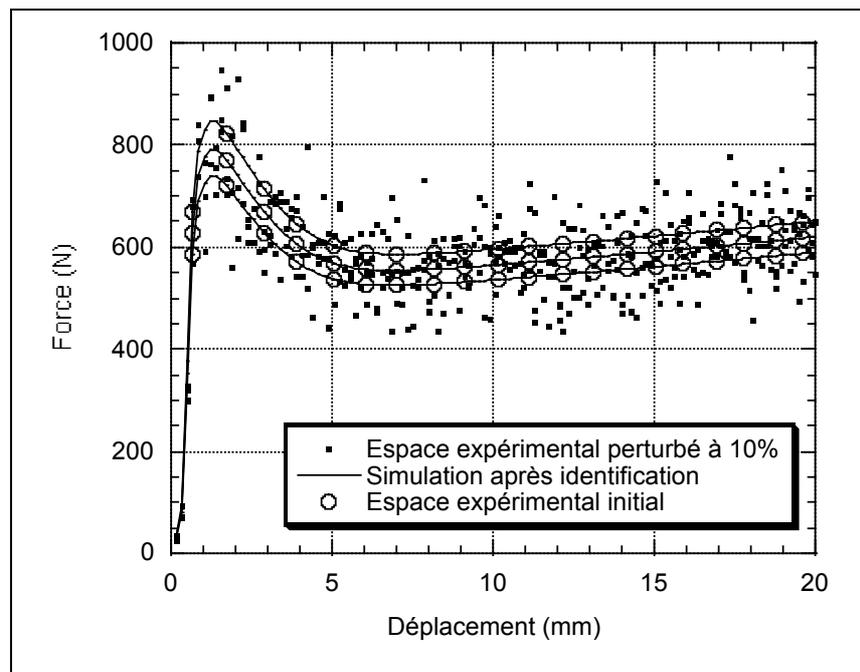


Figure IV - 21 : Résultat du test de stabilité pour une perturbation de l'espace expérimental de l'ordre de 10 % et pour trois vitesses de traction (20, 50 et 100 mm/min).

L'erreur d'identification la plus importante porte en fait sur le paramètre w . Cette imprécision peut vraisemblablement être corrélée à la faible quantité de points expérimentaux dans la zone de déformation élastique, seule zone où le paramètre w est sensible. Ceci soulève une question quant à la taille minimale de l'espace expérimental, nécessaire pour réaliser une identification correcte. Les nouvelles valeurs identifiées sont malgré tout très proches de leur valeur de référence. Ceci se traduit sur les tracés précédents (Figure IV - 20 & Figure IV - 21) par une concordance quasi parfaite entre les courbes obtenues après identification et celles (non perturbées) de l'espace « expérimental » artificiel.

5.4 Influence de l'espace expérimental

La formulation de la loi de G'Sell, prise dans son intégralité (c'est-à-dire avec le terme de thermodépendance) nécessite, pour identifier l'ensemble des paramètres, un minimum de quatre courbes correspondant à deux vitesses de sollicitation et à deux températures.

Pour déterminer le nombre de points minimum que doivent posséder ces différentes courbes, il faut tenir compte du fait que chaque composante de la matrice de sensibilité doit être définie de façon à éviter toute combinaison linéaire entre les lignes de la matrice. Comme la taille de la matrice est égale au nombre de paramètres au carré (r^2), le nombre de points s total doit alors satisfaire la condition :

$$s \geq r^2 \quad (\text{IV - 73})$$

Par conséquent, l'identification des paramètres de la loi polymère solide nécessite la détermination expérimentale d'un minimum de 36 points expérimentaux (5 paramètres rhéologiques + coefficient de thermodépendance) à répartir sur le nombre total de courbes.

espace		b1	b2	b3	b1	b2	b3	c1	c2	c3
Vitesse (mm/min)		5	10	30	5	10	30	5	10	30
Température		23°C			50°C			90°C		
Configuration	A	✓		✓			✓			
	B	✓	✓	✓	✓	✓	✓			
	C	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓

Tableau IV - 9 : Espaces expérimentaux artificiels.

Si l'identification est théoriquement possible avec ce nombre minimal de courbes expérimentales et de points expérimentaux, il était dès lors intéressant de vérifier l'influence qu'induirait l'apport de renseignements supplémentaires sur la vitesse de convergence et sur la précision des résultats de l'identification. Pour cela, il a été nécessaire de créer d'autres espaces expérimentaux. Le Tableau IV - 9 regroupe les différentes conditions opératoires retenues. Le Tableau IV - 10 permet quant à lui de mesurer l'influence des divers espaces expérimentaux servant à l'identification des paramètres sur la vitesse de convergence et la précision des résultats.

Configuration	A	B	C
Nombre de courbes (16 points/courbe)	3	6	9
Nombre total de points s	48	96	144
Conditionnement initial	19079	17067	16257
Fonction coût initiale	485 %	482 %	464 %
Fonction coût finale	0,4 %	0,1 %	0,05 %
Nombre d'itérations	9	9	8
Temps CPU	~10 h	~9 h	~16 h

Tableau IV - 10 : Influence de l'espace expérimental sur les résultats d'identification.

Comme on peut le constater sur le Tableau IV - 10, les trois espaces expérimentaux étudiés permettent de converger vers les valeurs nominales des paramètres. Le conditionnement initial de la matrice de sensibilité (égal à 1 dans le cas d'un problème bien posé) diminue sensiblement lorsque le nombre de courbe augmente et le temps de calcul est approximativement proportionnel au nombre de courbes contenu dans ces espaces. Il apparaît clairement aussi que l'ajout de renseignements supplémentaires, qui se traduit par une augmentation du nombre de simulations, n'est pas nécessairement synonyme d'un surcroît de temps de calcul ; il est en effet tout à fait envisageable de trouver des cas de figure pour lesquels l'ajout d'informations peut permettre une convergence en un nombre plus faible d'itérations.

Certains auteurs [17] ont par ailleurs constaté qu'une estimation initiale des coefficients à identifier plus proche de leurs valeurs nominales n'implique pas nécessairement une diminution du nombre d'itérations. Ceci est attribué au fait que la fonction coût peut être caractérisée par un gradient plus faible dans certaines directions de l'espace des paramètres que dans d'autres, ce qui entraîne des variations paramétriques plus faibles en cours de minimisation.

5.5 Influence du maillage

Au cours d'une simulation réalisée à l'aide d'un code éléments finis, la discrétisation géométrique de l'éprouvette (c'est-à-dire le maillage) est un facteur essentiel à prendre en considération de façon à limiter les erreurs de calculs. Plusieurs maillages, possédant des éléments plus ou moins grossiers, ont été testés pour une même identification en traction à l'aide de l'espace expérimental généré artificiellement (§ 5.1). Ainsi le maillage représenté sur la Figure IV - 22a, différent de celui utilisé lors de la création de la base expérimentale artificielle (Figure IV - 22b), a-t-il permis d'identifier correctement les paramètres de référence.

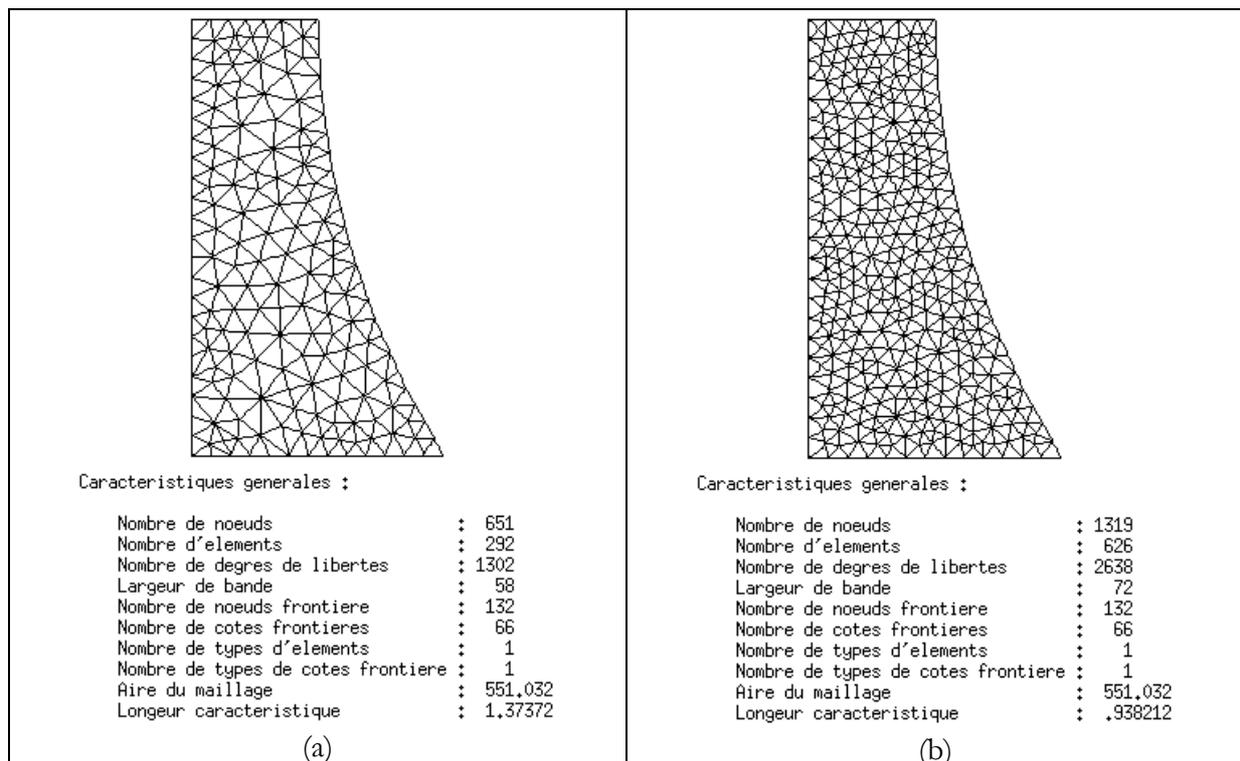


Figure IV - 22 : (a) Maillage ayant servi à l'identification – (b) Maillage ayant servi à la création de l'espace expérimental.

La conclusion qui ressort de ce test est que la taille de maille importe peu dès lors qu'elle permet de conduire les simulations à leur terme. La précision du calcul est par ailleurs évaluée à l'aide d'estimateurs d'erreur mécaniques et thermiques. Ceux introduits dans FORGE2® sont définis suivant une norme en énergie [18]. Cependant, certains critères locaux (tests de dégénérescence : rayon de courbure maximal, homogénéité ...) permettent d'indiquer l'apparition de distorsions géométriques qui peuvent diminuer la fiabilité de la résolution numérique. Si les éprouvettes sont maillées à l'aide d'éléments triangulaires quadratiques, ces critères permettent de déclencher automatiquement en cas de dégénérescence un procédé de remaillage adaptatif, capable de générer un nouveau maillage optimal.

Les divers tests d'analyse numérique que nous venons de passer en revue confirment donc la faisabilité de l'analyse inverse appliquée à l'identification de paramètres rhéologiques. Mais ils sont surtout garants de l'efficacité du calcul par différences finies que nous avons employé pour déterminer les composantes de la matrice de sensibilité intervenant dans l'algorithme de Gauss-Newton. Cependant, certains de ces résultats (Temps CPU du Tableau IV - 10) soulèvent l'ampleur des calculs que la méthode peut nécessiter lorsque le nombre de courbes et de paramètres à identifier deviennent importants. Nous évoquerons dans le chapitre VI une alternative à cette méthode applicable au modèle direct présenté plus haut et qui permettrait de diminuer sensiblement le temps de calcul.

6 Conclusions

Nous avons présenté, dans ce chapitre, une procédure d'identification de paramètres de comportement en utilisant un modèle thermomécanique pour simuler les essais rhéologiques. Le modèle numérique utilisant la méthode des éléments finis est couplé à un module d'optimisation ajustant les paramètres du matériau jusqu'à ce que l'erreur entre les valeurs calculées et les mesures expérimentales soit minimale. Cette méthode permet de prendre en compte toute la complexité de l'essai et tout particulièrement les phénomènes de localisation de la déformation et d'autoéchauffement qui rendent souvent les hypothèses de dépouillement classiques caduques. Le point important de cette méthode est l'évaluation de la matrice de sensibilité qui permet de quantifier l'influence de chaque paramètre rhéologique sur les grandeurs observables. Les diverses études numériques présentées au cours de ce chapitre mettent en évidence la faisabilité de la méthodologie d'identification mise en œuvre. Les tests de convergence et de stabilité soulignent plus particulièrement la capacité du logiciel à identifier une loi de type polymère solide avec une grande précision et en un nombre raisonnable d'itérations, ce dernier dépendant directement de la qualité et de la quantité des renseignements expérimentaux qui lui sont fournis. Il nous est donc désormais possible d'envisager d'appliquer le logiciel à l'identification du comportement rhéologique de matériaux réels afin d'observer les apports de l'analyse inverse par rapport aux méthodes classiques d'identification explicitées au cours du chapitre II.

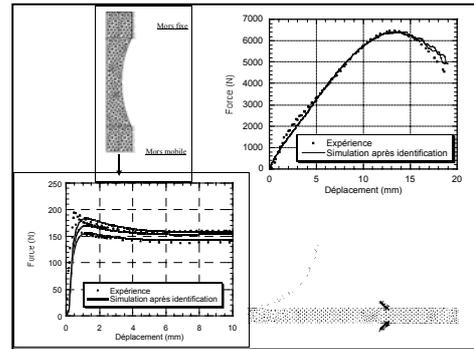
Bibliographie du chapitre 4

- [1] **M.-L. BISILLIAT**, « *Comportement mécanique d'un polycarbonate à grande vitesse de sollicitation – Etude expérimentale et simulation* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1996)

- [2] **N. BILLON**, Colloque Francophone Eléments Finis Polymères, Nancy, France (1997)
- [3] **J.-L. BAILLEUL, Y. JARNY, E. ARTIOUKHINE and D. DELAUNAY**, « *Identification and Control of Heat Sources in Materials During Thermal Processing* », 2nd Int. Conf. On Dynamic System Identification and Inverse Problems, **2**, St Petersburg, (1994)
- [4] **G. D. LAHOTI, T. ALTAN**, « *Prediction of Temperature Distributions in Axisymmetric Compression and Torsion* », Journal of Engineering Materials and Technology, pp. 113 – 120 (1975)
- [5] **E. RAUCH, G. R. CANOVA, J. J. JONAS, S. L. SEMIATIN**, « *An Analysis of Flow Localization During Torsion Testing* », Acta Metall., **33**, pp. 465 – 476 (1985)
- [6] **J.-F. FONTAINE**, « *The Torsion-tensile Testing Method for the Characterization of Cold Metal Formability* », Journal of Materials Processing Technology, **32**, pp. 253 – 262 (1992)
- [7] **G. DHATT, G. TOUZOT**, « *Une présentation de la méthode des éléments finis* », Collection Université de Compiègne, Edition Maloine, (1984)
- [8] **J. M. ORTEGA, C. RHEINBOLDT**, « *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables* », Academic Press, New-York, (1970)
- [9] **C. BOHATIER, J.-L. CHENOT**, « *Finite Element Formulation for Non-Steady State Large Viscoplastic Deformation* », International Journal for Numerical Methods in Engineering, **21**, pp. 1697 – 1708, (1985)
- [10] **N. M. SOYRIS**, « *Modélisation tridimensionnelle du couplage thermique en forgeage à chaud* », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1990)
- [11] **M. ZLAMAL**, « *Finite Element Methods for Non-linear Parabolic Equations* », R.A.I.R.O. Numerical Analysis, **11**, n°1, pp. 93 – 107, (1977)
- [12] **S. GLASER, B. KRÖPLIN**, « *Thermomechanical Coupling in Elasto-Plastic Analysis* », NUMIFORM 92, pp. 249 – 254, (1992)
- [13] **S. NAGAKI, K. IWASAKI, M. SADO, T. ABE**, « *Coupled Thermo-viscoplastic Analysis of Extrusion Process with Spatial Description* », Advanced Technology of Plasticity 1990, **1**, pp. 457 – 464
- [14] **T. VINH, T. KHALIL**, « *Adiabatic and Viscoplastic Properties of some Polymers at High Strain and High Strain Rate* », Inst. Phys. Conf. Ser. No **70**, Oxford, (1984)
- [15] **R. QUINSON**, « *Caractérisation et modélisation de la déformation non élastique des polymères amorphes à l'état solide* », Thèse de doctorat, Institut des Sciences Appliquées de Lyon, (1995)
- [16] **E. OLEYNIK**, « *Plastic Deformation and Mobility in Glassy Polymers* », Progr. Colloid. & Polym. Sci., **80**, pp. 140 – 150, (1989)
- [17] **A. GAVRUS**, « *Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse* », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1996)
- [18] **L. FOURMENT**, « *Estimateur d'erreur et maillage adaptatif pour la simulation numérique des procédés de mise en forme* », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1992)

Chapitre 5

**APPLICATIONS : DE L'UNIAXIAL AU
MULTIAXIAL ...**



1	Introduction	203
2	Identification des coefficients d'un polyéthylène sollicité en traction	203
2.1	Caractéristiques du modèle direct utilisé	203
2.2	Résultats	204
3	Identification des paramètres rhéologiques du polypropylène	207
3.1	Préambule	207
3.2	Test de traction	209
3.3	Test de poinçonnement	214
3.4	Test de Poids Tombant Instrumenté	217
4	Conclusion	221

1 Introduction

Les tests numériques particulièrement convaincants évoqués au cours du chapitre précédent laissent entrevoir de nombreuses applications à l'analyse inverse dans le domaine de l'identification de paramètres. L'étape suivante consiste à tester l'efficacité du logiciel sur des bases expérimentales réelles, obtenues à partir d'essais rhéologiques. Le but de ce chapitre est de vérifier l'apport d'une telle méthodologie par rapport aux méthodes d'identification classique.

Un autre objectif de ce chapitre est de démontrer la capacité de l'analyse inverse à identifier les paramètres de lois éventuellement plus complexes et surtout de présenter le véritable outil qu'elle constitue dans le cadre de la recherche de nouvelles lois de comportement pouvant correspondre à une description plus adaptée de l'écoulement en grandes déformations.

Afin de vérifier le véritable apport des méthodes inverses par rapport aux méthodes d'identification classiques étudiées au cours du chapitre II, nous avons choisi de confronter les deux techniques sur un même espace expérimental, en l'occurrence les essais de tractions « moyennes vitesses » réalisés sur le polyéthylène. Pour mémoire, les conditions opératoires retenues sont résumées dans le Tableau II – 13.

