

# Mô phỏng quá trình thổi chai PET bằng phương pháp phần tử tự nhiên

•Cao Hồng Phong

•Trần Văn Xuân

Electricité de France (EDF R&D)

•Lý Hùng Anh

Viện John von Neumann, ĐHQG-HCM

Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 23 tháng 07 năm 2014, nhận đăng ngày 16 tháng 01 năm 2015)

## TÓM TẮT

Vấn đề mô phỏng quá trình thổi chai PET từ phôi là một công việc rất phức tạp. Những khó khăn lớn thường gặp phải như: giải quyết bài toán về biến dạng lớn hai chiều, lựa chọn ứng xử cơ học vật liệu và xác định các thông số điều khiển. Để giải quyết các vấn đề này, báo cáo này sẽ tập trung vào việc phát triển một mô hình tính toán mô phỏng quá trình thổi chai từ phôi sử dụng phương pháp phần tử tự nhiên (NEM). Bên cạnh đó, mô hình ứng xử cơ học vật liệu đàn hồi nhớt phi tuyến (non-linear and visco-elastic) cũng được sử dụng để tiếp cận gần.

**Từ khóa:** Phương pháp phần tử tự nhiên, PET, quá trình thổi chai, trường nhiệt độ, vật liệu đàn hồi nhớt.

hơn với thuộc tính vật liệu thực tế. Những kết quả tính toán ban đầu dựa trên mô hình đối xứng trục cho thấy quá trình mô phỏng này giúp định hướng được quá trình thổi chai bằng việc thay đổi các thông số điều khiển, và xem xét trực tiếp chất lượng chai thành phẩm thông qua việc kiểm tra các trường ứng suất, nhiệt độ và độ dày vỏ chai. Việc mở rộng mô hình này sang bài toán 3D cũng như sử dụng nó để xác định các thông số tối ưu của quá trình thổi chai sẽ là những hướng nghiên cứu tiếp theo của đề tài này.

## GIỚI THIỆU

Những năm trở lại đây vấn đề tài chính, môi trường và nhiều yếu tố khác đã khiến các nhà nghiên cứu tìm nhiều cách để đưa ra thị trường sản phẩm chai có chất lượng và thẩm mỹ cao. Một trong những mục tiêu chính của ngành công nghiệp sản xuất chai nhựa là đảm bảo chất lượng của sản phẩm nhưng vẫn đạt được chỉ tiêu về kinh tế. Một thí dụ cụ thể cho thấy để sản xuất một chai *Cocacola* 1,5 lít hiện tại chúng ta phải sử dụng phôi 42g *Polyethylene Terephthalate* (PET), nếu chúng ta có một phương pháp thổi chai tối ưu, chúng ta có thể chỉ mất 40g PET hoặc ít hơn. Một phép tính đơn giản cho thấy trong

một triệu phôi, chúng ta sẽ tiết kiệm được 2 tấn PET.

Vì vậy, bài toán đặt ra cho ngành công nghiệp sản xuất chai hiện nay là làm thế nào để tiêu tốn ít nguyên vật liệu trong khi vẫn đảm bảo được chất lượng và các chỉ tiêu cần thiết của chai như:

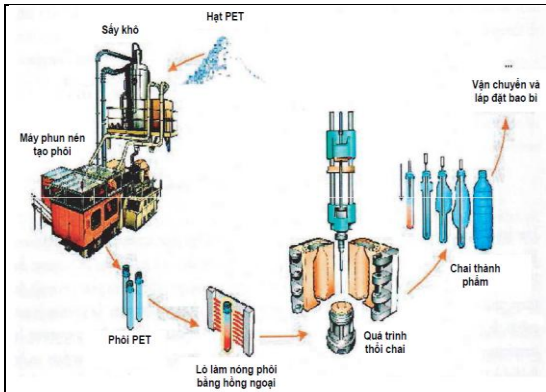
Kiểm soát được tính thẩm mỹ: độ dày vỏ chai đều đặn và độ cong trên bề mặt

Đảm bảo được thuộc tính cơ học của chai: độ cứng, độ bền và không bị rò rỉ...

Quá trình sản xuất chai từ phôi PET được trình bày như trong Hình 1. Nguyên liệu hạt thô

PET trước tiên được sấy khô và cho vào máy ép phun nén để tạo ra các phôi chai PET. Các phôi chai này sau đó được làm nóng trong lò hồng ngoại và được đưa vào bộ phận thổi chai ngay sau đó để thổi. Các chai thành phẩm được tạo thành sẽ qua công đoạn kiểm tra (nếu thấy cần thiết) trước khi vận chuyển đi tiêu thụ.

Quá trình « thổi-kéo » chai nhựa từ phôi PET bao gồm nhiều công đoạn chính. Đầu tiên, phôi chai được làm nóng và cho vào khuôn. Sau đó, một thiết bị được dùng để đẩy đáy phôi, song song đó là quá trình thổi áp lực vào trong phôi. Không khí dưới áp lực cao được thổi vào phôi chai thông qua các lỗ nhỏ trên thiết bị đẩy. Dưới tác dụng của áp suất không khí và sự kéo dài của thiết bị đẩy, phôi PET sẽ bị kéo mỏng và phình to. Hình dạng của chai thành phẩm được định dạng bởi khuôn chai.

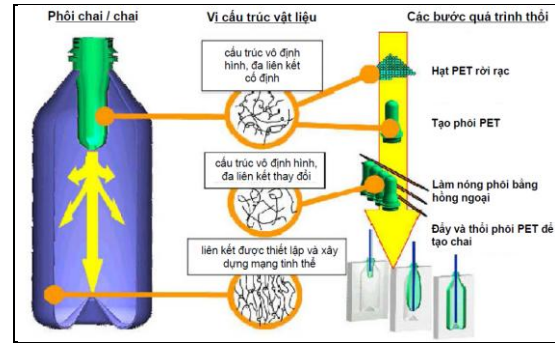


Hình 1. Tổng quan quá trình sản xuất chai nhựa PET [1]

Quá trình thổi chai từ phôi khá phức tạp do một số tính chất và cấu trúc của vật liệu bị thay đổi trong quá trình thổi. Hình 2 mô tả sơ lược các thông số kỹ thuật của quá trình thổi chai, quá trình thay đổi hình học và vi cấu trúc của vật liệu PET[2,3]

Về mặt điều khiển, có ba thông số chính liên quan đến chất lượng của chai thành phẩm là vận tốc (hoặc vị trí) của thiết bị đẩy ( $v$ ), nhiệt độ ( $T$ ) và áp suất của khí thổi ( $p$ ). Các thông số này phụ thuộc vào thời gian và có thể thay đổi theo các yêu cầu về hình dáng của chai thành phẩm. Dưới

tác dụng của ( $v, T, p$ ), phôi chai ban đầu chịu một sự biến dạng lớn cũng như va chạm giữa thành khuôn và phôi chai lúc giãn nở, hình dạng của phôi chai cuối cùng được định dạng theo hình dáng của khuôn chai. Dưới tác dụng của nhiệt độ và sự biến dạng của vật liệu, vi cấu trúc (*microstructure*) của vật liệu PET của phôi chai ban đầu là chất vô định hình đã tinh thể hóa trong chai thành phẩm (Hình 2).



Hình 2. Tổng quan quá trình sản xuất chai nhựa PET [2]

Để giải quyết vấn đề của công nghiệp sản xuất chai, trước mỗi một serie chai được sản xuất ra, nhà sản xuất thường xác định các thông số điều khiển bằng phương pháp « thử ». Đây là một quy trình tốn kém, mất thời gian và không hiệu quả do có quá nhiều thông số và yếu tố ảnh hưởng đến quá trình thổi chai ( $v, T, p, \dots$ ). Chính vì thế, khi có sự thay đổi về: vật liệu, thiết kế vô chai, ... các thí nghiệm bằng mô hình hóa trên máy tính cần được thiết lập trước, và mô hình thực nghiệm sẽ chỉ được thực hiện để xác nhận lại mô hình số nếu thấy cần thiết. Việc mô hình hóa trên máy tính sẽ giúp nhà sản xuất kiểm soát được sự thay đổi vật lý, hóa học của quá trình thổi chai cũng như tối ưu hóa các thông số điều khiển để tạo ra các sản phẩm đủ tiêu chuẩn và đáp ứng các yêu cầu đặt ra [4].

Dựa trên các kết quả thực nghiệm của Yanget al.[5] các tác giả cho rằng khả năng chịu lực của chai thành phẩm phụ thuộc chủ yếu vào hình dáng ban đầu (phân bố độ dày) của chai, nhiệt độ trong quá trình thổi chai, cũng như

tương quan giữa các tác động cơ học của việc «*thối-kéo*» chai. Cũng theo các tác giả, để phát triển một mô hình mô phỏng sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn (*Finit Element method, FEM*), hai vấn đề cực kỳ quan trọng là phải có một mô hình mô tả chính xác các ứng xử cơ học của vật liệu và quá trình truyền nhiệt. Theo Buckley et al [6], Schmidt et al. [7], và McEvoy et al. [8], các mô hình mô phỏng quá trình thối chai cần phải tính đến sự biến dạng 2 chiều lớn (*large biaxial deformations*) của các nút lưới trên phôi, sự tiếp xúc thay đổi theo thời gian giữa khuôn/vỏ chai và sự thay đổi nhiệt độ (*temperature gradients*) của quá trình thối.

Hơn nữa, sự phức tạp về mặt hình học của vỏ chai cũng gây ra khó khăn khi lựa chọn phương pháp và mô hình tính toán. Một số kết quả về sự biến dạng lớn của vật liệu *PET* được trình bày bởi Menary et al. [9,11], Pham et al. [10]... Các kết quả nghiên cứu này đã mô phỏng quá trình thối chai theo phương pháp *FEM* trên phần mềm *Abaqus* sử dụng mô hình ứng xử vật liệu khác nhau: mô hình từ biến (*creep*), siêu đàn hồi (*hyper-elastic*) và mô hình đàn hồi nhớt phi tuyến (*non-linear and visco-elastic*)... để mô phỏng sự thay đổi cơ nhiệt của vật liệu *PET*. Theo các tác giả, chỉ có mô hình đàn hồi-nhớt phi tuyến giúp mô phỏng tương đối chính xác sự phân bố chiều dày của chai thành phẩm. Những quan điểm này cũng được chia sẻ trong nghiên cứu của Zhang et al. [5,12].

Một số báo cáo quan trọng về việc mô phỏng quá trình thối chai có thể tìm thấy trong các tài liệu tham khảo Lin-Kun Chang et al. [13], Pham et al. [10]. Gần đây, một số báo cáo về các kết quả đo đạc các thông số kỹ thuật (lực kéo, phân bố ứng suất, các cảm biến tiếp xúc...) trong quá trình thối chai được tìm thấy trong nghiên cứu của Salomeia et al [4]. Việc nghiên cứu khả năng chịu lực của chai thành phẩm được trình bày trong các nghiên cứu của Dijk et al và GTS. Ngoài ra, một

số giải thuật để tối ưu hóa quá trình thối chai được trình bày bởi Bordival et al. và Chang et al.

## VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

### Tổng quan về phương pháp số

Liên quan đến phương pháp thối chai từ phôi *PET*, như đã trình bày ở trên, từ hơn 20 năm nay, nhiều nhà nghiên cứu đã sử dụng *FEM* để giải quyết bài toán mô hình hóa quá trình thối chai từ phôi *PET*. Phương pháp cổ điển này đã gặp phải vấn đề rất khó khăn khi giải quyết bài toán biến dạng lớn 2 chiều (*large biaxial deformations*) bởi vì đây là một vấn đề then chốt trong quá trình thối chai từ phôi. Một trong những hạn chế đặc trưng của *FEM* đó là cần phải liên tục xây dựng lại lưới và lưới phải luôn dày. Chính vì vậy, sinh ra việc mất mát các thông tin trên những phần tử mới khi chúng ta truyền thông tin từ lưới ban đầu. Hơn nữa, quá trình xây dựng lại lưới là rất phức tạp và mất nhiều thời gian.