2 Identification des coefficients d'un polyéthylène sollicité en traction

2.1 Caractéristiques du modèle direct utilisé

Deux types de maillage ont été utilisés. Le premier représentait l'éprouvette entière. Celle-ci ne permettait pas d'atteindre, au niveau du diamètre minimal de l'éprouvette, une discrétisation suffisante pour observer correctement notamment le développement de gradients thermiques. Nous avons mis en cause la possibilité d'échauffements lors de ces essais. Ceci devrait permettre d'expliquer notre difficulté à exploiter les courbes. Nous avons cherché dans un second temps à améliorer la précision du maillage, en négligeant, par exemple les « têtes » des éprouvettes (Figure V - 1).

Les figures en Annexe 2 montrent, qu'à un instant donné et pour une vitesse donnée, les deux solutions conduisent à des profils de température similaires.

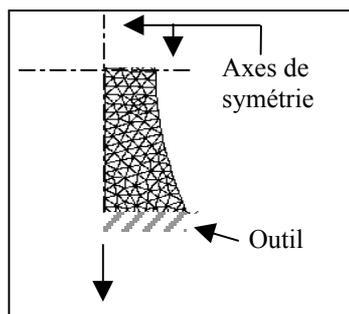


Figure V - 1 : Maillage d'un quart de la partie utile de l'éprouvette ; les outils sont « accolés » à la partie utile.

Le fait de pouvoir simuler uniquement la partie utile de l'éprouvette nous montre que, dans ces conditions, le transfert de chaleur entre le polymère et l'outil est négligeable par rapport aux échanges avec l'air ambiant. Cela nous permet finalement d'obtenir un maillage suffisamment raffiné dans la zone de diamètre minimum de l'éprouvette (là où les autoéchauffements sont les plus importants) pour voir apparaître un gradient de température. Ce type de démarche est toutefois dangereux car le maillage d'une partie seulement de l'éprouvette peut masquer un certain nombre d'effets (effets de têtes par exemple). Le choix du type de maillage est fonction de l'utilisation. Si l'expérimentateur est certain que les phénomènes qui se développent dans la zone utile n'influencent pas le reste de l'éprouvette, il a intérêt à raffiner le maillage et limiter la zone maillée. Dans le cas contraire, il est nécessaire de modéliser l'intégralité de l'éprouvette. Dans tous les cas, il faut s'assurer avec un test de la validité de son choix, ce que nous avons fait (Annexe III).

2.2 Résultats

Comme l'indique le Tableau V - 1, là où le dépouillement analytique du chapitre II conduisait dans le meilleur des cas à une fonction coût finale proche de 14 %, le logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur développé dans le cadre de ce travail permet de diminuer cet écart à environ 3 %.

Méthode d'identification	K_p^* (MPa.s ^m)	w	H	n	m	Ecart final
PARAMOPT « Basses vitesses »	42,5	32,7	0,59	2	0,096	~25 %
PARAMOPT « Moyennes vitesses »	100,4	30,7	0,51	2	0,156	~14 %
R.A.O. « Moyennes vitesses »	47,3	1000**	0,93	1,31	0,103	~3 %

Tableau V - 1 : Comparaison des résultats d'identification obtenus par dépouillement classique et par R.A.O. pour des essais de traction « moyennes vitesses » (2,5 ; 5 et 10 mm/min) sur du polyéthylène à 23°C.

* Rappel : $K_p = K \exp(\beta/T)$

** Valeur maximale autorisée sur le domaine de variation de w

Cela se traduit par un excellent accord entre les courbes représentant les forces expérimentales et simulées (Figure V - 2). Ce test montre donc que l'extrapolation des mesures « très basses vitesses » vers des essais plus rapides est dangereuse (25 % d'erreur). Cette erreur est bien sûr liée à la « non-pertinence » de la loi de comportement. L'identification « classique » sur essais « moyennes vitesses » est plus efficace (14 % d'erreur) mais nécessite la mesure du diamètre au cours du temps et la « manipulation » des résultats pour déterminer déformation et vitesse de déformation. Elle conserve de plus des hypothèses simplificatrices. La Rhéologie Assistée par Ordinateur, de son côté, évite tous ces désagréments. Cette méthode est également plus précise car elle tient compte des effets de température et d'hétérogénéité de déformation (dans la section mesurée). L'identification a nécessité environ 13 h 30 min de calcul (temps CPU), l'espace expérimental étant constitué de 3 courbes obtenues à température ambiante pour des vitesses de sollicitation différentes.

Seule une incertitude demeure sur le coefficient w représentatif de la viscoélasticité du matériau. Ce phénomène s'explique par le fait que la zone des faibles déformations possède peu de points expérimentaux. Des essais plus précis réalisés à l'aide d'extensomètres seraient ici d'une grande utilité. Ceci prouve que, si l'analyse inverse facilite l'exploitation des essais, elle ne dispense pas des précautions d'usage quant à la qualité et à la quantité des mesures.

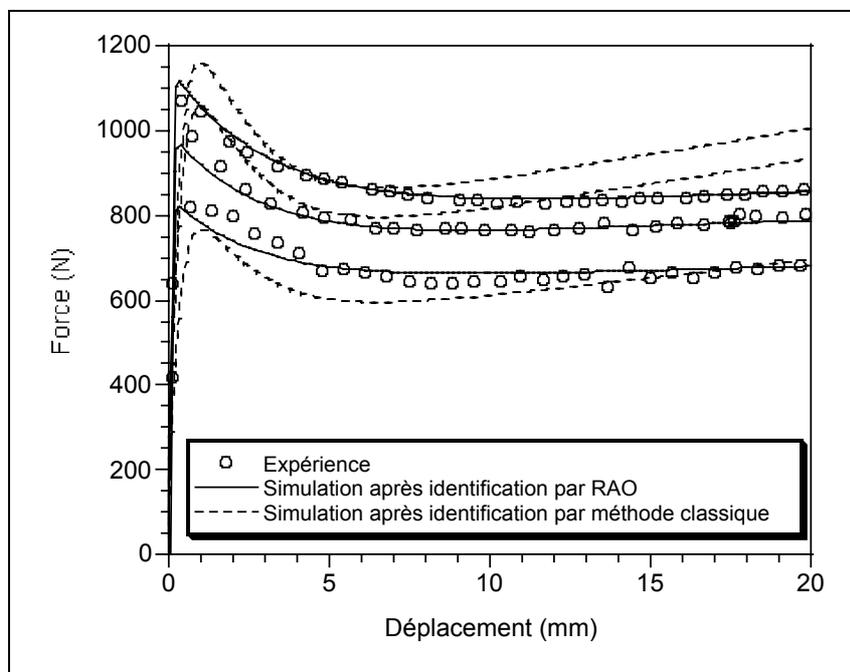


Figure V - 2 : Comparaison des courbes obtenues par dépouillements classiques (des courbes « moyennes vitesses ») et par R.A.O. pour des essais de traction « moyennes vitesses » (2,5, 5 et 10 mm/min) sur du polyéthylène à 23°C.

De plus, nous avons négligé d'identifier le paramètre de thermodépendance β . En effet, son identification aurait nécessité au minimum des mesures à différentes températures. Cette identification permet par contre de confirmer la faisabilité de la méthode sur une application réelle nécessitant la détermination de cinq coefficients rhéologiques indépendants : nous n'avons pas fait d'hypothèses plus lourdes que la technique classique et nous améliorons nettement l'identification. Elle permet par ailleurs de confirmer le niveau de validité de la loi de G'Sell pour décrire le comportement macroscopique en traction du polyéthylène.

L'accord étant jugé satisfaisant en ce qui concerne l'évolution de la force en fonction du déplacement, il est dès lors intéressant de comparer l'évolution de la géométrie de l'éprouvette au cours de la déformation et plus particulièrement celle de son rayon minimal. L'évolution du rayon prédite par le modèle direct est globalement correcte sauf aux fortes déformations, la striction semblant se stabiliser plus tard que dans la réalité. Alors que l'erreur globale sur la force est de 3 %, celle sur le rayon est de l'ordre de 10 % (Figure V - 3a et b).

Afin d'améliorer les résultats sur le rayon, nous avons donc eu recours à une fonction coût mixte exprimée simultanément en fonction des forces et des rayons minimaux :

$$Q(P, F^c, F^{ex}, r^c, r^{ex}) = \sum_{i=1}^s \frac{[F_i^c(P) - F_i^{ex}(P)]^2}{[F_i^{ex}(P)]^2} + \sum_{i=1}^s \frac{[r_i^c(P) - r_i^{ex}(P)]^2}{[r_i^{ex}(P)]^2} \quad (V - 1)$$

En ajoutant une contrainte supplémentaire au système (l'évolution du rayon minimal), on peut espérer que le logiciel converge vers une meilleure solution.

Méthode d'identification	K_p (MPa.s ^m)	w	H	n	m	Ecart sur la force	Ecart sur le rayon
Fonction coût simple	42,5	1000 ⁺ *	0,93	1,31	0,103	~3 %*	~10 %**
Fonction coût mixte	32,8	325	1,00	1,21	0,120	~5 %*	~4 %*

Tableau V - 2 : Influence de la formulation de la fonction coût sur les paramètres et sur l'écart final (polyéthylène). (* : obtenu par identification / ** : obtenu par simulation directe)

Comme le prouve le Tableau V - 2, le coefficient rhéologique qui a subi la plus forte modification est justement le coefficient viscoélastique w. La prise en compte du rayon dans la fonction coût semble avoir permis une identification de ce coefficient, sa valeur demeurant toutefois particulièrement élevée. L'emploi d'une fonction coût mixte permet finalement de diminuer l'erreur

⁺* Valeur maximale autorisée sur le domaine de variation de w

sur l'estimation du rayon minimal (Tableau V - 2 et Figure V - 3). Elle passe ainsi de 10 % à un peu plus de 4 %. Malheureusement cela s'est fait au détriment de l'imprécision sur la force qui a légèrement augmenté de 3 % à 5 %.

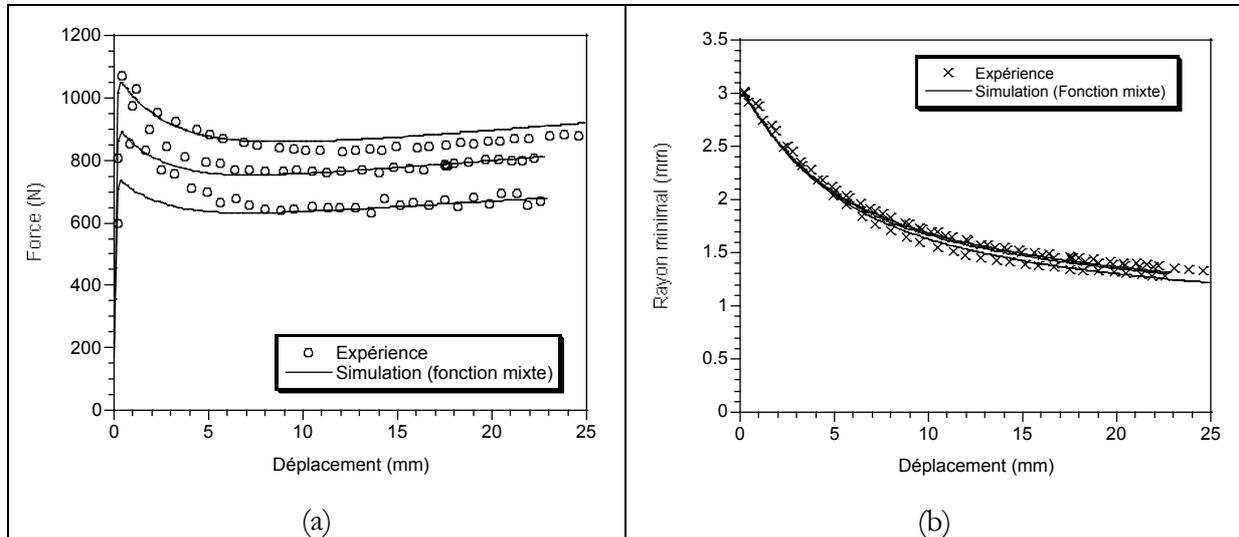


Figure V - 3 : Résultats de simulations initialisées avec des paramètres identifiés par R.A.O. à l'aide d'une fonction coût mixte : (a) force vs déplacement et (b) rayon vs déplacement (polyéthylène).

Cet effet antagoniste entre l'évolution du rayon et celle de la force a déjà été constaté par d'autres auteurs [1]. Son origine pourrait se trouver dans le fait que l'évolution microstructurale et l'anisotropie qui en découle n'est prise en compte lors de l'identification. Il est probable qu'une loi de comportement ne prenant pas en compte l'anisotropie induite ne puisse pas complètement modéliser simultanément force et section. Notons toutefois que les écarts restent relativement faibles (10 %), surtout au regard des incertitudes de mesures et qu'ils ne remettent donc pas la démarche en cause. Peut-être l'usage d'une fonction mixte associée à un code de simulation anisotrope serait-il un outil de validation de lois de comportement plus pertinentes.

3 Identification des paramètres rhéologiques du polypropylène

Les résultats sont suffisamment concluants dans le cas du polyéthylène. Qu'en est-il du polypropylène étudié au cours du chapitre II ?

3.1 Préambule

Nous allons nous placer dans la position de l'utilisateur qui analyse le comportement d'un nouveau polymère en impact.

Des essais vidéométriques l'autorise à admettre une loi de G'Sell (Chapitre II). Les coefficients de la loi ont été identifiés expérimentalement à basse vitesse. Pourtant, nous l'avons constaté, l'extrapolation de cette identification à l'impact est impossible. Il faut donc au minimum modifier ces coefficients. Nous envisageons pour cela une démarche progressive en considérant :

- la traction rapide pour prendre en compte les effets de vitesse ;
- le poinçonnement pour l'anisotropie induite ;
- l'impact, but final de l'étude.

Tous ces essais seront dépouillés à l'aide de notre logiciel.

Par contre, le paramètre de thermodépendance β ne sera pas identifié. En effet, nous ne disposons pas d'essais avec un nombre suffisant de températures pour espérer le déterminer correctement. Dans ces conditions, son identification supposerait implicitement la justesse des calculs thermiques. Or, ce n'est pas le cas, car nous ne savons pas quelle part du travail mécanique est réellement transformée en chaleur (efficacité f). β joue un rôle dans l'évolution des forces en impact (seule grandeur mesurable) équivalent à celui de f [2]. Il est donc impossible de les identifier tous les deux sur la base des mêmes mesures de forces. Nous fixerons donc arbitrairement f à 1. On pourrait alors tenter de déterminer β . Mais il est fort probable que l'unicité de la solution ne soit pas assurée. Compte tenu de la forme de la thermodépendance choisie [$K_p = K \cdot \exp(\beta/T)$], la seule entité que nous pourrions identifier serait une « répartition spatiale » du rapport (β/T) qui autorise une reproduction correcte de la force. En effet, la valeur de la température T provient elle-aussi du calcul. Seul le recours à des mesures expérimentales de la température et l'emploi d'une fonction coût mixte (force / température) pourraient nous permettre, f étant toujours fixé, d'identifier le paramètre β . En l'état actuel des moyens expérimentaux, la seule solution reste la détermination de β et f par des essais indépendants et différents de ceux utilisés pour identifier la rhéologie. L'identification par analyse inverse se limitera alors aux autres paramètres, mais restera liée aux valeurs choisies pour β et f . Ce raisonnement peut d'ailleurs être étendu à tous les paramètres thermiques : capacité, conductivité et paramètres représentatifs des échanges thermiques.

Pour illustrer ce point, nous choisirons pour β , la valeur observée sur le polyéthylène, c'est-à-dire 466 K, imitant en cela, le choix probable d'un utilisateur habitué au polyéthylène et ne possédant que peu de renseignements sur le polypropylène.

3.2 Test de traction

Nous nous basons sur les essais de traction réalisés à vitesses de traverse constantes. De façon à approcher cette fois au mieux l'expérience, nous nous sommes placés dans la configuration représentée sur la Figure V - 4. De part son axisymétrie, seule une moitié d'éprouvette a été maillée de façon à alléger les calculs.

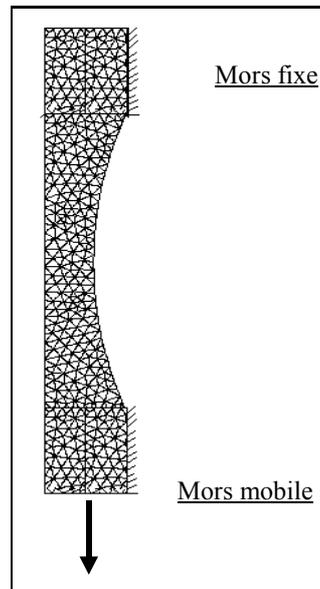


Figure V - 4 : Configuration de l'éprouvette utilisée pour l'identification du test de traction.

Les caractéristiques thermiques introduites dans le logiciel ont été adaptées à notre matériau. Elles sont consignées dans le Tableau V - 3.

Matériau		
	Masse volumique	$0,9 \cdot 10^{-6} \text{ kg} \cdot \text{mm}^{-3}$
	Conductivité thermique	$230 \text{ kg} \cdot \text{mm} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$
	Capacité calorifique	$1,68 \cdot 10^9 \text{ mm}^2 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
	Efficacité	1
Interface outil/éprouvette		
	Coefficient de transfert	$103 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mm}^{-2}$
	Température (outil)	23 °C
	Température (interface)	23 °C
	Effusivité (outil)	$12400 \text{ J} \cdot \text{C}^{-1} \cdot \text{mm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1/2}$
Interface matériau/face libre		
	Coefficient de transfert global	$17,3 \text{ W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mm}^{-2}$
	Température	23 °C
	Emissivité	0,9
	Convection	Libre

Tableau V - 3 : Caractéristiques thermiques du polypropylène.

Dans un premier temps, nous avons supposé que le contact entre les mors et l'éprouvette pouvait être assimilé à un contact collant, simulant ainsi une emprise parfaite des mors sur l'éprouvette.

Nous avons en outre veillé à respecter les longueurs d'emprises expérimentales. Pourtant, la faible pente observée sur la Figure V - 5 semble traduire un glissement des têtes de l'éprouvette dans les mors.