Để giảm bớt những khó khăn này, một giải pháp mới được đưa ra đó là dùng giải pháp «*không lưới*» (*meshless*). Với giải pháp «*không lưới*», thì phương pháp phần tử tự nhiên (Natural Element Method, NEM) [18,19] được lựa chọn trong số những phương pháp tương tự như: Element Free Galerkin (EFG) [20], RKPM [21], SPH [22]... bởi vì phương pháp này giúp giảm bớt một số khó khăn của phương pháp «*meshless*» như [23]:

Hàm số hình dạng được xây dựng trên biểu đồ *Voronoi*, tất cả các nút sau đó sẽ thiết lập bằng phép nội suy.

Sự bền vững tuyến tính được đảm bảo trong quá trình tính toán

Mới đây, sự mở rộng của phương pháp *NEM* được phát triển bởi Yvonnet et al. [24,25]. Lợi thế của sự mở rộng này là mở rộng hàm số tuyến tính cho tất cả các miền và biên tính toán (bao gồm lồi hoặc không lồi). Hơn nữa, biểu đồ *Voronoi* cho phép chúng ta làm việc với bất kể

kiểu sơ đồ hình học nào và kiểu liên tục hay không liên tục của phần tử.

**Phương pháp phần tử tự nhiên (NEM)**

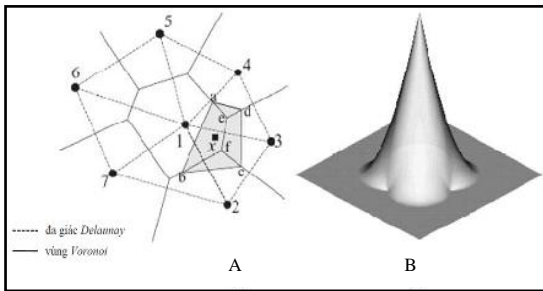
*Biểu đồ Voronoi:*

Khái niệm về phần tử nội suy thực được chỉ ra trong nghiên cứu của Sibson[23]. Phép nội suy trong nghiên cứu này nhằm xây dựng thuộc tính hình học đã biết gọi là vùng *Voronoi* và đa giác Delaunay[32,27]. Vùng *Voronoi* trong không gian hai chiều là một vùng mặt phẳng  $T_i$ , được tập hợp bởi các nút  $n_i$  (Hình 3A).

$$T_i = \{ \underline{x} \in R^m : d(\underline{x}, \underline{x}_i) < d(\underline{x}, \underline{x}_j), \forall j \neq i, \forall i \} \quad [\text{Eq.1}]$$

Trong đó :

- $T_i$  : vùng *Voronoi* (bậc nhất) tập hợp các nút  $n_i$ ,
- $\underline{x}$  : tọa độ của một điểm bất kỳ  $x$  nằm trong  $T_i$ ,
- $\underline{x}_i$  : tọa độ của nút  $n_i$  và  $d(\underline{x}, \underline{x}_i)$  là khoảng cách giữa nút  $n_i$  và điểm  $x$ .



**Hình 3:** Biểu đồ Voronoi, đa giác Delaunay và phần tử thực (A); hàm số định dạng của nút 1 (B)

Bằng việc liên kết tất cả các nút mà chúng sử dụng chung một cạnh của vùng *Voronoi* (xem Hình 3A), chúng ta sẽ có được đa giác *Delaunay*. [32, 27]. Với điều này, những « hàng xóm » của một nút chính là những nút mà nó liên hệ với nút trung tâm bởi 1 cạnh của một đa giác *Delaunay*. Chúng ta xác định vùng *Voronoi* (bậc hai)  $T_{ij}$  như sau:

$$T_{ij} = \{ \underline{x} \in R^m : d(\underline{x}, \underline{x}_i) < d(\underline{x}, \underline{x}_j) < d(\underline{x}, \underline{x}_k), \forall k \neq j, \forall k \neq i, \forall j \neq i \} \quad [\text{Eq.2}]$$

Một điểm bất kỳ nào đó nằm trong  $T_{ij}$  được xem như là « hàng xóm » gần của  $n_i$  và « hàng

xóm » thứ hai của  $n_j$ . Trong đó  $n$  là số lượng « hàng xóm » của điểm  $x$ .

*Hàm số định dạng của NEM*

Hàm số định dạng của *NEM* được xây dựng dựa trên vùng *Voronoi* của tất cả các nút và được nội suy hoàn toàn theo [23], điều này cho phép chúng ta có thể đưa vào điều kiện biên tương tự như trong phương pháp PTHH (*FEM*).

- Hàm số định dạng của bất kỳ điểm  $x$  và nút  $n_i$  được xác định bởi tỷ số diện tích của vùng bậc hai và vùng bậc nhất:

$$\Phi_i^{sib}(\underline{x}) = \frac{\sum S(T_{xi})}{\sum S(T_x)} = \frac{\sum S_{abfe}}{\sum S_{abcd}} = \frac{\kappa_{xi}}{\kappa_x} \quad [\text{Eq.3}]$$

$$\text{với: } \kappa_x = \sum_{i=1}^n \kappa_{xi}$$

với  $\kappa_x$  và  $\kappa_{xi}$  là đại lượng *Lebesgue* (là 1 đoạn: 1D, 1 mặt phẳng: 2D và 1 khối trong 3D) của vùng bậc nhất  $T_x$  và vùng bậc hai  $T_{xi}$  [27].

Các bước nội suy cho một trường  $u$  (đại lượng vô hướng hoặc có hướng) được biểu thị như sau: (Hình 3.B):

$$u^h(\underline{x}) = \sum_{i=1}^n \Phi_i(\underline{x}) u_i \quad [\text{Eq.4}]$$

Trong đó:  $u_i [i=1, \dots, n]$  được biểu diễn bởi  $u(\underline{x}_i)$ ,  $\underline{x}_i$  là tọa độ của nút  $n_i$ ,  $n$  là số lượng hàng xóm của điểm  $x$ , và  $\Phi_i(\underline{x})$  là hàm số định dạng của tập hợp nút  $n_i$  được xác định ở Eq.3.