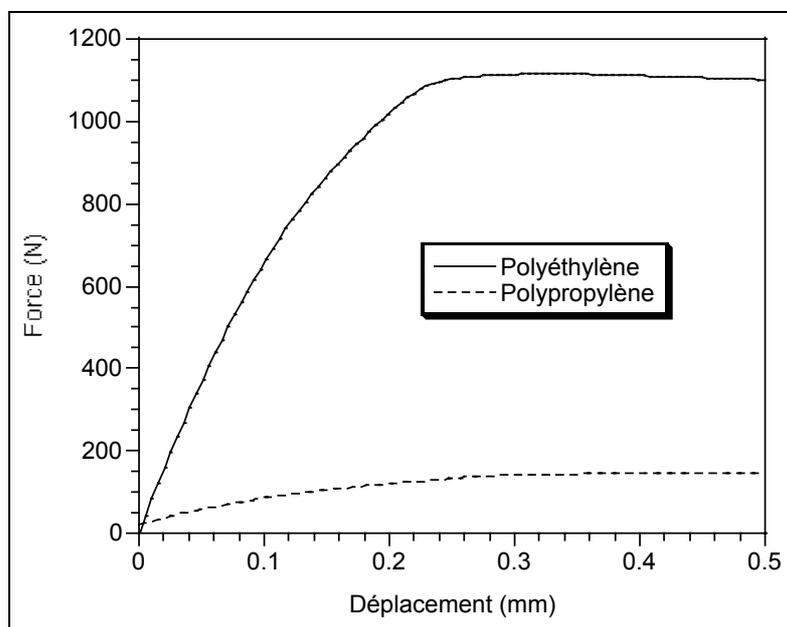


Figure V - 5 : Comparaison de la pente initiale entre le polyéthylène et le polypropylène.

Cette configuration n'a d'ailleurs pas permis au programme de Rhéologie Assistée par Ordinateur d'identifier un jeu de paramètres qui puisse reproduire fidèlement le comportement du polypropylène observé expérimentalement. Cette incapacité montre que le modèle direct ne prend pas en compte toutes les conditions opératoires et qu'il est par conséquent illusoire de penser identifier la rhéologie dans ces conditions. En d'autres termes, une méthode d'analyse inverse ne peut être efficace que si les conditions aux limites introduites dans le calcul direct sont représentatives de la réalité. Il est heureux, ici, que les effets de glissements soient si importants. S'ils avaient été plus faibles, il est probable que le logiciel les auraient « gommés » en fournissant des valeurs identifiées erronées. Nous avons donc été contraints de prendre en compte le glissement dans les mors. Dans le modèle direct, la modélisation du frottement est basée arbitrairement sur la loi tribologique de Norton (IV - 2).

Plutôt que d'effectuer une identification des paramètres rhéologiques en imposant une valeur arbitraire des coefficients de frottement α_f et p_B , nous avons cherché à réaliser une identification mixte et simultanée des coefficients rhéologiques et tribologiques. De façon à réduire le nombre de paramètres à identifier, nous avons choisi p_f égal au coefficient de sensibilité à la vitesse m , comme cela est habituel. En outre, pour que le logiciel puisse discriminer l'effet du glissement sur le déplacement, de celui de l'élongation du matériau, il est cette fois-ci indispensable d'introduire une

seconde grandeur observable, sous la forme de l'évolution du rayon minimal de l'éprouvette en cours de traction. D'un point de vue numérique, l'utilisation d'une fonction coût mixte (force et rayon minimal) est alors nécessaire. La fonction coût à minimiser se présente sous la forme définie par l'expression (V - I).

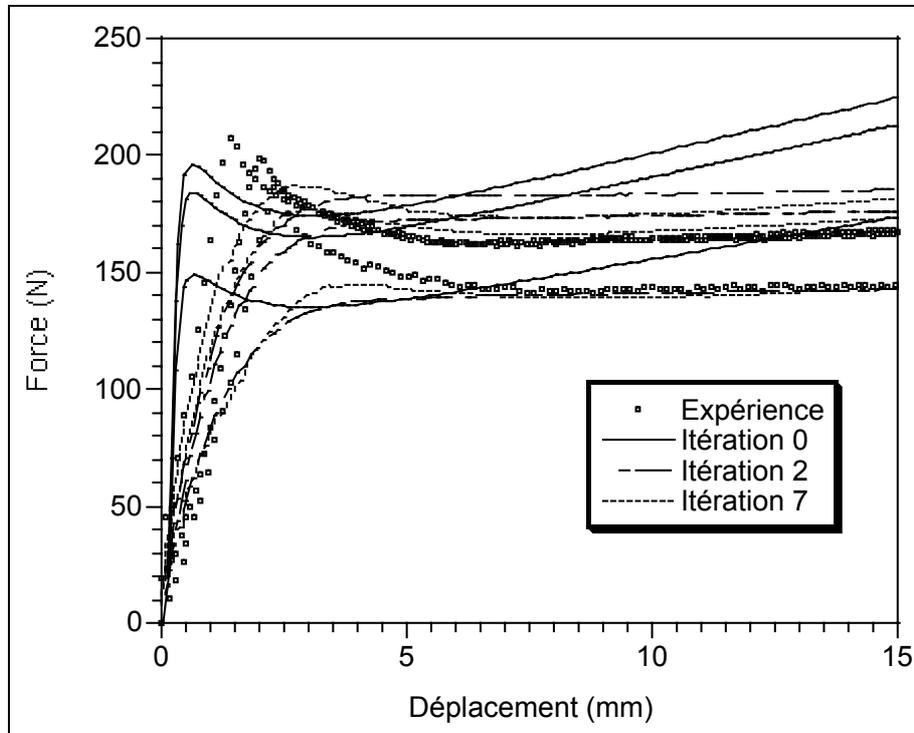


Figure V - 6 : Evolution de la force au cours des itérations d'optimisation.

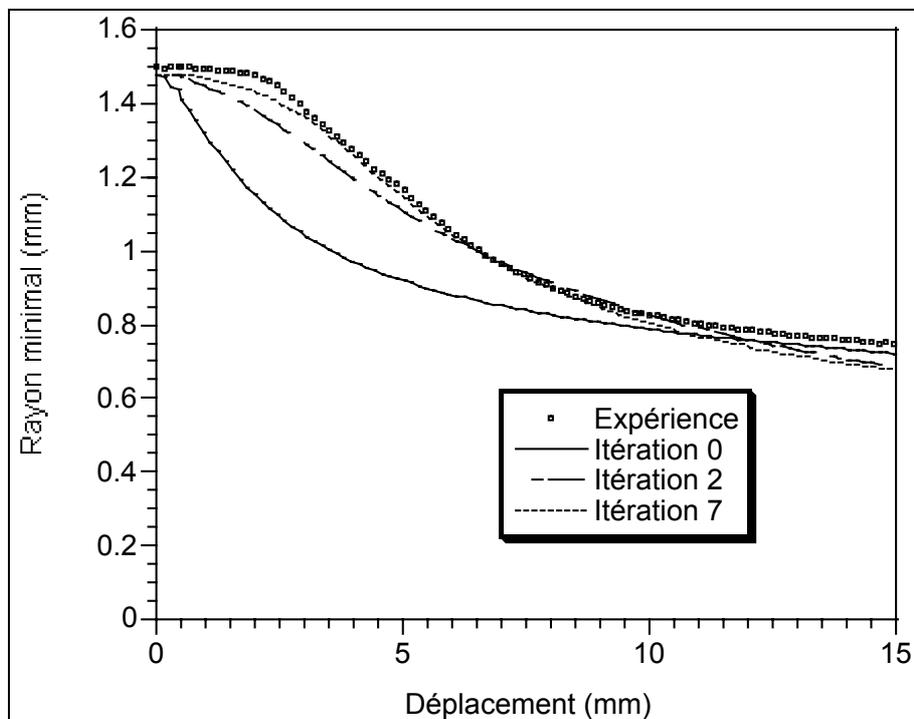


Figure V - 7 : Evolution du rayon minimal au cours des itérations d'optimisation.

La Figure V - 6 nous montre l'évolution de la force et la Figure V - 7 celle du rayon minimal au cours des itérations d'optimisation. On voit notamment comment la prise en compte du glissement de l'éprouvette dans les mors permet de mieux reproduire l'évolution atypique du rayon (diminution lente) au début de l'essai.

Le Tableau V - 4 regroupe les valeurs des différents paramètres avant l'identification et après huit itérations d'optimisation (soit après 15 h 24 min de calcul CPU). En introduisant la possibilité aux têtes de l'éprouvette de se mouvoir à l'intérieur des mors, l'accord global (force + rayon) entre les courbes expérimentales et les courbes simulées est passé de 31 % à 15 %, l'erreur finale sur la force étant de 12,5 % et celle sur le rayon minimal de 2,5 %.

	$K_p(\text{MPa}\cdot\text{s}^m)$	m	w	h	n	α	Fonction coût
Avant	37,6	0,093	61,7	1,05	1,50	1 (~ collant)	31 %
Après	37,6	0,083	23,0	0,92	1,27	0,75	15 %

Tableau V - 4 : Evolution des paramètres au cours de l'identification du polypropylène.

Il serait difficile d'aller plus loin dans cet exemple compte tenu des incertitudes résultant du choix des lois de comportement et de frottement. Les hypothèses particulièrement fortes concernant le comportement tribologique du dispositif (c'est-à-dire l'utilisation d'une loi de Norton) au niveau des mors ne permettent vraisemblablement pas d'améliorer ces résultats. Ils pourraient d'ailleurs n'avoir que peu de sens physique. Il serait également osé de comparer le jeu de paramètre trouvé à l'aide de notre logiciel à celui obtenu à l'aide de PARAMOPT dans le Chapitre II. les observables utilisées y résultaient en effet de mesures locales (système vidéométrique) qui permettaient de s'affranchir des glissements éventuels rencontrés dans les mors.

Par contre, cet exemple est plein d'enseignement d'une part quant à la nécessité de prendre en compte l'ensemble des conditions opératoires et d'autre part quant à la possibilité d'identifier d'autres grandeurs (frottement) pour peu que l'on possède un modèle physique (loi de frottement) et des données expérimentales (diamètre).

Une autre campagne d'essais de traction a été réalisée, en choisissant des mors plus adaptés à la petite taille des éprouvettes sablier de 3 mm de diamètre (Figure II - 27). Pour des raisons pratiques, ces essais ont été menés sur le banc d'essai INSTRÖN 4505 du Laboratoire Central de Solvay à BRUXELLES. Comme on peut le constater sur la Figure V - 8, les courbes sont très différentes des précédents essais de traction, notamment en ce qui concerne la première partie de la courbe.

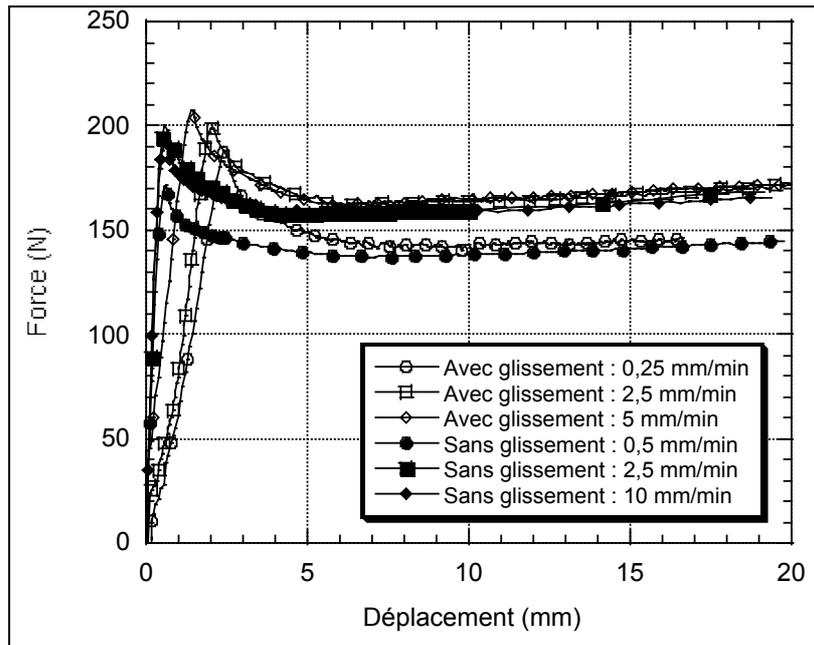


Figure V - 8 : Comparaison des expériences de traction avec et sans glissement des éprouvettes de polypropylène dans les mors.

Les coefficients issus de cette seconde campagne de mesure ne sont pas dramatiquement éloignés des précédents (Tableau V - 5). Par contre, l'erreur commise sur la force tombe à 8 %, sans avoir eu à émettre la moindre hypothèse quant au mode de glissement dans les mors.

Conditions	$K_p(\text{MPa}\cdot\text{s}^m)$	m	w	h	n	α	Fonction coût
Avec glissement	37,6	0,083	23,0	0,92	1,27	0,75	15 %
Sans glissement	29,2	0,057	25,8	0,93	1,16	1 (~ collant)	8 %

Tableau V - 5 : Modification des paramètres identifiés selon l'espace expérimental utilisé.

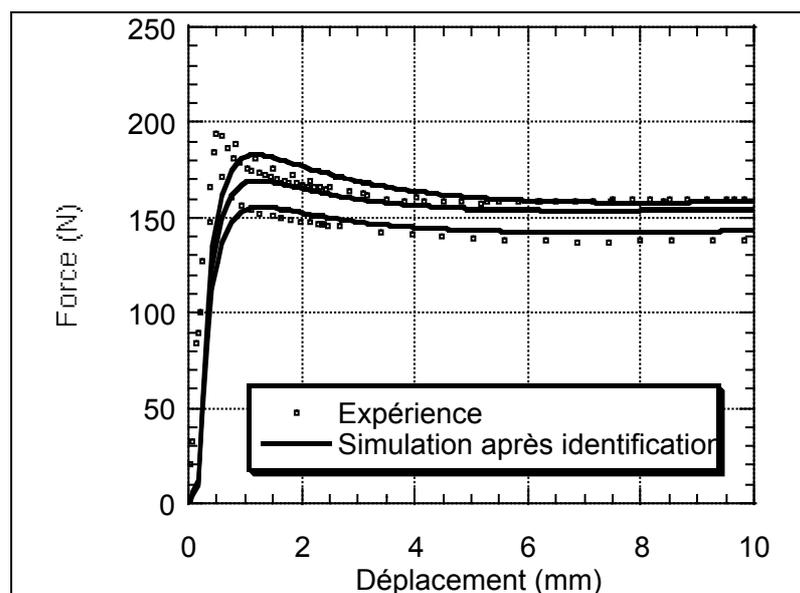


Figure V - 9 : Identification des coefficients du polypropylène en traction (0,5, 2,5 et 10 mm/min) sur la base d'essais « propres » (sans glissement dans les mors) à température ambiante.

Si les résultats sont meilleurs que dans le cas précédent, une imprécision notable subsiste toutefois dans la zone correspondant au maximum de la force (Figure V - 9). Celle-ci coïncide en particulier avec le développement du crochet de traction, ce que la loi de comportement, dans la configuration actuelle, n'est pas en mesure de modéliser.

En conclusion, si cette application à l'identification des paramètres représentatifs du comportement du polypropylène en traction uniaxiale nous a permis de montrer la faisabilité de la Rhéologie Assistée par Ordinateur en ce qui concerne l'identification « semi-automatique » et simultanée des coefficients rhéologiques et tribologiques, elle nous a également alertés sur la limite que constitue une base de données expérimentales erronée. En particulier, elle souligne que l'identification par analyse inverse ne saurait dispenser du contrôle de toutes des conditions expérimentales.

3.3 Test de poinçonnement

Tout comme pour les essais expérimentaux, les simulations utilisées pour identifier le comportement du polypropylène en poinçonnement ont été réalisées en supposant un contact glissant (une huile de vaseline Prolabo est utilisée expérimentalement pour lubrifier ce contact) entre le perceur et la plaque. Les essais ayant été réalisés sur une gamme de vitesse allant de 0,05 mm/min à 250 mm/min. Les identifications sont réalisées sur des plaques de 2 mm d'épaisseur pour des vitesses de 0,5 et 50 mm/min.

La configuration que nous avons employée pour le logiciel éléments finis est représentée sur la Figure V - 10.

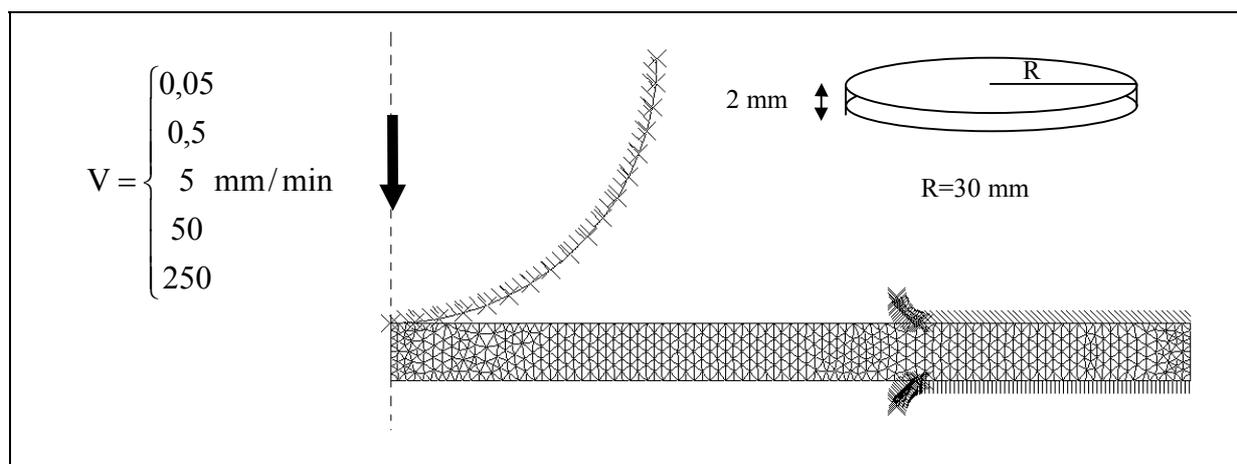


Figure V - 10 : Configuration de l'éprouvette utilisée pour l'identification du test de poinçonnement.

Dans un premier temps, nous avons réalisé une simulation à l'aide du logiciel FORGE2[®], pour chacune de ces vitesses, en associant à la loi de comportement polymère solide, le jeu de paramètres identifié précédemment en traction (Tableau V - 5). Comme le montre la Figure V - 11, la simulation ne semble guère pouvoir rendre compte du comportement, particulièrement aux grandes déformations : les paramètres h et n , déterminés en traction semblent en effet avoir tendance à surestimer le durcissement observé en sollicitation multiaxiale. Cela rejoint des observations plus anciennes [2, 3, 4, 5]. L'évolution microstructurale propre à chaque condition de chargement serait responsable de l'erreur commise sur l'estimation du durcissement structural. Pour contrebalancer ce phénomène, certains auteurs ont proposé de modifier la loi polymère solide en introduisant un terme de durcissement qui soit inversement proportionnel à la déformation équivalente. C'est ce que nous avons fait en adoptant la forme suivante :

$$\bar{\sigma} = \overbrace{K'}^{Kp'} \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) (1 - \exp(-w\bar{\epsilon})) (1 + h_1\bar{\epsilon} + h_2\bar{\epsilon}^2) \bar{\epsilon}^m \quad (V - 2)$$

Cette formulation « modifiée » de la loi de G'Sell présente l'avantage de ne pas ajouter de coefficient supplémentaire, mais doit être considérée comme un premier test, pas comme une loi physique validée.

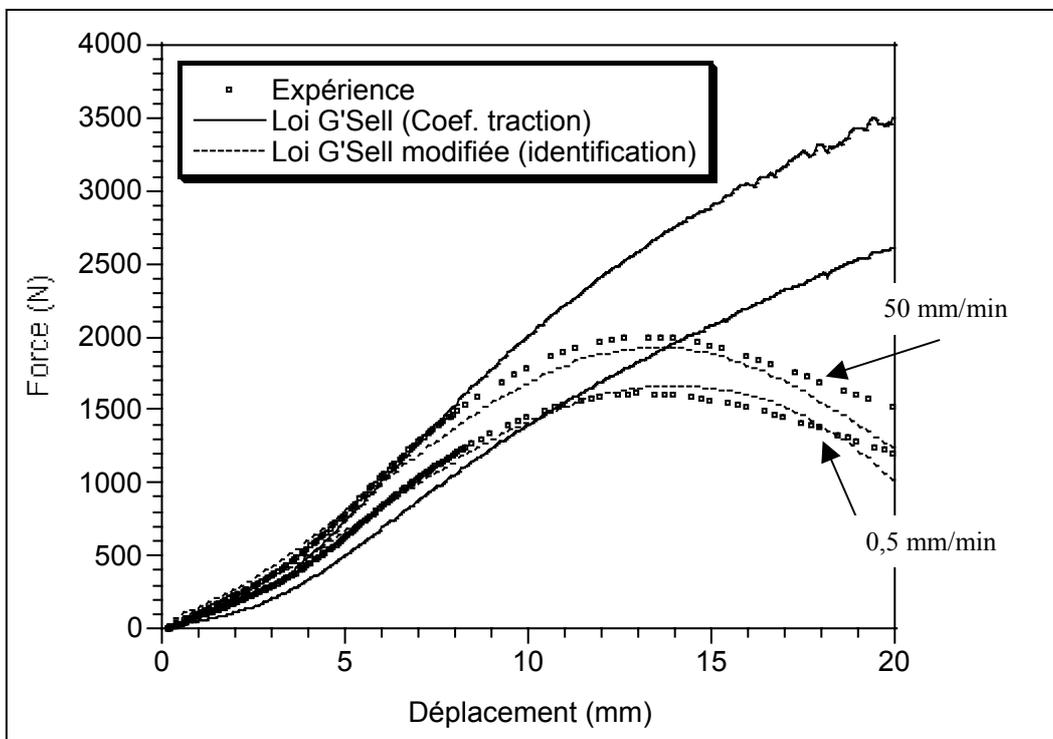


Figure V - 11 : Identification des coefficients rhéologiques du polypropylène en poinçonnement (loi G'Sell modifiée) – Comparaison avec les résultats de la loi G'Sell et les coefficients identifiés en traction.

Le Tableau V - 6 regroupe les valeurs des différents paramètres relatifs aux deux formulations de la loi. Comme on peut le constater sur la Figure V - 11, le jeu de paramètres obtenu après l'identification sur les tests de poinçonnement eux-mêmes, permet de diminuer l'écart entre les forces expérimentales et calculées de 31 % à 5,7 %. On note toutefois une légère surestimation de l'adoucissement aux fortes déformations, vraisemblablement liée à une surestimation de la dissipation mécanique ($f=1$) comme cela a déjà été suggéré [2]. En effet, la température atteinte à ce niveau de déformation augmente d'une vingtaine de degrés durant le poinçonnement (Figure V - 12).

	$Kp'(MPa.s^m)$	m	w	h	n	h_1	h_2	Fonction coût
G'Sell	17,9	0,100	100,0	0,9	0,3			31 %
G'Sell modifiée	17,4	0,045	106,8			1,04	0,32	5,7 %

Tableau V - 6 : Comparaison des paramètres du polypropylène pour la loi polymère solide de G'Sell et pour la loi G'Sell modifiée.

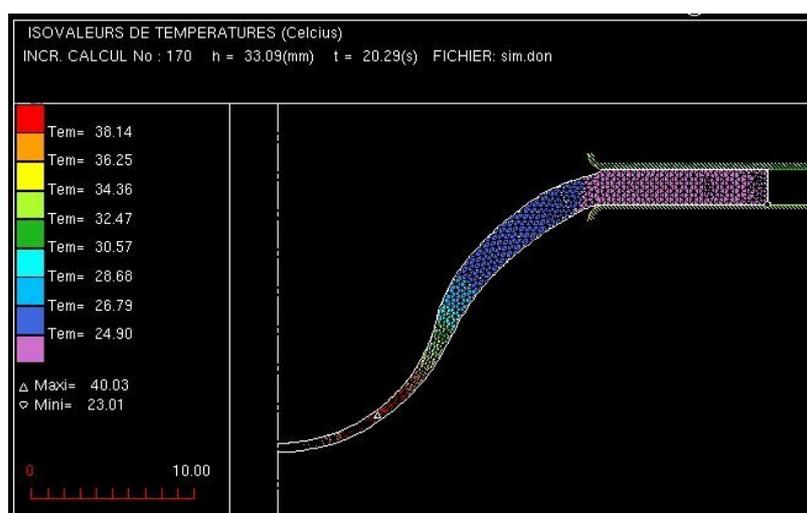


Figure V - 12 : Isovaleurs de température en Poids Tombant Instrumenté dans le cas du polypropylène.

Dans cette application, nous avons toutefois pu vérifier l'apport considérable de la Rhéologie Assistée par Ordinateur par rapport aux méthodes classiquement utilisées jusqu'alors. Aucun traitement analytique ne permettrait en effet d'identifier le comportement d'un matériau en sollicitation multiaxiale. En outre, nous avons vu comment la Rhéologie Assistée par Ordinateur peut s'avérer être une aide précieuse dans la recherche de nouvelles formes de lois de comportement phénoménologiques, par sa capacité à les tester dans des conditions complexes. Le choix que nous avons fait de calculer la matrice de sensibilité à l'aide d'un schéma de différences finies présente en effet l'avantage de pouvoir introduire aisément de nouvelles lois au sein du logiciel et de les tester très rapidement.

3.4 Test de Poids Tombant Instrumenté

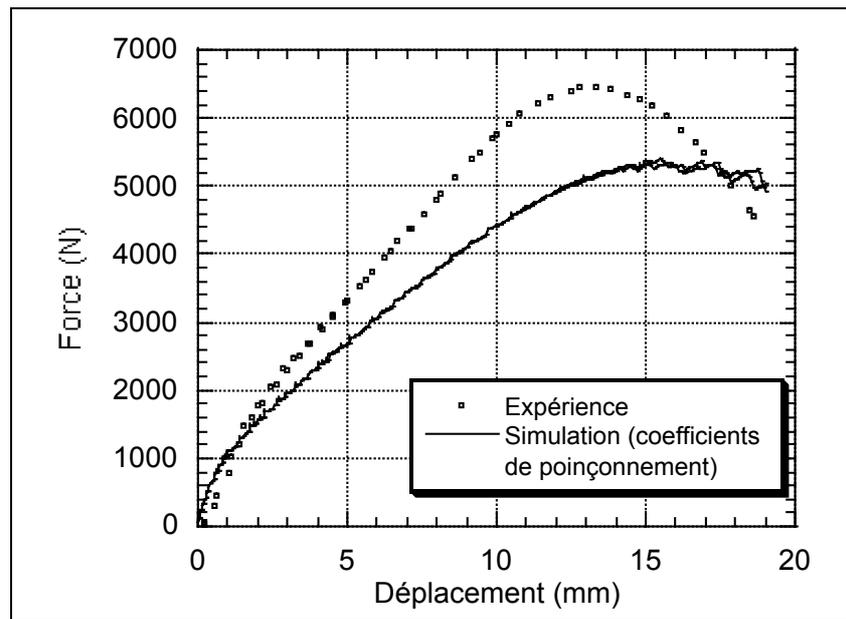


Figure V - 13 : Simulation d'un essai de Poids Tombant Instrumenté avec les coefficients identifiés en poinçonnement (loi de G'Sell modifiée).

La Figure V - 13 montre le résultat d'une simulation d'un essai de Poids Tombant Instrumenté sur des plaques de polypropylène de 5 mm d'épaisseur (à température ambiante) réalisée à l'aide des coefficients identifiés en poinçonnement. Ces coefficients ne sont de toute évidence pas en mesure de modéliser ces essais.

A ce niveau, deux paramètres ont été modifiés :

- la vitesse de sollicitation ;
- l'épaisseur des plaques et potentiellement leur microstructure du fait de la mise-en-œuvre.

Une identification réalisée directement sur les courbes expérimentales de Poids Tombant Instrumenté a donc été réalisée. Les conditions opératoires retenues pour l'identification sont résumées dans le Tableau V - 7.

Epaisseur de plaque (mm)	Masse du percuteur (kg)	Hauteur de chute (m)
5	15,24	1
5	15,24	5,1

Tableau V - 7 : Conditions opératoires utilisées pour l'identification.

Comme l'indiquent le Tableau V - 8 et la Figure V - 14, l'identification réalisée directement à partir des courbes de Poids Tombant Instrumenté donne d'excellents résultats quant à l'évolution de la force en fonction du déplacement du percuteur (5 %).

Les coefficients évoluent essentiellement dans la phase de durcissement. On pourrait imaginer une évolution des modifications microstructurales. Il s'agit plutôt vraisemblablement d'un problème d'adoucissement thermique surestimé qui obligerait à sous-estimer h_2 et à augmenter K_p . Il convient une fois encore de souligner l'importance de la caractérisation thermique du matériau. Faute de données précises, il est impossible de s'aventurer plus loin.

Base expérimentale	K' (MPa.s ^m)	m	w	h_1	h_2	Fonction coût
Poinçonnement	17,4	0,045	106,8	1,04	0,325	
Impact	24,1	0,045	100,0	1,04	-1,20	4,5 %

Tableau V - 8 : Paramètres du polypropylène identifié en Poids Tombant Instrumenté (loi polymère solide modifiée).

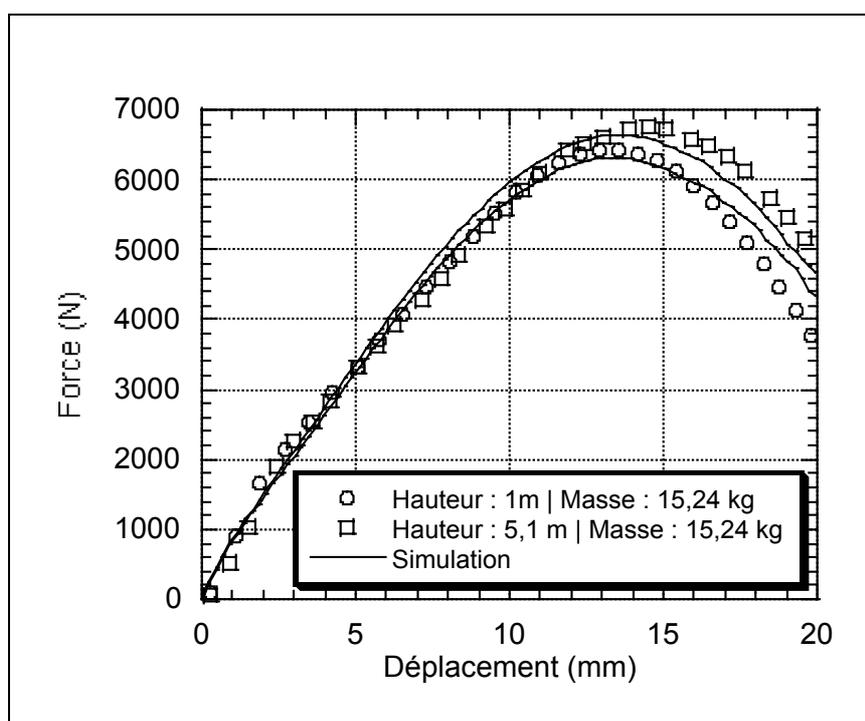


Figure V - 14 : Identification du comportement du polypropylène en impact [plaques de 5 mm d'épaisseur, 2 hauteurs de chutes différentes (15,24 kg/1 m et 15,24 kg/5m)] à 23 °C.

Afin de vérifier le caractère prédictif du logiciel, d'autres essais de Poids Tombant Instrumenté basés sur des conditions opératoires différentes de celles qui ont servi à l'identification (épaisseur des plaques, masse et hauteur de chute du percuteur ...) ont été simulés. Le Tableau V - 9 récapitule l'ensemble des conditions opératoires retenues.

Essai	Epaisseur (mm)	Masse (kg)	Hauteur de chute (m)	Extrapolation		
				En épaisseur	En masse	En Hauteur
Réf. 1	5	15,24	1			
Réf. 2	5	15,24	5,1			
a	5	25,24	1		✓	
b	5	15,24	0,6			✓
c	2	5,24	1	✓	✓	
d	2	5,24	0,6	✓	✓	✓
e	2	5,24	5,1	✓	✓	
f	2	3,24	1	✓	✓	
g	2	10,24	1	✓	✓	

Tableau V - 9 : Conditions opératoires retenues pour les simulations d'essais de Poids Tombant Instrumenté (différences par rapport à l'espace expérimental utilisé pour l'identification).

Les courbes des Figure V - 15 et Figure V - 16 montrent les résultats de ces extrapolations en termes d'évolution de la force en fonction du déplacement.

Comme on peut le constater sur ces courbes, les résultats sont très satisfaisants, l'écart le plus important entre l'expérience et la simulation étant relevé dans le cas de figure le plus défavorable pour lequel aucune des conditions opératoires ayant servi à l'identification n'était respectée (Figure V - 16d).

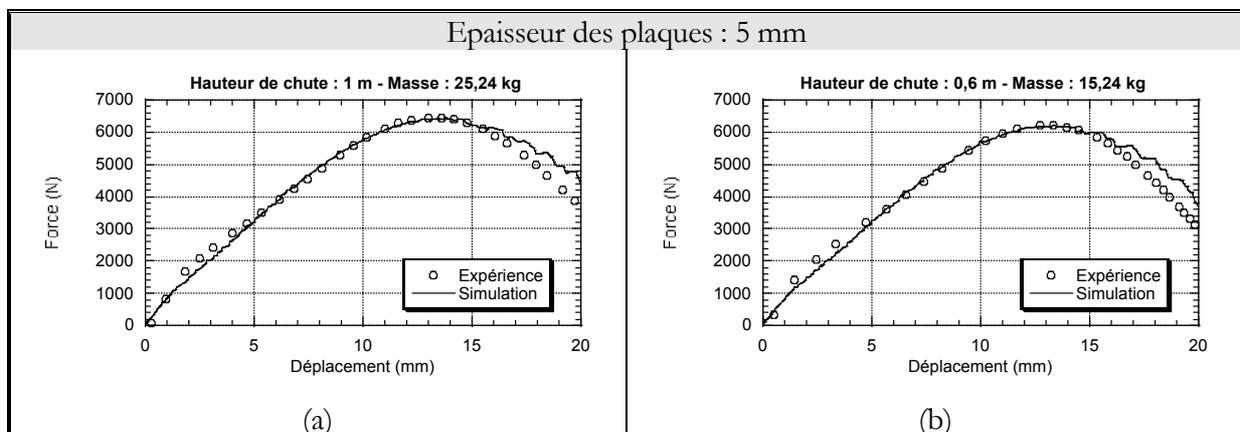


Figure V - 15 : Résultats des différentes extrapolations simulées en Poids Tombant Instrumenté sur du polypropylène à température ambiante – plaques de 5 mm d'épaisseur.

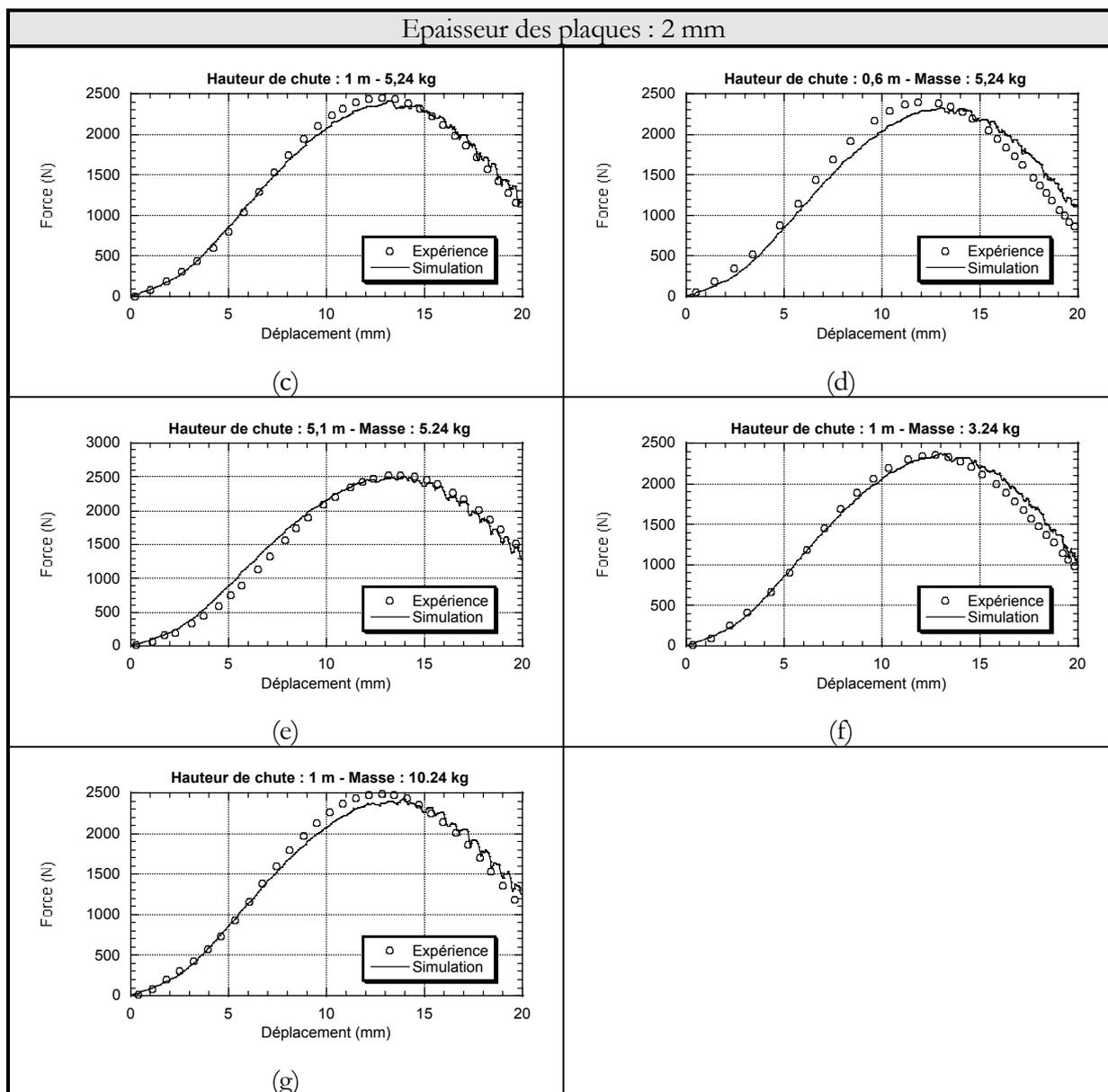


Figure V - 16 : Résultats des différentes extrapolations simulées en Poids Tombant Instrumenté sur du polypropylène à température ambiante – plaques de 2 mm d'épaisseur.