Nếu có điểm một  $x$  trùng khớp với một nút  $n_j$  nào đó, có nghĩa ( $\underline{x} = \underline{x}_j$ ), do đó  $\Phi_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij}$ , với  $\delta_{ij}$  là hàm số *delta Kronecker*. Thuộc tính và điều kiện của phép nội suy đơn vị được hiển thị theo hàm số *delta Kronecker* như sau [19]:

$$\begin{cases} 0 \leq \Phi_i(\underline{x}) \leq 1 \\ \Phi_i(\underline{x}_j) = \delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^n \Phi_i(\underline{x}) = 1 \end{cases}$$

Hàm số định dạng của những phần tử thực (*Naturel Element*) mà chúng ta cần phải tính thông qua vùng *Voronoi* được xác định theo

nghiên cứu của Sukumar et al. [19] và Yvonnet et al. [14]:

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^n \Phi_i(\underline{x}) \underline{x}_i \quad [\text{Eq.5}]$$

Sau khi xác định được  $u^h(\underline{x})$ , việc tính toán các trường biến dạng, ứng suất... trong lưới được tiến hành tương tự như phương pháp phần tử hữu hạn FEM.

*Phương trình của cơ học chất lỏng nhớt*

Chúng ta xem xét vấn đề của cơ học chất lỏng có xét đến nhớt được viết trên một miền  $\Omega$  và biên  $\Gamma$ :

- Phương trình cân bằng cổ điển

$$\text{Div} \underline{\underline{\sigma}} + \underline{F} - \rho \underline{\underline{\gamma}} = 0 \text{ trong } \Omega \quad [\text{Eq.6}]$$

- Những dữ liệu công nghiệp cho phép giả thiết rằng sự phụ thuộc của khối lượng lực và quán tính là không đáng [36], do đó chúng ta viết lại [Eq.6]:

$$\text{Div} \underline{\underline{\sigma}} = 0 \text{ trong } \Omega \quad [\text{Eq.7}]$$

- Phương trình ứng xử của vật liệu:

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{I} + 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad [\text{Eq.8}]$$

với  $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\text{grad} V}} + \underline{\underline{\text{grad}^T V}})$

$\underline{\underline{\sigma}}$  và  $\underline{\underline{\epsilon}}$  là tensor ứng suất Cauchy và trường biến dạng,  $\underline{V}$  và  $p$  là vận tốc và áp suất,  $\eta$  là thông số độ nhớt,  $\eta$  có thể là một hằng số theo Newton hoặc có thể biến đổi phụ thuộc vào vận tốc biến dạng và nhiệt độ.

- Phương trình của quá trình giãn nở:

$$\text{Div} \underline{V} = 0 \quad [\text{Eq.9}]$$

- Theo điều kiện biên chúng ta có:

$$\begin{cases} \underline{V} = \bar{V} \text{ trên } \Gamma_v \\ \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{n} = \bar{T} \text{ trên } \Gamma_T \end{cases} \quad [\text{Eq.10}]$$

$\Gamma_v \cup \Gamma_T = \Gamma$  là biên của miền  $\Omega$ ,  $n$  là pháp tuyến đơn vị của  $\Gamma$ ,  $\bar{V}$  và  $\bar{T}$  là vận tốc và lực đầu vào.

*Mô hình ứng xử của cơ học có xét đến nhớt*

Trong báo cáo này, để mô tả quá trình thổi chai từ PET, chúng ta sẽ sử dụng ứng xử vật liệu theo mô hình của Chevalier et al.[30]:

$$\eta = K \bar{\dot{\gamma}}^{m-1} \quad [\text{Eq.11}]$$

với  $\bar{\dot{\gamma}} = \sqrt{2 \text{trace}(\underline{\underline{D}}^2)}$

Trong đó :

- $\eta$  : độ nhớt trượt (shear viscosity),
- $K$  : thông số nhớt (viscosity parameter),
- $\bar{\dot{\gamma}}$  : tốc độ trượt (shear rate),
- $D$  : ma trận tốc độ biến dạng (strain rate tensor).

- Thông số độ nhớt theo độ biến dạng của vật liệu PET

$$K(\underline{\underline{\epsilon}}) = K_0 \exp(a \underline{\underline{\epsilon}}^3 + b \underline{\underline{\epsilon}}^2 + c \underline{\underline{\epsilon}}^1 + d) \quad [\text{Eq.12}]$$

với  $\underline{\underline{\epsilon}} = \text{Sup}_i \epsilon_i \quad i = 1, 2, 3$

Trong đó:  $K_0 = 0,33 \text{MPa}$

$$m = 0,4$$

$$a = 3,65$$

$$b = -7,6$$

$$c = 6,64$$

$$d = -0,099$$

**Phương pháp Penalisation**

Phương pháp NEM bị hạn chế do không thể thực hiện phép nội suy tuyến tính trực tiếp, điều này không cho phép chúng ta giải quyết vấn đề bằng một công thức hỗn hợp giữa vận tốc và áp suất [24]. Để giải quyết bài toán số, phương pháp penalisation [31] sẽ được sử dụng.

Phương trình liên hệ của sự giãn nở / nhớt:

Với  $\underline{v} \in H^1(\Omega)$  và  $(\underline{v} = \bar{v})$  trên  $\Gamma_v$ , chúng ta có:

$$\int_{\Omega} \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^* d\Omega = \int_{\Gamma} \underline{v} \cdot \underline{T} d\Gamma \quad \forall \underline{v}^* \in H_0^1(\Omega) \quad [\text{Eq.13}]$$

Trong đó:  $H^1(\Omega)$  và  $H_0^1(\Omega)$  là không gian Sobolev.