Le fait qu'un même jeu de paramètres permet de modéliser aussi bien des plaques de 2 mm d'épaisseur que des plaques de 5 mm, tend à prouver que le problème de l'extrapolation du test de poinçonnement de plaques de 2 mm à l'impact de plaques de 5 mm n'était qu'un problème de vitesse.

Pourtant, compte tenu de nos incertitudes quant à la résolution thermique (f , β , sans oublier les échanges avec l'extérieur toujours délicats à chiffrer), il est impossible de dire s'il s'agit d'une mauvaise modélisation de la sensibilité à la vitesse ou une mauvaise estimation de l'évolution de la température.

Nous avons ici répondu à notre objectif technologique : définir un jeu de paramètres permettant de reproduire le comportement macroscopique du polymère. Il faut entendre par jeux de paramètres, l'ensemble des coefficients thermiques et rhéologiques associés.

Pour réellement discriminer ces deux effets, il faudrait caractériser le problème thermique du système et du matériau. Si nous avons donné à β une valeur plus réaliste pour le polypropylène (1720 K), nous aurions déterminé un jeu différent mais tout aussi efficace (Tableau V - 10 et Figure V - 17).

Base expérimentale	β	$K'(\text{MPa}\cdot\text{s}^m)$	m	w	h_1	h_2	Fonction coût
Impact	466	24,1	0,045	100,0	1,04	-1,20	4,5 %
Impact	1720	0,1	0,045	30,0	0,75	0,51	4,2 %

Tableau V - 10 : Comparaison des résultats de l'identification par R.A.O. des coefficients du polypropylène en impact à partir de valeurs de β différentes – Conditions de l'identification : plaques de 5 mm d'épaisseur, une masse et deux hauteurs de chute (15,24 kg/1 m et 15,24 kg/5m) à 23 °C

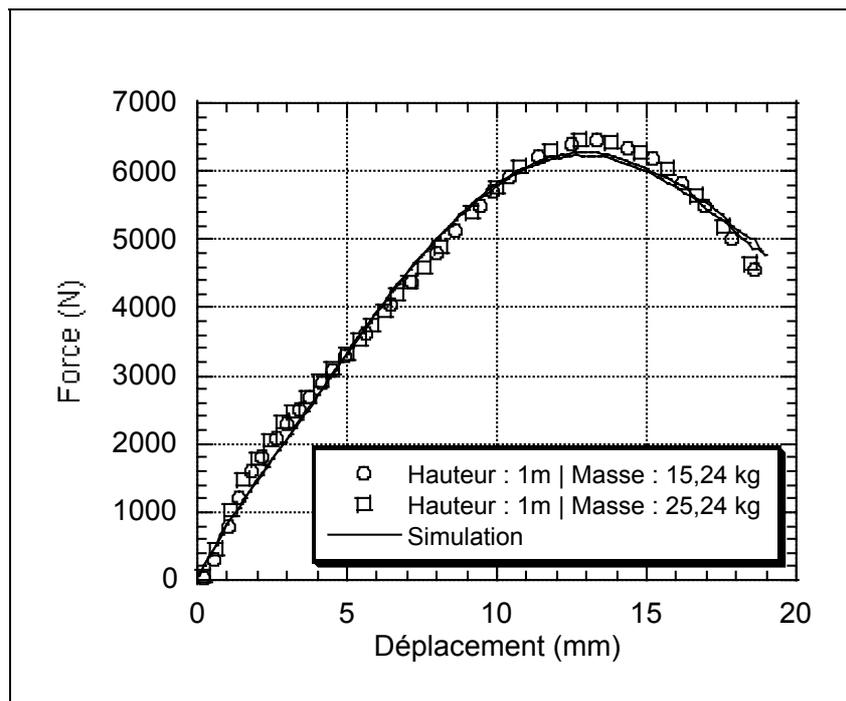


Figure V - 17 : Simulation directe avec les coefficients du polypropylène identifiés en impact avec un β de 1720 K – Conditions de simulations : plaques de 5 mm d'épaisseur, une seule hauteur de chute et deux masses (15,24 kg/1 m et 25,24 kg/1m) à 23 °C.

4 Conclusion

Le chapitre précédent avait permis de mettre en évidence la faisabilité de la méthode grâce à différents tests numériques faisant appel à des bases expérimentales artificielles et donc

« contrôlées ». Au cours de ce chapitre, le logiciel d'identification par analyse inverse a été appliqué avec succès à l'identification des paramètres rhéologiques des polymères « réels » sélectionnés pour la disparité de leur comportement. Dans le cas des essais de traction « moyennes vitesses » abordés au chapitre II, l'écart entre les observables expérimentales et simulées diminue sensiblement par rapport aux méthodes d'identification classiques utilisées jusqu'alors.

L'emploi d'une fonction coût « mixte » (force et diamètre minimal) a permis en outre de montrer la faisabilité d'une identification simultanée de la rhéologie du polypropylène sollicité en traction et d'un coefficient tribologique caractérisant le glissement de l'éprouvette dans les mors. Cette étape confirme de plus que l'utilisation d'un tel logiciel ne dispense pas d'effectuer un travail expérimental soigné et minutieux.

Le logiciel a également permis de mettre en évidence les limites de la loi de comportement de G'Sell utilisée en traction : elle ne permet de modéliser ni le crochet de traction du polypropylène, ni le durcissement structural caractéristique des sollicitations multiaxiales. Toutefois, moyennant la modification des termes appropriés, l'analyse inverse a rendu possible l'identification d'une approximation du comportement au choc du polypropylène à partir d'un essai de Poids Tombant Instrumenté.

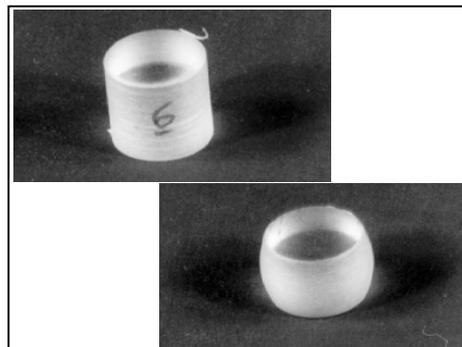
Enfin, la possibilité d'extrapoler ce comportement à d'autres conditions opératoires (modification de l'épaisseur des plaques et/ou de la hauteur de chute du percuteur) fait de ce logiciel un outil prédictif.

Bibliographie du chapitre 5

- [1] **A. GAVRUS**, « *Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, CEMEF, (1996)
- [2] **M.-L. BISILLIAT**, « *Comportement mécanique d'un polycarbonate à grande vitesse de sollicitation – Etude expérimentale et simulation* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1997)
- [3] **O. SCHANG, J.-M. MURACCIOLE, F. FERNAGUT, N. BILLON**, Polym. Eng. Sci., **36**, p. 541, (1996)
- [4] **N. BILLON, L. MAURIN, Y. GERMAIN**, in Proc. 1st International Conference on Mechanics of Time Dependent Materials, SEM, Ljubljana (Slovenia), p. 293, (1995)
- [5] **N. BILLON, J.-M. HAUDIN**, Polym. Eng. Sci., **37**, p. 1761, (1997)

Chapitre 6

PERSPECTIVES



1	<i>Introduction</i>	225
2	<i>Calcul de sensibilité par dérivations analytiques</i>	225
3	<i>Autres sollicitations</i>	231

1 Introduction

L'outil que nous avons développé répond aux objectifs que nous nous étions fixés. Il permet en effet d'identifier les paramètres rhéologiques de polymères solides lors d'essais rapides et multiaxiaux, dans un cadre de loi définie.

Son apport a été clairement démontré. Il peut cependant évoluer suivant trois axes :

- un *axe technologique* avec la prise en compte de lois de comportement rencontrées plus couramment dans les codes de calculs visés (RADIOSS, ABAQUS, PAM CRASH, MARQ ...);
- un *axe physique* avec la prise en compte d'autres lois de comportement ;
- un *axe numérique* en améliorant notre module d'optimisation ;
- un *axe expérimental* en envisageant d'autres géométries de sollicitation.

Lever les limitations liées à notre choix de loi de comportement est certainement une perspective importante. Mais nous sortons là du cadre de l'identification proprement dite. Il s'agit du travail du physicien, qui doit proposer des lois plus pertinentes, puis de celui du numéricien, qui devra en tenir compte dans le modèle direct. Notre logiciel peut, quant à lui, être utilisé comme une aide à la réflexion en autorisant une exploitation précise d'essai plus ou moins complexes.

Dans l'immédiat, il est envisageable d'apporter une amélioration numérique au logiciel par le biais d'un calcul différent de la matrice de sensibilité. De plus, son utilisation dans d'autres types de géométrie peut élargir son champ d'action. Nous allons préciser ces deux derniers points.

2 Calcul de sensibilité par dérivations analytiques

Comme nous l'avons évoqué brièvement au cours du chapitre III et expérimenté dans le chapitre IV, le principal inconvénient du calcul de sensibilité par différences finies réside dans le fait que l'évaluation de la fonction coût nécessite de nombreuses simulations. Cela peut rapidement devenir prohibitif pour peu que le nombre de courbes expérimentales soit important et si la durée de chaque simulation est importante, ce qui est en particulier le cas lorsque la configuration du test nécessite de nombreux maillages. Nous présentons ici le principe d'un calcul de sensibilité par différentiation directe des équations caractéristiques du problème direct (« méthode de différentiation directe » [1]) qui est de nature à améliorer ce point. Cette technique a déjà été utilisée dans d'autres approches [2].

Le principal avantage de la méthode analytique directe réside dans le fait que le calcul de la fonction coût et de ses dérivées par rapport aux r paramètres à identifier se font simultanément. Par rapport à la méthode de différences finies qui nécessite au moins $(r+1)$ simulations, la méthode est donc nettement moins coûteuse en temps de calcul. Cette technique a déjà été présentée au chapitre précédent (Ch. III § 3.3.4.4.b). Faute de temps, nous n'avons pas pu la mettre en œuvre. Nous évoquerons toutefois, dans ce qui suit, la façon avec laquelle elle peut être adaptée à nos choix.

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 2.8.2.5. du chapitre IV, une fois appliquée à notre problème, l'équation représentant l'ensemble des équations thermomécaniques (III – 43) autour desquelles est bâti le modèle direct peut s'écrire sous la forme condensée (IV – 71) :

$$\begin{cases} \mathbf{R}(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t, \underline{\mathbf{X}}^t, \underline{\mathbf{V}}^t, T^t) = 0 \\ \mathbf{S}(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t, \underline{\mathbf{X}}^t, \underline{\mathbf{V}}^t, T^t, T^{t-\Delta t}, \dot{T}^t, \dot{T}^{t-\Delta t}, \underline{\mathbf{V}}^{t-\Delta t}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{t-\Delta t}, T^{t-\Delta t}, \dot{T}^{t-\Delta t}) = 0 \end{cases}$$

Les principales conditions aux limites sont quant à elles :

$$\begin{cases} \underline{\mathbf{v}} - \underline{\mathbf{v}}^d = 0 \text{ sur } \partial\Omega_v \\ \underline{\mathbf{v}} \cdot \underline{\mathbf{n}} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_c \end{cases} \quad (\text{VI - 1})$$

On cherche toujours à minimiser la fonction coût Q définie en (III – 8). Le problème mécanique étant résolu à l'aide d'une formulation en vitesse, toutes les grandeurs qui apparaissent dans le modèle direct sont exprimées (au niveau discret) en fonction des vitesses nodales. En conséquence, la fonction coût peut être considérée comme une fonction des paramètres \mathbf{P} à identifier, mais aussi du vecteur position (que nous noterons \mathbf{x} pour simplifier), du vecteur vitesse (\mathbf{v}), de la déformation ($\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$) et de la température (T) aux points matériels :

$$Q(\mathbf{P}) = Q(\mathbf{P}, \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{P}), \mathbf{x}(\mathbf{P}), \mathbf{v}(\mathbf{P}), T(\mathbf{P})) \quad (\text{VI - 2})$$

La différentiation de cette équation par rapport aux paramètres à identifier \mathbf{P} conduit à :

$$\begin{aligned} \frac{dQ}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}) &= \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{P}}(\mathbf{P}) + \frac{\partial Q}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}(\mathbf{P}) \frac{d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}) + \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{P}) \frac{d\mathbf{x}}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}) \\ &+ \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{P}) \frac{d\mathbf{v}}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}) + \frac{\partial Q}{\partial T}(\mathbf{P}) \frac{dT}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}) \end{aligned} \quad (\text{VI - 3})$$

L'équation (VI – 3) fait apparaître deux types de termes :

- les dérivées partielles $\partial Q/\partial P(\mathbf{P}), \partial Q/\partial \bar{\varepsilon}(\mathbf{P}), \partial Q/\partial v(\mathbf{P}), \partial Q/\partial T(\mathbf{P})$ qui expriment la sensibilité de la fonction coût par rapport à tous les paramètres du problème ;
- les dérivées exactes $d\bar{\varepsilon}/dP(\mathbf{P}), dx/dP(\mathbf{P}), dv/dP(\mathbf{P}), dT/dP(\mathbf{P})$ qui expriment la sensibilité des paramètres du problème par rapport aux paramètres rhéologiques P.

Concernant les premières, rappelons que Q est directement relié aux observables, M^c , qui sont, quant à elles, directement reliées aux grandeurs mécaniques $\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}$ et $\bar{\varepsilon}$.

De l'expression (III – 8), il ressort que chacune de ces dérivées partielles peut s'exprimer en toute généralité sous la forme :

$$\frac{\partial Q}{\partial q} = G\left(M^c, \frac{\partial M^c}{\partial q}\right) \quad (\text{VI - 4})$$

si nous appelons q, un ensemble quelconque des paramètres du problème ($q = \{P, \bar{\varepsilon}, T\}$).

Dans le cas où M^c est la force, le terme $\partial M^c/\partial q$ pourra d'écrire sous la forme générale :

$$\frac{\partial M^c}{\partial q} = H\left(\underline{\underline{\sigma}}, \frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial q}\right) \quad (\text{VI - 5})$$

c'est-à-dire que d'après (I – 32), nous devons évaluer par exemple :

$$\frac{d\underline{\underline{\sigma}}}{dP} = -\frac{dp}{dP} \mathbf{I} + \frac{ds}{dP} \quad (\text{VI - 6})$$

avec

$$\frac{ds}{dP} = \frac{\partial s}{\partial P} + \frac{\partial s}{\partial \bar{\varepsilon}} \frac{d\bar{\varepsilon}}{dP} + \frac{\partial s}{\partial x} \frac{dx}{dP} + \frac{\partial s}{\partial v} \frac{dv}{dP} + \frac{\partial s}{\partial T} \frac{dT}{dP} \quad (\text{VI - 7})$$

Les expressions (VI - 6) et (VI - 7) font intervenir ainsi les dérivées par rapport aux paramètres rhéologiques de toutes les variables internes qui décrivent la résolution discrète du problème direct. Ainsi, dans le cas d'une loi de comportement de type Norton-Hoff définie sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{s}} = F(\underline{\underline{P}}, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}, T) \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \\ F = \frac{2}{3} \frac{\bar{\underline{\underline{\sigma}}}}{\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} = 2K(\underline{\underline{P}}, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, T) (\sqrt{3} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}})^{m-1} \\ \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \left[\frac{2}{3} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} : \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \right]^{1/2} \\ \bar{\underline{\underline{\sigma}}} = \bar{\underline{\underline{\sigma}}}(\underline{\underline{P}}, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}, T) \end{array} \right. \quad (\text{VI - 8})$$

L'équation (VI - 7) s'écrit :

$$\frac{d\underline{\underline{s}}}{d\underline{\underline{P}}} = \sum_{q \in \{\underline{\underline{P}}, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, T\}} \frac{\partial F}{\partial q} \frac{dq}{d\underline{\underline{P}}} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} + F \frac{d\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}{d\underline{\underline{P}}} + \frac{2}{3\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} \frac{\partial F}{\partial \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} \left(\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} : \frac{d\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}{d\underline{\underline{P}}} \right) \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} \quad (\text{VI - 9})$$

Si l'on suppose que le coefficient de sensibilité à la vitesse, m , est constant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall q \in \{\underline{\underline{P}}, \bar{\underline{\underline{\varepsilon}}}, T\}, \frac{\partial F}{\partial q} = 2 \frac{\partial K}{\partial q} (\sqrt{3} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}})^{m-1} \\ \frac{\partial F}{\partial \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}} = 2K\sqrt{3}(m-1) (\sqrt{3} \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}})^{m-2} \end{array} \right. \quad (\text{VI - 10})$$

Comme le tenseur des vitesses de déformation nodales est calculé à l'aide d'une méthode de lissage d'Orkisz, sa dérivée par rapport au vecteur paramétrique s'obtient alors à l'aide de la relation :

$$\frac{d\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}}{d\underline{\underline{P}}} = \left[\frac{\partial B_0}{\partial x} \frac{dx}{d\underline{\underline{P}}} \right]_{\underline{\underline{v}}} + B_0 \frac{d\underline{\underline{v}}}{d\underline{\underline{P}}} \quad (\text{VI - 11})$$

B_0 étant l'opérateur qui définit le lissage par la méthode d'Orkisz.

Le même développement peut être appliqué à toutes les dérivées partielles. Retenons simplement que les termes $\partial Q/\partial q$ qui interviennent dans l'expression de la variation de la fonction coût avec les paramètres rhéologiques peuvent être écrits successivement :

- en fonction des grandeurs observables calculées *via* sa définition (VI - 4) ;
- en fonction des paramètres internes du modèle direct *via* la nature de l'observable (contrainte pour la force) et la loi de comportement choisie [équations (VI - 6) à (VI - 10)] ;
- en fonction des variables nodales calculées (ici les vitesses) *via* éventuellement nos choix numériques (ici le lissage d'Orkisz) [équation (VI - 11)] ;

Ces termes sont analytiquement reliés aux variables nodales utilisées par le modèle direct.

En ce qui concerne les autres dérivées $d\bar{\varepsilon}/dP(P)$, $dX/dP(P)$, $dV/dP(P)$, $dT/dP(P)$, elles ne s'obtiennent pas immédiatement à partir du modèle direct. Elles peuvent être calculées selon deux approches : variationnelle ou discrète. Dans le premier cas, les équations caractéristiques continues du problème direct sont différenciées, puis les équations qui résultent de cette différenciation sont résolues à l'aide d'une approche variationnelle [3]. La seconde méthode, que nous allons détailler, consiste à différencier les équations discrètes du problème [4]. Dans ce cas de figure, il est nécessaire de considérer l'équation (VI - 2) sous sa forme discrète, c'est-à-dire exprimée aux nœuds du maillage.

$$Q_h(P) = Q_h(P, \bar{\varepsilon}(P), X(P), V(P), T(P)) \quad (VI - 12)$$

où $\bar{\varepsilon}$, X , V et T sont cette fois-ci les grandeurs nodales de la déformation, du vecteur position, du vecteur vitesse et de la température.

Après différenciation, (VI - 12) devient :

$$\begin{aligned} \frac{dQ_h}{dP}(P) = & \frac{dQ_h}{dP}(P) + \frac{\partial Q_h}{\partial \bar{\varepsilon}}(P) \frac{d\bar{\varepsilon}}{dP}(P) + \frac{\partial Q_h}{\partial X}(P) \frac{dX}{dP}(P) \\ & + \frac{\partial Q_h}{\partial V}(P) \frac{dV}{dP}(P) + \frac{\partial Q_h}{\partial T}(P) \frac{dT}{dP}(P) \end{aligned} \quad (VI - 13)$$

Ici encore, les dérivées partielles $\partial Q_h/\partial P(P)$, $\partial Q_h/\partial \bar{\varepsilon}(P)$, $\partial Q_h/\partial V(P)$, $\partial Q_h/\partial T(P)$ peuvent s'obtenir aisément à partir de la définition de Q . Par contre, les dérivées $dV/dP(P)$, $d\dot{T}/dP(P)$ et $d\bar{\varepsilon}/dP(P)$ s'obtiennent désormais par différenciation des équations discrètes du problème direct, tandis que $dX/dP(P)$ et $dT/dP(P)$ s'obtiennent respectivement en intégrant sur le temps $dV/dP(P)$. En effet, on a :

$$\begin{cases} \frac{dV}{dP} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dX}{dP} \right) \\ \frac{d\dot{T}}{dP} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dT}{dP} \right) \end{cases} \quad (VI - 14)$$

Par ailleurs, en accord avec les conditions aux limites imposées dans le modèle direct, celles concernant les dérivées s'expriment :

- pour les variables géométriques :

$$\frac{dX}{dP}(t=0) = 0 \text{ sur } \Omega_h \quad (\text{VI - 15})$$

- pour les termes de vitesses nodales :

$$\begin{cases} \frac{dV}{dP} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{hv} \\ \frac{dV}{dP} \cdot \hat{n} + (V - V^{\text{outil}}) \cdot \frac{d\hat{n}}{dP} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{hc} \end{cases} \quad (\text{VI - 16})$$

- pour les termes de température :

$$\frac{dT}{dP}(t=0) = 0 \text{ sur } \Omega_h \quad (\text{VI - 17})$$

Nous avons vu au cours du chapitre III, qu'un problème de sensibilité pouvait être formulé par la différentiation des équations caractéristiques du modèle (III – 46). Si on dérive par rapport aux paramètres rhéologiques les équations fondamentales qui définissent la résolution éléments finis du modèle direct [(IV – 56) et (IV – 63)], on obtient le système de sensibilité **linéaire** en dV^t/dP et en dT^t/dP :

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial V^t} \cdot \frac{dV^t}{dP} + R^t = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial T^t} \cdot \frac{dT^t}{dP} + S^t = 0 \end{cases} \quad (\text{VI - 18})$$

où R^t et S^t représentent les termes de sensibilité déterminés avec les dérivées par rapport aux variables d'état calculées aux incréments précédents :

- pour les dérivées du résidu :

$$R^t = \frac{\partial R}{\partial P} + \frac{\partial R}{\partial \bar{\varepsilon}^t} \frac{d\bar{\varepsilon}^t}{dP} + \frac{\partial R}{\partial X^t} \frac{dX^t}{dP} + \frac{\partial R}{\partial T^t} \frac{dT^t}{dP} \quad (\text{VI - 19})$$

- pour les termes correspondant à l'équation de la chaleur :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^t = & \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t} \frac{d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^t}{d\mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{V}^t} \frac{d\mathbf{V}^t}{d\mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{X}^t} \frac{d\mathbf{X}^t}{d\mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{T}^t} \frac{d\mathbf{T}^t}{d\mathbf{P}} \\
 & + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{t-\Delta t}} \frac{d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{t-\Delta t}}{d\mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{V}^{t-\Delta t}} \frac{d\mathbf{V}^{t-\Delta t}}{d\mathbf{P}} + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{T}^{t-\Delta t}} \frac{d\mathbf{T}^{t-\Delta t}}{d\mathbf{P}}
 \end{aligned}
 \tag{VI - 20}$$

La résolution du système (VI - 18), toujours linéaire, nécessite la détermination du Hessien $\mathbf{H} = d\mathbf{V}^t/d\mathbf{P}$ et de la matrice de capacité $\mathbf{C}^t = d\mathbf{T}^t/d\mathbf{P}$. Or ces matrices ont déjà été calculées et triangularisées à la fin de chaque incrément du modèle direct. Le principal calcul supplémentaire qu'entraîne la méthode de différentiation analytique se situe donc dans la détermination des termes de sensibilité \mathbf{R}^t et \mathbf{S}^t .

Donc, en exprimant analytiquement la matrice de sensibilité, il est possible d'utiliser des grandeurs qui, de toute façon sont calculées par le modèle direct. On gagne ainsi en temps de calcul mais aussi en précision, l'identification n'étant plus sensible au choix du petit incrément $\delta\mathbf{P}$ indispensable lors du calcul de la matrice de sensibilité par différences finies.

Par contre, le code est désormais totalement « spécialisé ». Le module d'optimisation étant désormais entièrement lié au calcul direct, nous perdons par conséquent en souplesse d'utilisation.

3 Autres sollicitations

En l'état actuel de notre approche, toute sollicitation ayant une géométrie axisymétrique est envisageable, aux restrictions près que les conditions aux limites soient parfaitement dominées et modélisées, et que les grandeurs observables autorisent l'identification des paramètres.

L'essai de compression, qui paraît souvent simple à exploiter, vient immédiatement à l'esprit. Les courbes contraintes vraies *vs* déformations vraies peuvent être obtenues relativement aisément, y compris aux plus hautes vitesses. Cependant, leur validité est directement liée aux hypothèses que requièrent les méthodes de dépouillement classiques. Les hypothèses d'homogénéité des déformations sont semblables à celles spécifiées à l'occasion de l'essai de traction (Ch. II § 3.4.2.1).

Comme en traction, les hypothèses d'homogénéité sont moins fortes si l'on utilise un système vidéométrique ou des extensomètres. Elles ne sont toutefois pas totalement vérifiées [5], la déformation évoluant le long du rayon de l'éprouvette. Les effets thermiques sont tout aussi importants [5, 6] et sont de nature à contrebalancer le durcissement.

Dans le cadre spécifique de notre approche, il faut aussi admettre que la validité du facteur de triaxialité de Bridgman (qui suppose que le rayon de courbure des éprouvettes est grand devant leur diamètre) n'est pas établi.

Enfin, si les éprouvettes sont sollicitées entre deux tas plats, les effets de frottement sont importants.

Ainsi, des études récentes [5, 7] ont montré que :

1. dans le cas d'éprouvettes cylindriques entre tas plats, plusieurs inconnues subsistent, la principale étant la nature exacte du contact entre l'éprouvette et les tas plats et la seconde étant la validité du facteur de Bridgman au delà d'une déformation de l'ordre de 0,3 (limite d'homogénéité).
2. dans le cas d'éprouvettes sablier, si certaines hypothèses de Bridgman semblent effectivement admissibles, il apparaît que le facteur de triaxialité prévu par la simulation demeure relativement éloigné de celui proposé par Bridgman.

L'application à l'essai de compression de la méthodologie que nous avons développée permettrait vraisemblablement :

1. de s'affranchir des effets tribologiques dans le cas des éprouvettes cylindriques en modélisant le frottement ;
2. d'éviter l'étape, indispensable dans le cas des méthodes de dépouillement usuelles, de la transformation des grandeurs technologiques en grandeurs intrinsèques aux matériaux ;
3. éviter le passage par le facteur de Bridgman et donc de gagner en précision ;
4. d'envisager des essais rapides, y compris dans la phase de déformation plastique.

L'usage de fonctions coût mixtes, force – température, quel que soit l'essai, devrait en outre permettre de mieux comprendre les phénomènes de transformation travail mécanique – chaleur, pour peu que l'on puisse mesurer correctement les températures en cours d'essais.

La prise en compte de sollicitations non axisymétriques nécessiterait quant à elle l'utilisation d'un modèle direct à trois dimensions. A l'heure actuelle, cela ne constituerait pas en soi une difficulté

majeure, mais aurait pour conséquence immédiate de rendre le logiciel particulièrement gourmand en ressources informatiques.

Des premiers développements, réalisés en ce sens, semblent très prometteurs.

Bibliographie du chapitre 6

- [1] **M. BONNET**, « *Un aperçu des approches existantes pour la description mathématique et la résolution des problèmes inverses* », Note interne **14**, Laboratoire de Mécanique des Solides, 1989 (réactualisation 1992)
- [2] **A. GAVRUS**, « Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse », Ecole des Mines de Paris, CEMEF, Thèse, (1996)
- [3] **S. BADRINARAYANAN, N. ZABARAS**, « *Preform Design in Metal Forming* », in P.W. Dawson and S.-F. Shen (Eds), Proceedings of the Numiform '95 Conference, A.A. Balkema, Rotterdam, pp. 533 – 588, (1995)
- [4] **J.-L. CHENOT, E. MASSONI and L. FOURMENT**, « *Inverse Problems in Finite Element Simulation of Metal Forming Processes* », Engineering Computations, **13**, N° 2/3/4, pp. 190 – 225, (1996)
- [5] **M.-L. BISILLIAT**, « *Comportement mécanique d'un polycarbonate à grande vitesse de sollicitation – Etude expérimentale et simulation* », Thèse Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, (1997)
- [6] **M. L. BISILLIAT, G. GARY, KLEPASCKO, N. BILLON**, Yield and Fracture Conf, (1997)
- [7] **J.-M. HAUDIN, B. MONASSE, T. VALLA, S. GLOMMEAU**, « *Numerical Simulation of Polymer Forging* », Intern. Polym. Proc. X, **2**, pp. 179 – 185, (1995)

Conclusion générale

Les objectifs de ce travail étaient multiples : en effet, la réflexion sur la prédiction du comportement à l'impact des polymères solides doit être menée sur plusieurs fronts : *théorique* pour **identifier une loi de comportement**, *expérimental* pour **identifier les paramètres** de cette loi et *numérique* pour prendre correctement en compte l'un et l'autre dans les simulations.

Une recherche bibliographique a permis de faire un bilan des lois les plus aptes à reproduire le comportement global des polymères solides. On peut les classer en deux catégories : les lois « physiques » et les lois « phénoménologiques ». Les premières s'appuient sur un cadre théorique strict, c'est-à-dire sur une description physique du matériau et des processus de base de sa déformation. Ces lois ne permettent généralement de décrire qu'une fenêtre réduite du comportement des matériaux (comportement viscoélastique, à la limite élastique ou pendant l'écrasement) et font souvent intervenir un grand nombre de paramètres, pas toujours accessibles expérimentalement. Les lois phénoménologiques, qui découlent directement d'une observation expérimentale du comportement, semblent sur ce point davantage répondre aux besoins actuels d'une méthode d'identification : elles sont pour la plupart plus simples à implémenter dans un code de calcul et permettent de reproduire le comportement global sur la gamme de déformation balayée à l'aide d'un nombre restreint de paramètres. Parmi elles, la loi de « G'Sell » proposée par G'Sell et Jonas [1979, 1988] a retenu notre attention.

Le suivi d'essais de traction « moyennes vitesses » à l'aide d'un dispositif infrarouge nous a permis d'établir que, pour des éprouvettes classiques, la dissipation thermique provoque un échauffement dans le matériau dès 10^{-2} s^{-1} . L'« autoéchauffement » se traduit par des gradients thermiques significatifs entre le cœur et la peau des éprouvettes. Cela sous-entend que les méthodes classiques de dépouillement ne sont plus justifiées au delà si le comportement est thermodépendant.

Parmi les essais classiques *a priori* « simples » que nous avons testés, l'essai de torsion apparaît finalement impropre aux dépouillements classiques, la déformation n'étant ni simple ni homogène. Nous nous sommes donc concentrés sur l'essai de traction.

Trois polymères différents (un polycarbonate amorphe, un polyéthylène de haut poids moléculaire semi-cristallin et un polypropylène copolymère « industriel » souvent utilisé dans des applications techniques) ont été étudiés en traction uniaxiale, en deçà de la limite de 10^{-2} s^{-1} (limite isotherme). Les paramètres d'une loi de comportement identifiés classiquement sur la base de ces essais « basses vitesses » ne peuvent être extrapolés à des vitesses supérieures, de même qu'à des sollicitations plus

complexes (poinçonnement, Poids Tombant Instrumenté). Pour ces derniers, il n'existe aucune méthode de dépouillement analytique. Nous avons donc clairement montré les limites des techniques de laboratoire actuelles : quand elles sont exploitables, elles ne sont pas représentatives de sollicitations complexes et lorsqu'elles en sont représentatives, elles sont inexploitable.

Nous avons donc développé une approche d'identification de paramètres par analyse inverse (Rhéologie Assistée par Ordinateur). L'objectif est de lever les contraintes ou hypothèses nécessaires à l'exploitation « manuelle » des essais mécaniques. Ce travail a nécessité la compréhension et l'utilisation d'un code de simulation complet (thermomécanique) mettant en œuvre la méthode des éléments finis. Nous lui avons adjoint un module d'optimisation visant à minimiser l'écart entre les grandeurs observables (force, déplacement) calculées et mesurées. Cette optimisation fait appel à une méthode de type gradient (algorithme de Gauss-Newton). Des tests numériques ont souligné la stabilité et la fiabilité du code développé.

La méthode décrite a été appliquée avec succès à l'identification des paramètres rhéologiques du polypropylène en impact multiaxial. Elle a aussi permis de mettre en évidence les limites de la loi de comportement de G'Sell pour des sollicitations multiaxiales. La flexibilité du module d'optimisation que nous avons couplé au modèle direct nous a alors permis de tester facilement une autre formulation de loi de comportement. Le logiciel de Rhéologie Assistée par Ordinateur s'avère dès lors être d'une aide précieuse dans la recherche de nouvelles lois de comportement phénoménologiques par sa capacité à les tester dans des conditions complexes.

Cependant, ces résultats encourageants ne doivent pas faire oublier le fait que la précision de l'identification est directement liée à la précision de la connaissance que nous avons du matériau et de l'essai rhéologique lui-même. Ainsi, si les méthodes inverses sont des outils de dépouillement performants, elles nécessitent absolument une analyse physique propre, une caractérisation soignée du matériau, ainsi qu'une expérimentation contrôlée. Ainsi, nous avons montré qu'il est nécessaire :

- de posséder un espace expérimental adapté aux paramètres que l'on souhaite identifier (choix de l'observable, nombre de courbes expérimentales, nombre de points par courbe ...).
- d'effectuer au préalable une analyse de sensibilité de l'observable vis-à-vis des paramètres à identifier. Cette précaution permet de discerner d'éventuelles corrélations entre paramètres.

L'outil est en place. Il faut désormais l'enrichir par des lois pertinentes, des conditions aux limites contrôlées et des caractéristiques thermiques et physiques pertinentes. Les progrès futurs sont là.

Nous avons seulement la prétention de dire que l'outil « analyse inverse » permettra d'étendre la gamme accessible à l'expérimentateur. Aujourd'hui, moyennant un certain nombre de précautions, cet outil répond au besoin immédiat du dimensionnement des pièces polymères en situation complexe, ce qui représente en soi une grande amélioration.

DETERMINATION DU COEFFICIENT DE TRANSFERT THERMIQUE GLOBAL ENTRE UN MATERIAU ET SON MILIEU ENVIRONNANT

$$h = h_c + h_r$$

1 Introduction

La détermination du coefficient de transfert thermique global entre le milieu ambiant et le matériau est un point très important. En effet, une mauvaise estimation de ce paramètre peut avoir d'énormes conséquences sur celle des profils de températures que nous recherchons.

2 Calcul du coefficient de transfert thermique global

Sachant que les échanges de chaleur entre un polymère et le milieu environnant se font par convection et par rayonnement, et que ces deux mécanismes sont totalement indépendants l'un de l'autre, le coefficient que nous recherchons est en fait la somme des coefficients de transfert thermique par convection (h_c) et par rayonnement (h_r).

$$h = h_c + h_r \quad (A2 - 1)$$

Calculons ces différents termes.