- Từ [Eq.8] và [Eq.13], chúng ta có:

$$\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^* d\Omega + \int_{\Omega} -p \underline{I} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^* d\Omega = \int_{\Gamma} \underline{v} \cdot \underline{T} d\Gamma \quad [\text{Eq.14}]$$

với  $\forall \underline{v}^* \in H_0^1(\Omega)$

$$\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^* d\Omega + \int_{\Omega} -p \text{div}(\underline{v}^*) d\Omega = \int_{\Gamma} \underline{v} \cdot \underline{T} d\Gamma \quad [\text{Eq.15}]$$

với  $\forall \underline{v}^* \in H_0^1(\Omega)$

Với mục đích đạt được những ẩn số của vận tốc để giảm bớt số lượng ẩn số trong phương trình, chúng ta sẽ xem xét công thức Penalisation[24]

$$P(x) = -\alpha \eta \operatorname{div}(v) \quad [\text{Eq.16}]$$

Trong đó,  $\alpha$  là hệ số không âm của Penalisation

- Thay thế phương trình [Eq.16] vào [Eq.15], chúng ta có:

$$\int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{\varepsilon}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^* d\Omega + \int_{\Omega} \alpha \eta \operatorname{div}(v) \operatorname{div}(v^*) d\Omega = \int_{\Omega} v^* \underline{\underline{T}} d\Gamma \quad [\text{Eq.17}]$$

$$\text{với } \forall v^* \in H_0^1(\Omega)$$

- Phương trình [Eq.17] viết theo ma trận độ cứng toàn cục  $\underline{\underline{K}}$ , vectơ vận tốc  $\underline{\underline{v}}$  và vectơ lực đầu vào trên biên  $\underline{\underline{F}}$ :

$$\underbrace{(\underline{\underline{K}} + \underline{\underline{K}})}_{\underline{\underline{K}}} \underline{\underline{v}}_i = \underline{\underline{F}} \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{K}} \underline{\underline{v}}_i = \underline{\underline{F}} \quad [\text{Eq.18}]$$

$$\underline{\underline{K}} = \left[ \int_{\Omega} 2\eta \underline{\underline{B}}^T \cdot \underline{\underline{B}} d\Omega \right] \quad \underline{\underline{K}} = \left[ \int_{\Omega} \alpha \eta \underline{\underline{B}}^T \cdot \underline{\underline{B}} d\Omega \right] \quad [\text{Eq.19}]$$

Từ [Eq.18] và [Eq.19], chúng ta đạt được:

$$\Rightarrow \underline{\underline{v}} = \underline{\underline{K}}^{-1} \underline{\underline{F}} \quad [\text{Eq.20}]$$

- Phương trình biến dạng lớn tính toán dựa trên vận tốc và theo thời gian:

$$\underline{\underline{U}}^1 = \underline{\underline{U}}^0 + \underline{\underline{V}}_1 \cdot dt \quad \underline{\underline{U}}^{i+1} = \underline{\underline{U}}^i + \underline{\underline{V}}_{i+1} \cdot dt \quad [\text{Eq.21}]$$

### Thông số đầu vào của quá trình thổi chai

Lựa chọn ứng xử cơ học vật liệu

Thuộc tính cơ học của vật liệu PET là một yếu tố rất quan trọng trong quá trình mô hình hóa thổi chai. Những nghiên cứu trước đây được thực hiện trên nhiều trên mô hình FEM [6-8,11,12,28,29]. Những nghiên cứu này có nhiều bước đột phá và đã đạt được nhiều thành tựu khi xem xét đến sự thay đổi của nhiệt độ, vận tốc của thiết bị đẩy và áp suất thổi trong quá trình thổi chai. Mặt hạn chế của những nghiên cứu này là sử dụng mô hình ứng xử vật liệu đồng chất và đẳng hướng (isotropy) mà không có xét đến tính bất đẳng hướng của vật liệu (anisotropy).

Những nghiên cứu mới đây của Chevalier et al. [30] đã đưa ra mô hình ứng xử vật liệu có xét đến tính nhớt (viscosity) và tính phi tuyến (non-linear) của vật liệu. Mô hình này cho phép xem xét đến khả năng biến dạng lớn hai chiều (large biaxial deformations) trong quá trình thổi chai và tối ưu hóa quá trình thổi chai. Những kết quả ứng dụng của mô hình ứng xử vật liệu này đã được công nhận qua việc thực hiện quá trình kéo và nén vật liệu PET bằng mô hình số hóa và mô hình thực nghiệm[30]. Hơn nữa, những nghiên cứu mới đây nhất của Cosson et al. cũng đã một lần nữa khẳng định độ tin cậy cao của mô hình ứng xử vật liệu này.

Trong báo cáo này, ứng xử vật liệu PET được sử dụng theo mô hình của Chevalier et al. [30] đã được nêu ở trên.

Kích thước củaphôi và chai thành phẩm

- Kích thước của phôi PET (xem Hình 4A)

Đường kính trong :  $d_1=14,0$  mm

Đường kính ngoài :  $d_2=22,0$  mm

Độ dày trung bình của phôi :  $d_3=4,00$  mm

Chiều cao của phôi :  $d_3=80$  mm

Số điểm cơ sở để tạo vùng Voronoi trên thành phôi: 100 điểm phân bố theo chiều cao ( $N_y$ ) và 10 điểm theo bề dày ( $N_x$ ) phôi (xem Hình 4A).

- Kích thước của chai thành phẩm (xem Hình 4B):

Kích thước chai thành phẩm:  $h_1 \times h_2 = 200 \times 50$  (mm).

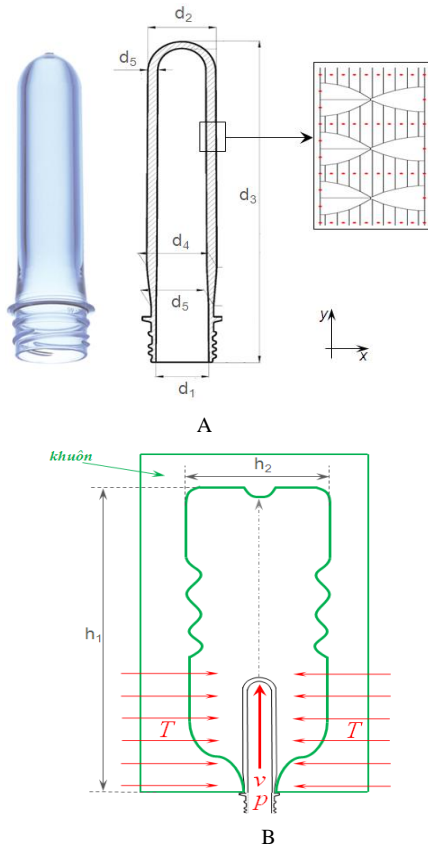
Độ lồi lõm của chai thành phẩm được tạo bởi từ các cung tròn nhỏ. Các cung tròn nhỏ này sẽ được tạo bởi từ tọa độ các điểm. Chúng ta dễ dàng có được các điểm này với sự trợ giúp của các phần mềm thông dụng hiện nay như Autocad, Catia...

Điều kiện biên của quá trình thổi chai

Cố định miệng của phôi PET

Áp suất thổi  $P = 0,7$  MPa

Vận tốc đẩy tại điểm đáy phôi (Hình 4B) theo phương thẳng đứng  $v = 100\text{mm.s}^{-1}$ . Nhiệt độ sử dụng trong quá trình thổi được phân bố theo chiều cao của phôi và dao động trong khoảng  $95 \div 115^\circ\text{C}$ .



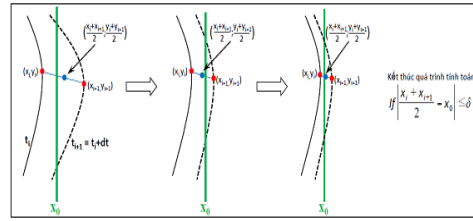
Hình 4. (A) Phôi PET và zoom phân vùng Voronoi trên phôi; (B) khuôn chai và điều kiện biên.

Thuật toán định vị nút trên khuôn

Chúng ta nhận thấy rằng tọa độ của một nút bất kỳ tại thời điểm  $t_{i+1}$

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + v_{x,i} dt \\ y_{i+1} = y_i + v_{y,i} dt \end{cases} \quad [\text{Eq.22}]$$

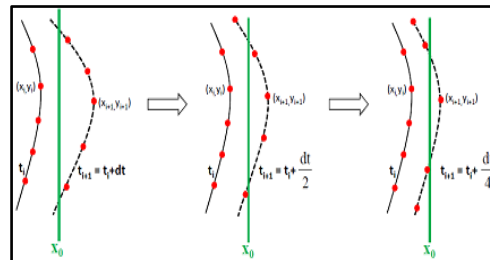
Nếu có một nút vượt ra ngoài khuôn tại thời điểm  $t_{i+1}$  ( $x_{i+1} > x_0$  hoặc  $y_{i+1} > y_0$ ), nút sẽ được đưa vào nằm trên khuôn ( $x_{i+1} = x_0$  hoặc  $y_{i+1} = y_0$ ) sau vài lần lặp với một sai số cho phép  $\delta$  ( $\delta = 1.E-04 \text{ mm}$ ) (Hình 5).



Hình 5. Thuật toán đưa một nút ở ngoài khuôn về trên khuôn

Nếu có nhiều hơn một nút vượt ra khỏi khuôn tại thời điểm  $t_{i+1}$ , chúng ta sẽ tính toán lại tọa độ của toàn bộ các nút tại thời điểm  $t_{i+1} = t_i + \frac{dt}{2}$  (Hình 6).

Quá trình này sẽ lặp đi lặp lại cho đến khi chỉ còn lại 1 điểm ở ngoài khuôn.



Hình 6. Thuật toán đưa nhiều nút ở ngoài khuôn về còn một nút ở ngoài khuôn

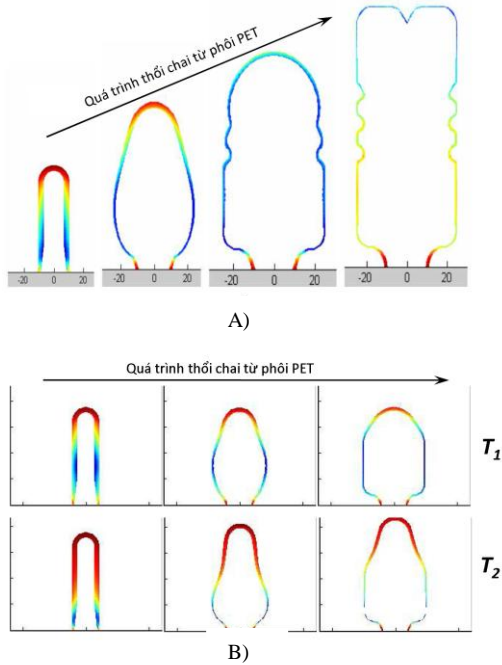
KẾT QUẢ

Trực quan quá trình thổi chai

Với một chương trình tính toán được viết trên Matlab và C++ với hơn 5000 dòng lệnh, nếu chạy trên máy tính laptop Dell core i7, 8GB RAM trong thời gian 5-10 tiếng tùy theo từng trường hợp. Hình biểu thị kết quả trực quan của quá trình thổi chai từ phôi. Chúng ta thấy rằng, dưới nhiệt độ nung nóng, áp suất thổi và vận tốc đẩy sẽ làm cho phôi nở ra cho đến khi gặp khuôn để tạo thành vỏ chai (Hình 7A). Chúng ta cũng có thể nhìn thấy độ dày của vỏ chai “chưa thực sự” đều đặn qua sự phân bố màu sắc trên vỏ chai.

Những nhiên cứu nêu trên đã chỉ ra rằng, một chai thành phẩm tốt (đạt được thuộc tính thẩm mỹ và cơ học) là chai có độ dày vỏ chai đều đặn [5]. Nếu một phần nào đó của chai có độ dày lớn thì những phần khác sẽ bị kéo giãn làm cho khả năng chịu lực ở những phần này giảm xuống. Trên Hình 7B hiển thị quá trình thổi với cách bố

trí khác nhau của nhiệt độ  $T_1$  và  $T_2$ . Từ cái nhìn trực quan chúng ta thấy rằng quá trình giãn nở và độ dày của phôi rất khác nhau, chúng phụ thuộc rất nhiều vào sự phân bố nhiệt độ trong quá trình thổi.