2.1 Calcul du coefficient de transfert thermique par convection (h_c) [1]

Considérons que notre éprouvette est immergée dans un fluide en mouvement : l'air. Les particules du fluide restent au contact du solide pendant un laps de temps très court mais suffisant pour qu'ils échangent une certaine quantité de chaleur par conduction. Le mouvement du fluide entraîne par la suite ces particules loin du solide et d'autres particules de fluide sont à nouveau en contact avec le solide. On appelle alors **convection**, ce mode de transport qui associe la **conduction** et les **mouvements du fluide**. On peut dès lors définir un nombre sans dimension Nu , appelé **nombre de Nusselt**. Il est égal au rapport du flux total au flux de conduction. Ce rapport s'écrit :

$$Nu = \frac{h_c L}{k} \quad (A2 - 2)$$

L correspond à une longueur caractéristique de l'éprouvette, k à la conductivité thermique de l'air et h_c au coefficient de transfert thermique par convection que nous cherchons à déterminer.

D'autre part, la convection est dite *forcée* lorsque le mouvement du fluide est imposé (c'est le cas par exemple du refroidissement d'un objet par un jet d'air) ; dans ce qui suit, nous supposerons que les mouvements de l'air ne sont imposés par aucune contrainte mécanique autre que la pesanteur. La convection est alors dite **libre**. Nous supposerons également que l'autoéchauffement du polymère au cours de l'essai de traction amènera ce dernier à une température globale proche de 50 °C. Ceci entraînera également un échauffement de l'air en contact. Si sa température initiale est de 23 °C, on peut estimer sa nouvelle température aux environs de 35 °C. Les données physiques de l'air évaluées à cette température sont réunies dans le Tableau A2 - 1. Comme l'a montré **Rayleigh**, la convection libre n'est que le reflet d'une instabilité du système. Certains facteurs tendront à le stabiliser et d'autres, au contraire, à accentuer ses fluctuations. Ces facteurs sont rassemblés dans un nombre sans dimension **Ra**, appelé **nombre de Rayleigh** et défini comme suit :

$$Ra = \frac{g\alpha\Delta TL^3}{\nu a} = \frac{g\alpha\Delta TL^3}{\nu^2} \times Pr \text{ avec } Pr = \frac{\nu}{a} \text{ et } \nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (A2 - 3)$$

g est l'accélération de la pesanteur, α le coefficient de dilatation de l'air, ΔT l'écart de température entre le polymère et l'air ambiant, L la longueur caractéristique de l'éprouvette en contact avec l'air, ν la viscosité cinématique de l'air et a sa diffusivité thermique. **Pr** est un nombre sans dimension, appelé **nombre de Prandtl**.

Coefficient de dilatation	$\alpha = 3,4.10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C.s}^{-1}$
Viscosité	$\eta = 18,6.10^{-6} \text{ Pl}$
Diffusivité thermique	$a = 2.10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$
Nombre de PRANDTL	$Pr = 0,76$
Conductivité thermique	$k = 31,2 \text{ W K}^{-1} \text{ mm}^{-1}$

Tableau A2 - 1 : Données physiques de l'air à 35 °C.

Rayleigh a constaté expérimentalement puis a montré que la convection libre apparaissait lorsque :

$$Ra > Ra_{\text{critique}} \text{ et } Ra_{\text{critique}} = 1700 \quad (A2 - 4)$$

Dans notre cas, nous avons :

$$Ra = 22854 \quad (A2 - 5)$$

Nous nous trouvons donc bien dans un cas de convection libre.

Si l'on considère que dans notre expérience de traction, l'éprouvette « sablier » de longueur utile égale à 20 mm peut être grossièrement représentée par un cylindre vertical de même hauteur L , alors si :

$$10^4 < Ra < 10^9 \quad (A2 - 6)$$

cela implique que :

$$Nu = 0,59 \times Ra^{1/4} \quad (A2 - 7)$$

d'où

$$Nu = 7,25 \quad (A2 - 8)$$

L'équation (A2 - 2) entraîne alors que :

$$h_c = 11,32 \text{ W K}^{-1} \text{ mm}^{-2} \quad (A2 - 9)$$

2.2 Calcul du coefficient de transfert thermique par rayonnement (h_r)

Considérons le cas de nos éprouvettes. Leur émissivité ε est égale à 0,9. L'échange de chaleur par rayonnement se fait uniquement entre l'objet (1) à la température T_1 égale à 50 °C et les murs de la salle (2) très éloignés de l'objet. La température de ces murs est supposée égale à 23 °C. La quantité de chaleur échangée entre le cylindre et le mur peut alors s'écrire de deux façons :

$$q_{12} = \sigma \varepsilon (T_1^4 - T_2^4) \quad (A2 - 10)$$

où σ est la constante de **Stefan-Boltzmann** ($\sigma = 5,66 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^2 \text{ K}^{-4}$)

$$q_{12} = h_r (T_1 - T_2) \quad (A2 - 11)$$

où h_r est un coefficient de transfert thermique équivalent par rayonnement. On en déduit que :

$$h_r = \sigma \varepsilon \frac{T_1^4 - T_2^4}{T_1 - T_2} \quad (A2 - 12)$$

Soit ici :

$$h_r = 5,97 \text{ W K}^{-1} \text{ mm}^{-2} \quad (\text{A2 - 13})$$

L'équation (A2 – 1) entraîne finalement :

$$h = h_c + h_r = 17,3 \text{ W K}^{-1} \text{ mm}^{-2} \quad (\text{A2 - 14})$$

-
- [1] **J. F. AGASSANT, T. AVENAS, J. Ph. SERGENT**, « *La mise en forme des matières plastiques par Techniques et documentations* », LAVOISIER (1989)

COMPARAISON DE DEUX MAILLAGES SUR L'EVOLUTION THERMIQUE D'UNE EPROUVETTE DE POLYCARBONATE

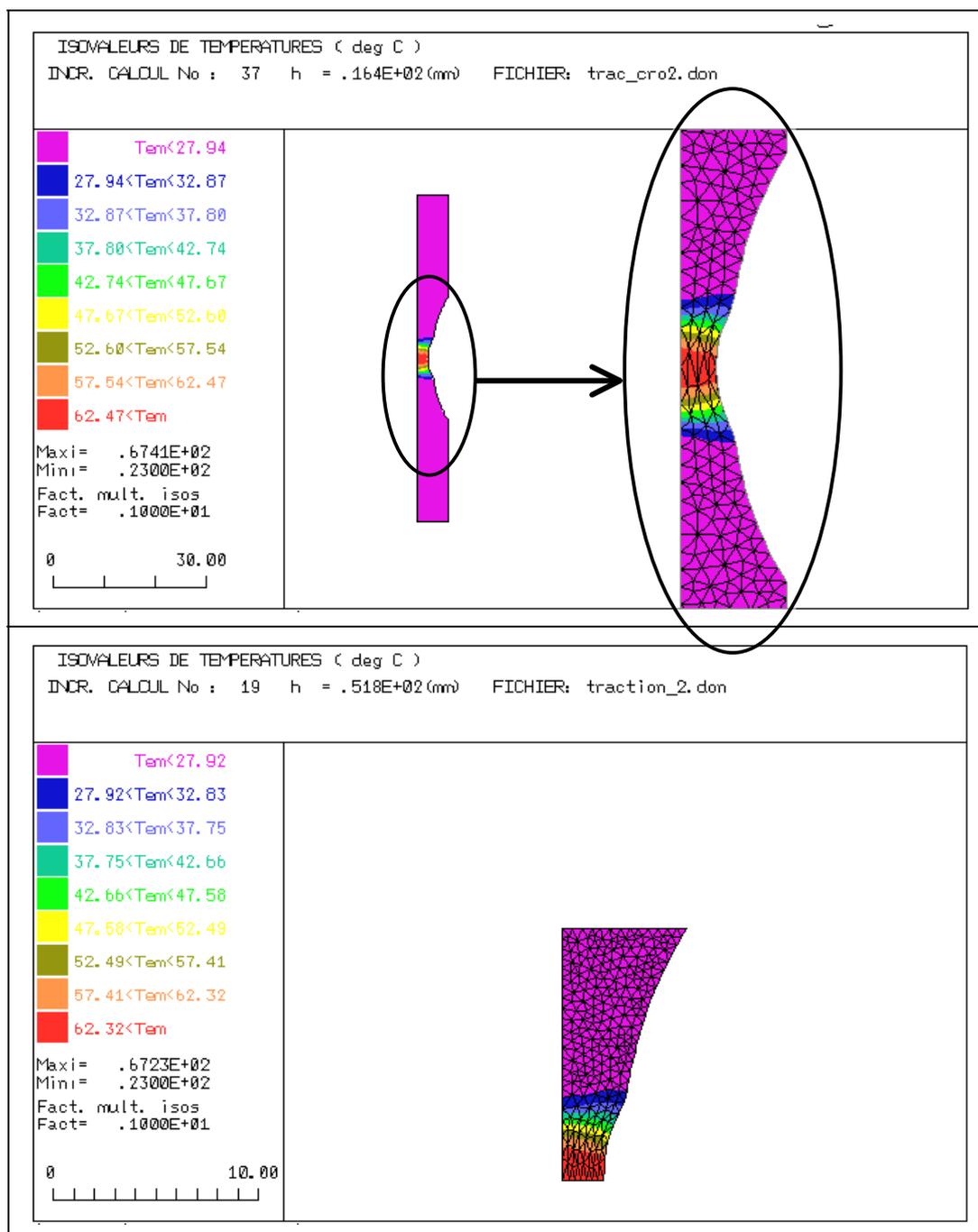
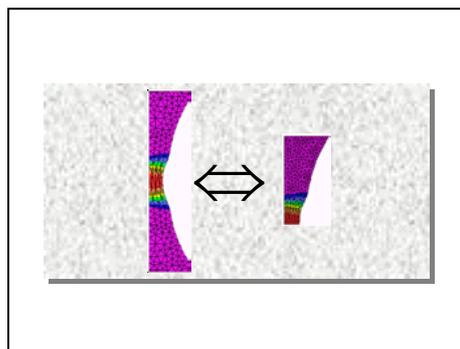


Figure A3 - 1 : Comparaison des profils de température obtenus à un instant t_1 de 3,6 s à partir de deux maillages différents pour un essai de traction à 1 mm/s d'une éprouvette en polycarbonate.

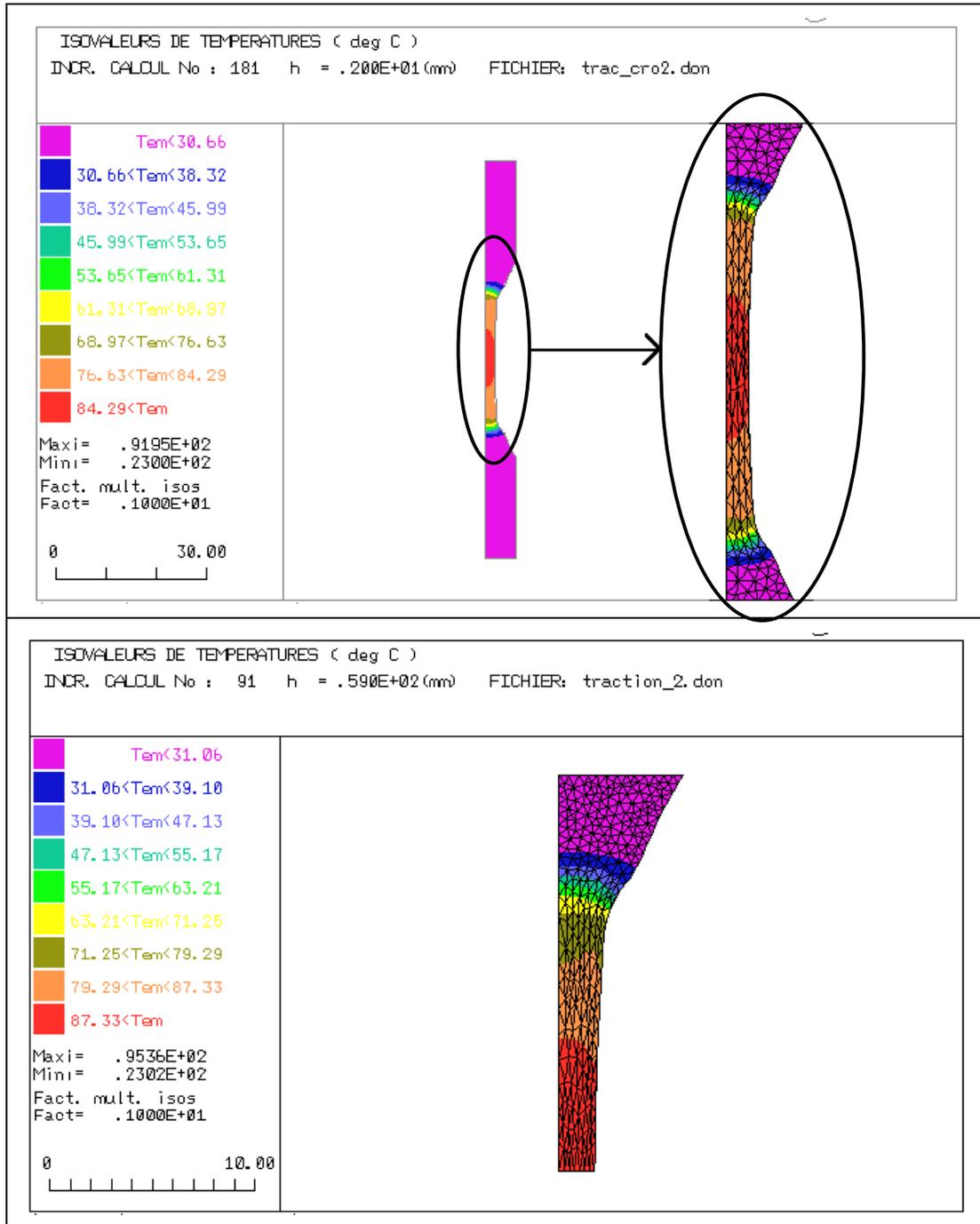
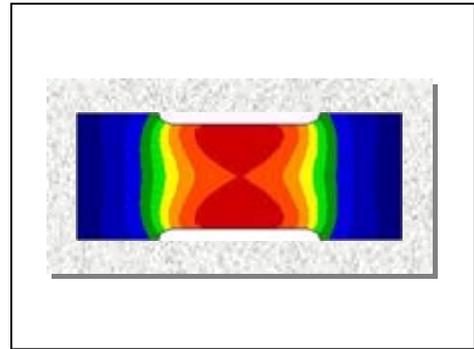


Figure A3 - 2 : Comparaison des profils de température obtenus à un instant t_2 de 18 s à partir de deux maillages différents pour un essai de traction à 1 mm/s d'une éprouvette en polycarbonate.



1 Spécificités de TORRAO

Nous ne présentons pas le logiciel TORRAO dans le détail, son principe étant voisin de celui développé dans le cas de FORGE2[®]. Son principe [1, 2] repose sur l'utilisation d'un logiciel de simulation numérique par éléments finis de l'essai de torsion couplé à un module d'optimisation. Ce modèle numérique permet à l'inverse des modèles analytiques, de déterminer l'évolution des grandeurs internes mécaniques et thermiques au cours de la déformation viscoplastique. L'identification est automatisée *via* la résolution d'un problème inverse, dont le but est de trouver un système de paramètres rhéologiques qui rende optimale la comparaison entre les observations expérimentales et la résolution numérique. Le logiciel de simulation numérique autour duquel est bâti TORRAO présente toutefois quelques spécificités qu'il est bon de souligner.

TORRAO prend en effet en compte le fait que pour un matériau thermoviscoplastique, il existe un couplage entre le champ de vitesse et le champ de température, non seulement par le fait que la consistance (et éventuellement la sensibilité à la vitesse de déformation) est thermodépendante, mais aussi à travers la dilatation thermique du matériau.

Ainsi, le tenseur des vitesses de déformation d'un matériau thermoviscoplastique se décompose en une partie viscoplastique et une partie thermoélastique :

$$\underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}} = \underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}}_{vp} + \underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}}_{th} \quad (A4 - 1)$$

La partie du tenseur des vitesses de déformation qui est due à la dilatation thermique est exprimée par :

$$\underline{\dot{\underline{\underline{\epsilon}}}} = \alpha \dot{T} \underline{\underline{\underline{I}}} \quad (A4 - 2)$$

Pour un matériau thermoviscoplastique, la contrainte d'incompressibilité devient donc :

$$\operatorname{div} \underline{\underline{v}} - 3\alpha \dot{T} = 0 \quad (\text{A4 - 3})$$

et la puissance dissipée :

$$\dot{q}_v = f(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}) = f(\underline{\underline{s}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}_{vp} - 3\alpha p \dot{T}) \quad (\text{A4 - 4})$$

Cette « subtilité » existe également dans la version V2.6 de FORGE2[®] viscoplastique sur laquelle nous avons basée nos développements mais n'a pas été utilisée. Nous l'introduisons ici afin de tenter une identification du comportement complexe mis en évidence expérimentalement dans le cas des polymères sollicités en torsion.

2 Dépouillement de l'essai de torsion à l'aide de TORRAO

Dans un premier temps, nous avons réalisé une identification en travaillant sur les couples expérimentaux bruts et en simulant l'essai de torsion en ne considérant que la partie utile de l'éprouvette (Figure II - 13) et en négligeant les échanges thermiques entre l'éprouvette et son milieu environnant (calcul adiabatique), comme c'est le cas pour un dépouillement classique.

Il était alors intéressant de faire une comparaison entre les résultats de TORRAO et ceux du logiciel PARAMOPT appliqué à un dépouillement de Fields & Backofen, PARAMOPT étant également construit autour d'un algorithme de type gradient pour minimiser l'écart au sens des moindres carrés entre les couples calculés et les couples expérimentaux.

La base expérimentale qui nous a servi à identifier les paramètres de la loi polymère solide de G'Sell comprenait trois séries d'éprouvettes. Les conditions opératoires sont rappelées dans le Tableau A4 - 1.

	Série A	Série B	Série C
Vitesse de rotation (tr/min)	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-1}$
Vitesse de déformation généralisée (s^{-1})	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
Température initiale (°C)	23	23	23

Tableau A4 - 1 : Conditions opératoires des essais de torsion nécessaires à l'identification de la loi de comportement polymère solide du polycarbonate.

Les résultats obtenus sont synthétisés dans le Tableau A4 - 2.

	<i>Valeurs initiales</i>	<i>Valeurs identifiées</i>	
Méthode d'identification		PARAMOPT	TORRAO
Nombre d'itération d'identification		6	3
Ecart final atteint (fonction « coût »)		3,523	3,517
K_p (MPa.s^m) (β=774)	100	111,3	112,2
m	0,100	0,002	0,002
w	1,00	0,84	0,83
h	0,100	-0,075	-0,075
n	2	2	2
a	10,0	9,6	9,6
b	10,0	9,3	9,3

Tableau A4 - 2 : Comparaison des résultats obtenus à l'aide des logiciels PARAMOPT (Fields & Backofen) et TORRAO pour trois vitesses de rotation et une température (Prise en compte de la zone utile et comportement isotherme pour PARAMOPT et adiabatique pour TORRAO).

Grâce à ces paramètres, dont les valeurs sont très proches de celles fournies par la méthode de dépouillement classique, nous avons réalisé des simulations directes de l'essai de torsion à l'aide du logiciel TORRAO, en ne considérant encore une fois que la zone utile de l'éprouvette. Les isovaleurs de températures obtenues sont représentées sur la Figure A4 - 1a.

On constate que la température (élevée du fait des conditions aux limites imposées en température) est uniformément répartie le long de l'éprouvette et que le gradient thermique, faible, est visible uniquement suivant la direction radiale. La localisation de la déformation reste, malgré l'autoéchauffement, relativement faible. Les mêmes remarques sont valables en ce qui concerne la distribution de la vitesse de déformation, à savoir une variation avec le rayon. Ces hypothèses que l'on fait classiquement lors d'un dépouillement analytique sont donc justifiées, dans la mesure où l'on ne considère que la partie utile des éprouvettes et que l'on néglige les échanges de chaleur avec l'extérieur. Cela explique les similitudes entre les différents résultats obtenus à l'aide la méthode de Fields & Backofen et ceux obtenus par TORRAO.

Par contre, si on prend en compte, lors de la simulation de l'essai par TORRAO (avec les paramètres identifiés précédemment), les conditions thermiques réelles, comme les échanges de chaleur avec les mors (Figure A4 - 1b), des différences apparaissent entre les deux méthodes. Il en va de même si on prend en compte la géométrie réelle des éprouvettes (Figure A4 - 2), comme les épaulements situés aux extrémités de la partie utile de l'éprouvette (Figure A4 - 3a et Figure A4 - 3b).

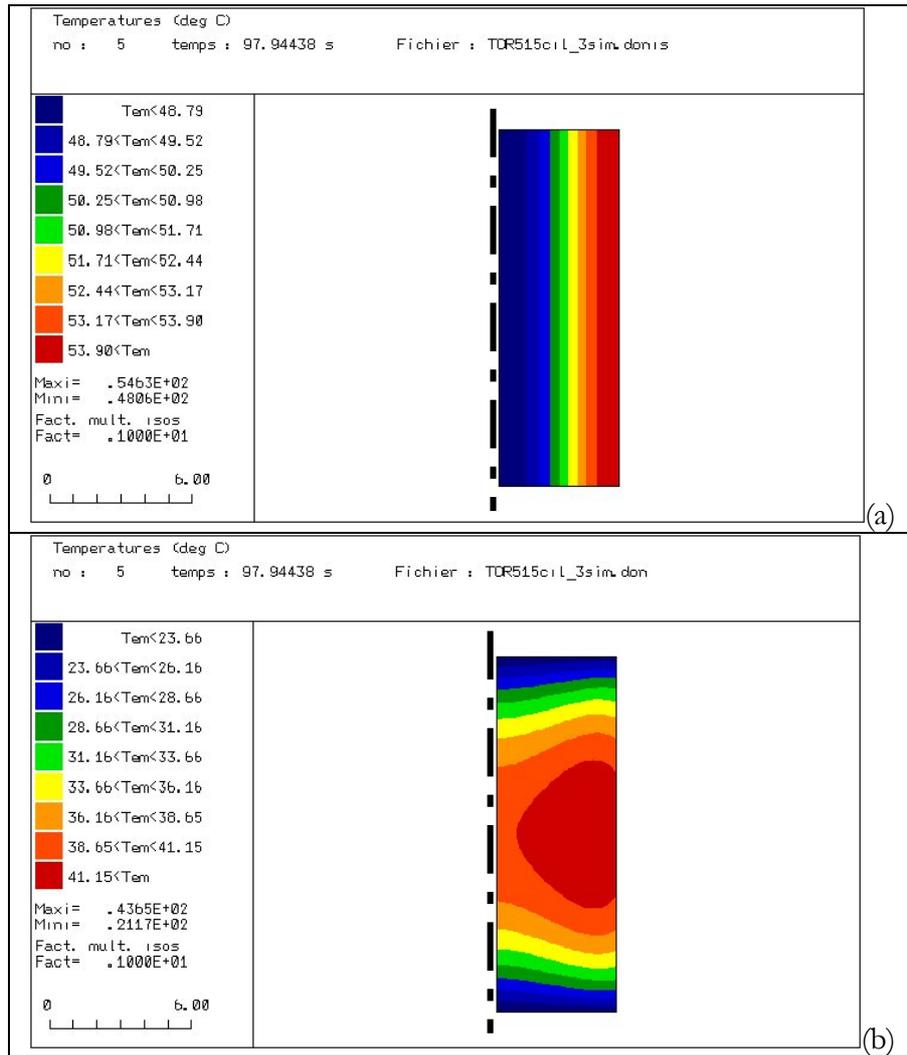


Figure A4 - 1 : Isovaleurs de la température à l'intérieur de la zone utile de l'éprouvette en polycarbonate (obtenue à l'aide du logiciel TORRAO) sans tenir compte du transfert thermique avec les mors (a) et dans les conditions thermiques réelles (b) – à 23°C et pour une vitesse de rotation de $5 \cdot 10^{-1}$ tr/min

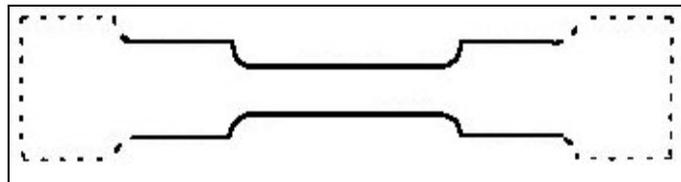


Figure A4 - 2 : Prise en compte des épaulements lors de l'identification par TORRAO.

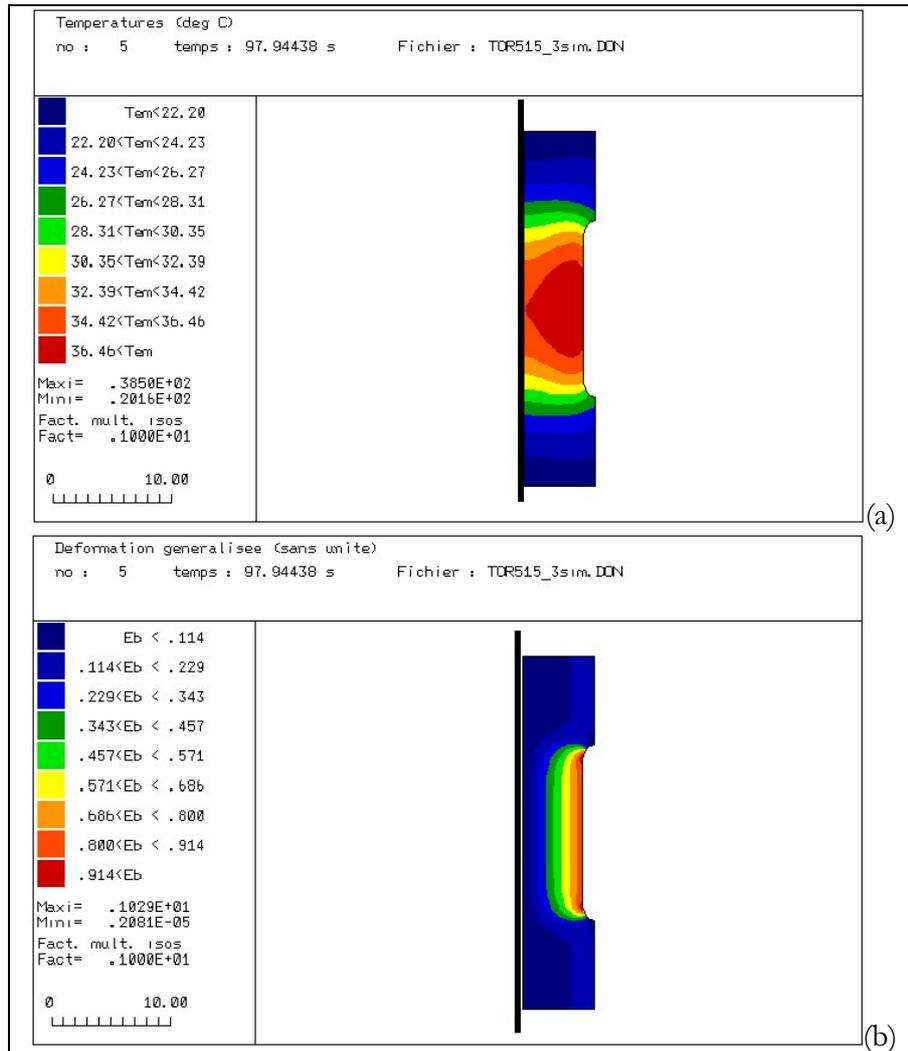


Figure A4 - 3 : Isovaleurs de température (a) et de déformation (b) dans le cas d'une éprouvette de polycarbonate complète (zone utile + épaulements) à 23°C et pour une vitesse de rotation de 5.10^{-1} tr/min.

D'une part, la température maximale (atteinte à la surface) tombe de 54,5°C (zone utile + adiabatique) à 43,5 °C (zone utile + échanges de chaleur), puis à 38,5 °C (zone utile + épaulements + échanges de chaleur). On constate en outre que, contrairement au cas précédent, la distribution de la température n'est plus uniforme le long de l'axe de l'éprouvette et qu'un gradient thermique longitudinal s'ajoute au gradient radial. Ce phénomène thermique se répercute sur les vitesses de déformations radiales et longitudinales, comme le montre la Figure A4 - 4.

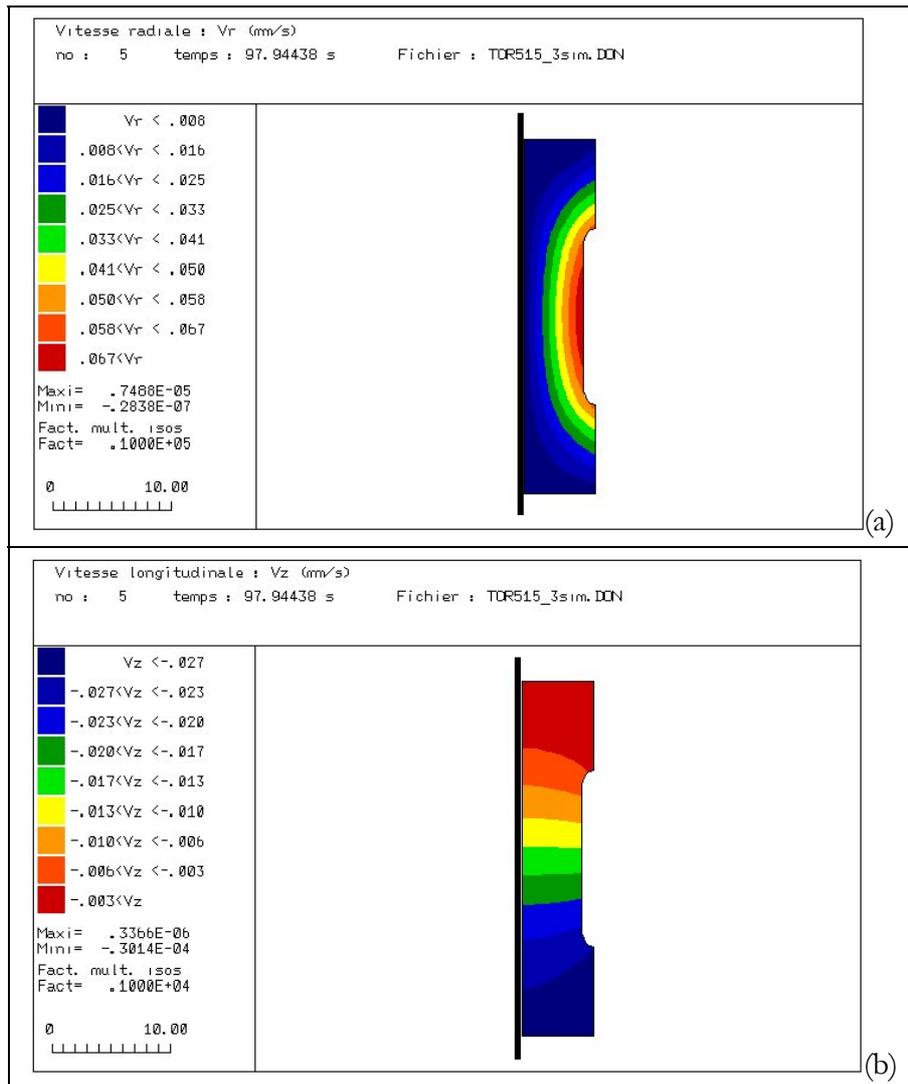


Figure A4 - 4 : Isovaleurs des vitesses radiales (a) et longitudinales (b) données par le logiciel TORRAO.

Ainsi, le logiciel TORRAO prévoit-il une légère augmentation du diamètre au centre de l'éprouvette (composante radiale de la vitesse v_r positive), qui s'accompagne logiquement d'une légère contraction de l'éprouvette dans sa direction longitudinale (composante longitudinale de la vitesse v_z positive). Cette dernière constatation va à l'encontre des observations expérimentales (la dilatation observée ayant vraisemblablement une origine microstructurale), le modèle numérique n'étant pas capable de prendre en compte l'évolution de la microstructure du matériau.

L'amélioration du dépouillement des essais de torsion à l'aide de cette méthode numérique devra donc passer par l'implémentation d'un module capable de simuler l'évolution de la géométrie de l'éprouvette en fonction des paramètres à identifier, ce qui implique le passage à un modèle tridimensionnel. Malgré tout, le logiciel TORRAO, qui prend en compte les phénomènes thermiques, demeure plus efficace que la méthode de Fields & Backofen, car il lève un certain nombre d'hypothèses simplificatrices et supprime la phase laborieuse de manipulation des données

expérimentales. Mais la torsion appliquée aux polymères fait intervenir des phénomènes trop complexes, que le modèle direct de TORRAO ne peut prendre en considération. Cela ne remet toutefois pas en cause le principe de la R.A.O. et, par contre, nous conforte dans le choix des essais rhéologiques que nous avons réalisés.

-
- [1] **A. GAVRUS, E. MASSONI, J.-L. CHENOT**, « Computer Aided Rheology for Non Linear Large Strain Thermo-viscoplastic behaviour Formulated as an Inverse Problem », ISIP-94, PARIS, pp. 123 – 130, BUI, TANAKA et al. (eds.), Balkema, (1994)
- [2] **A. MOAL, E. MASSONI, J.-L. CHENOT**, « A Finite Element Model for the Simulation of the Torsion and Torsion-Tension Tests », *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **103**, pp. 418 - 434, (1993)

Identification par analyse inverse du comportement mécanique des polymères solides ; applications aux sollicitations multiaxiales et rapides

Les constructeurs de structures polymères doivent leur assurer la tenue que leur utilisation impose (résistance au choc). De façon à remplacer les tests « vraie matière / vraie grandeur » coûteux et laborieux, il est courant d'utiliser des codes de simulation numériques, qui requièrent toutefois l'utilisation de lois de comportement fiables.

Le premier chapitre, consacré à l'établissement d'un bilan des lois de comportement les plus aptes à reproduire le comportement global des polymères solides, est suivi d'une étude des méthodes classiquement employées pour dépouiller les essais rhéologiques. Trois polymères différents (un polyéthylène semi-cristallin, un polycarbonate amorphe et un polypropylène copolymère) sont testés afin d'établir une certaine typologie de leurs réponses. Il en ressort que les hypothèses inhérentes aux méthodes de dépouillement analytiques ne sont valables que dans un domaine restreint de sollicitations (basses vitesses, sollicitations uniaxiales ...). La méthode d'identification par analyse inverse envisagée dans le chapitre III permet d'éviter la formulation d'hypothèses trop fortes. Elle repose sur l'utilisation d'un logiciel de simulation thermomécanique par éléments finis des essais rhéologiques, auquel est couplé un module d'optimisation (basé sur la méthode itérative de Gauss-Newton). Les paramètres sont obtenus en minimisant l'écart entre le calcul et l'expérience (fonction « coût »). Après une validation numérique (chapitre IV) de l'algorithme de minimisation utilisé (convergence et stabilité), la technique décrite est finalement appliquée avec succès à chacun des polymères étudiés (chapitre V), dans le cas d'essais de traction « moyennes vitesses ». L'écart entre les observables expérimentales et simulées diminue sensiblement par rapport aux méthodes de dépouillement classiques. L'emploi d'une fonction coût mixte (force + diamètre) permet en outre d'identifier simultanément la rhéologie en traction d'un polypropylène et le coefficient tribologique caractérisant le glissement des éprouvettes dans les mors. Le logiciel met également en évidence les limites de la loi de comportement utilisée en traction, dans le cas d'essais multiaxiaux. Moyennant une modification de la loi, l'analyse inverse rend possible l'identification du comportement au choc du polymère à partir d'essais de poids tombant instrumenté. La possibilité d'extrapoler le comportement à d'autres conditions opératoires fait de ce logiciel un outil prédictif.

Mechanical characterization of solid polymers using inverse analysis : application to high velocity and multiaxial tests

Due to the cost and the complexity of real mechanical tests, simulation softwares are often used by manufacturers of polymer products. The quality of the predictions depends on the use of accurate constitutive equation and parameters.

An experimental study using three different polymers (a semicrystallin polyethylene, an amorphous polycarbonate and a toughened polypropylene) shows that the hypotheses usually made when analytical methods are used, are only fulfilled under simple loading conditions and at low strain rates, far from real actual loading. For this reason, an inverse numerical model coupling a finite element simulation software (able to simulate rheological tests accounting complex loading conditions and temperature increase during high velocity tests) and a parameter identification module (based on an iterative Gauss-Newton method) was developed. The constitutive parameters are found minimising the discrepancy (the « cost function ») between calculated and experimental forces, and optionally diameter in the case of the existence of a relative movement between the sample and the clamping device.

This approach was validated by convergence and stability tests, and successfully applied to « average speed » tension tests. However the difficulty to extrapolate these results to very different loading conditions leads us to revisit the chosen constitutive equation when multiaxial loads are considered.

DISCIPLINE

SCIENCES ET GENIE DES MATERIAUX

MOTS-CLEFS

Polymère, méthodes d'optimisation, analyse inverse, rhéologie solide, impact

INTITULE ET ADRESSE DU LABORATOIRE

CEMEF / Ecole des Mines de Paris - Unité associée au CNRS - UMR 7635
Rue Claude DAUNESSE - B.P. 207 06904 Sophia Antipolis Cedex