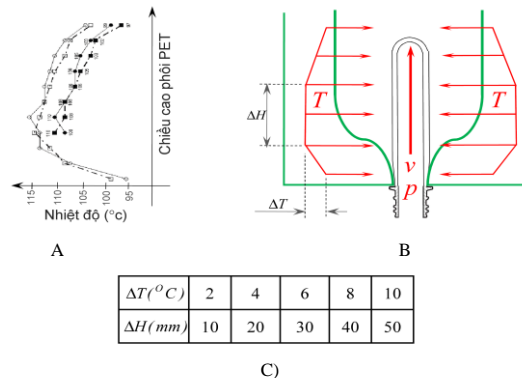
**Hình 7.** (A) Trực quan kết quả của quá trình thổi chai từ phôi PET đến lúc tạo thành chai thành phẩm, (B) Kết quả của quá trình thổi chai với sự phân phối nhiệt độ  $T_1$  và  $T_2$

**Ảnh hưởng của nhiệt độ vào quá trình thổi**

Một phương pháp khá phổ biến và đã được ứng dụng thành công trong ngành công nghiệp sản xuất chai đó là dùng trường nhiệt độ trong quá trình thổi để điều khiển độ dày của vỏ chai Menary et al [33]. Biểu đồ nhiệt độ biểu thị sự phân bố nhiệt độ theo chiều cao của phôi  $\Delta H$  và sự chênh lệch nhiệt độ  $\Delta T$  được miêu tả trong Hình 8 với điểm cơ sở ( $T_{max} = 115^\circ C$  và  $H_o = 10\text{ mm}$ ).

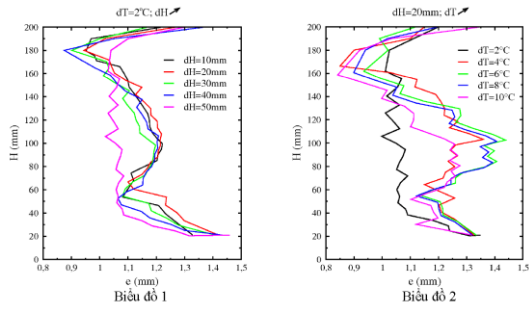
Trong nhiều cứu này, chúng ta sẽ dùng nhiều cặp ( $\Delta T, \Delta H$ ) khác nhau (Hình 8C) để biểu thị sự phụ thuộc của  $\Delta T$  và  $\Delta H$  vào quá trình thổi. Hình 9 biểu thị kết quả của độ dày vỏ chai theo chiều

cao của chai với từng cặp ( $\Delta T, \Delta H$ ). Chúng ta nhận thấy trên biểu đồ thứ nhất, khi nhiệt độ không đổi ( $\Delta T = 2^\circ C$ ) và  $\Delta H$  thay đổi tăng dần từ 10mm đến 50mm thì độ dày của vỏchai thay đổi rất nhiều theo chiều cao của chai và theo  $\Delta H$ . Bằng trực quan, chúng ta có thể thấy rằng, với  $\Delta H = 50\text{ mm}$  thì độ dày của vỏ chai theo chiều cao chai đều đặn nhất so với các giá trị  $\Delta H$  còn lại. Chúng ta nhận thấy trên biểu đồ thứ hai, khi chiều cao của trường nhiệt độ không đổi ( $\Delta H = 20\text{ mm}$ ) và  $\Delta T$  thay đổi tăng dần từ  $2^\circ C$  đến  $10^\circ C$  thì độ dày của vỏ chai cũng thay đổi rất nhiều theo chiều cao của chai và theo  $\Delta T$ . Với  $\Delta T = 2^\circ C$  thì chúng ta thấy rằng độ dày của vỏ chai đều đặn hơn so với các các giá trị  $\Delta T$  còn lại. Chính vì vậy, chúng ta có thể kết luận rằng độ dày mỏng của vỏ chai tùy thuộc rất nhiều vào sự bố trí trường nhiệt độ trong quá trình thổi. Và chúng ta có thể thấy rằng độ chênh lệch nhiệt độ ( $\Delta T$ ) nhỏ nằm trên một chiều cao ( $\Delta H$ ) lớn có thể cho chúng ta «một mô hình tối ưu» đối với quá trình thổi này [26].



**Hình 8.**(A) Biểu đồ trường nhiệt độ dùng trong công nghiệp (Menary et al.[33]); (B) Phân bố trường nhiệt độ dùng trong quá trình mô hình hóa và (C) Số liệu ( $\Delta T, \Delta H$ ).





**Hình 9.** Kết quả độ dày của vỏ chai (e) theo chiều cao của chai (H). Biểu đồ 1:  $\Delta T = 2^\circ C$ ,  $\Delta H$  thay đổi và biểu đồ 2:  $\Delta H = 20$  mm,  $\Delta T$  thay đổi

**Tối ưu hóa quá trình thổi chai**

Trong ngành công nghiệp thổi chai, việc tối ưu hóa chất lượng của chai sẽ được thực hiện bằng việc điều chỉnh các thông số điều khiển trong quá trình sản xuất. Bước này nếu thực hiện sẽ rất tốn kém do phải dùng nhiều phép « thử ». Chính vì vậy, trong dự án này, chúng ta sẽ thực hiện việc tối ưu hóa qua việc thay đổi các thông số điều khiển trong quá trình mô hình hóa.

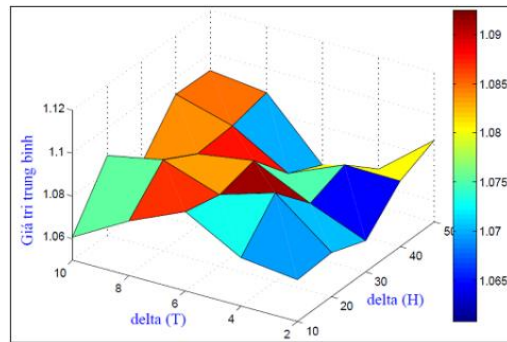
Những nghiên cứu cổ điển sử dụng khi xem xét sự biến đổi của tham số X là dựa vào việc so sánh số liệu trung bình (average) và số liệu dung sai (Ecart-type) của nó. Giá trị trung bình ( $\bar{x}$ ) và giá trị Ecart-type của nó ( $s_x^2$ ) được xác định theo công thức dưới đây:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad \text{và} \quad s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad [\text{Eq.23}]$$

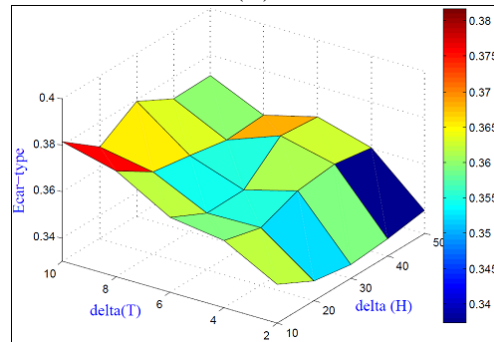
Việc mô hình hóa quá trình thổi chai được thực hiện với 25 cặp ( $\Delta T, \Delta H$ ) và đạt được 25 kết quả của  $\bar{x}$  và  $s_x^2$  (Hình 10). Chúng ta nhận thấy rằng độ dày trung bình của vỏ chai theo từng cặp ( $\Delta T, \Delta H$ ) thay đổi: giá trị nhỏ nhất là  $\bar{x}_{min} = 1,065$  mm và lớn nhất là  $\bar{x}_{max} = 1,09$  mm. Những thay đổi này rất nhỏ và điều này là hoàn toàn hợp lý do các phiê ban đầu cũng như số nút trên phiê là giống nhau. Nếu chúng ta tập trung vào kết quả độ dày Ecart-type (Hình 10B), sẽ thấy rằng có một sự thay đổi không nhỏ giữa các kết quả. Theo biểu đồ độ dày Ecart-type, những tính toán

với  $\Delta T$  nhỏ sẽ đạt hiệu quả tốt hơn, và nhất là với  $\Delta T = 2^\circ C$  và chiều dài phân bố  $\Delta H = 50$  mm chúng ta sẽ có kết quả tối ưu nhất của quá trình thổi.

Kết quả thu được tại Hình 10 cho phép tối ưu hóa độ dày của vỏ chai trong quá trình thổi bằng sự thay đổi các thông số điều khiển. Tuy nhiên đối với mỗi loại chai, mỗi một thông số điều khiển... cần sẽ có sự bố trí trường nhiệt độ khác nhau để tối ưu hóa độ dày vỏ chai, nhưng những kết quả đạt được ở trên sẽ là tiền đề để tham khảo cho các mô hình mô phỏng quá trình thổi và cho các mô hình trong ngành công nghiệp thổi chai nhằm đạt được sự ổn định của vỏ chai.



(A)



(B)

**Hình 10.** (A) Độ dày trung bình ( $\bar{x}$ ) và (B) độ dày Ecart-type ( $s_x^2$ ) của quá trình thổi chai với các 25 cặp ( $\Delta T, \Delta H$ )

**KẾT LUẬN**

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã thành công bước đầu trong nghiên cứu quá trình thổi chai từ phiê PET bằng việc sử dụng phương pháp phần tử tự nhiên (NEM). Phương pháp NEM

đã làm giảm thiểu những vấn đề khó khăn gặp phải của phương pháp phần tử hữu hạn (*FEM*) như: biến dạng lớn và xây dựng lại lưới thường xuyên...**Bằng** việc áp dụng phương pháp *NEM* vào quá trình thổi chai, có thể đã mô phỏng quá trình thổi chai với hình dạng chai phức tạp. Sự ảnh hưởng của trường nhiệt độ vào sự phân bố độ dày của vỏ chai đã được nghiên cứu và đưa ra những số liệu đầy đủ và chi tiết. Điều này cho phép tối ưu hóa quá trình thổi chai trong công nghiệp.

Về hướng nghiên cứu tiếp theo, cần phải sử dụng mô hình tính toán đa dạng hơn với: số điểm cơ bản trên phôi cần dày hơn ( $N_x, N_y$ ), hình dạng chai phức tạp hơn (phi tuyến tính lồi/lõm), sử dụng nhiều trường nhiệt độ, thay đổi các thông số điều khiển ( $p, v, \dots$ ) cũng như phải phát triển một mô hình mô phỏng quá trình thổi chai trong 3D để thu được những kết quả gần hơn với thực tế. Qua đó sẽ định hình và kiểm soát được « toàn bộ » các thông số nhằm « tránh » những rủi ro của quá trình thổi chai trong công nghiệp.

## Modelling of PET bottle process using natural element method

• Cao Hong Phong

• Tran Van Xuan

Electricité de France (EDF R&D)

• Ly Hung Anh

John von Neumann Institute, VNU-HCM

Ho Chi Minh City University of Technology, VNU-HCM

### ABSTRACT

*The modeling of the stretch-blow molding process for PET bottle is very complex. The most challenging problems need to be solved such as the bi-axial large deformation of the PET during the molding process, the choice of the appropriate material behavior law, the determination of the optimal control parameters. In order to overcome these issues, in this paper, the stretch-blow molding process is modeled by using the Natural Element Method (NEM). Also, the non-linear and visco-elastic material behavior law is used in the computation thanks to its capacity of*

*describing the real material behavior. The computational results based on an axisymmetric model show that the proposed method can be used to investigate the effects of the control parameters on the thickness distribution of the bottle as well as the temperature, stress and strain distributions. These results will be used to study the performance of the produced bottles. In perspective, the extension of the model to 3D and the application of the model to determine the optimal control parameters for the real bottle will be considered.*

**Keywords:** NEM, PET, bottle process, **temperature** profile, visco-elastic behavior.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. E. Deloy, Effet de l'architecture de chaîne sur le comportement en injection soufflage de copolyesters PET -étude expérimentale, *Thèse de doctorat, L'école de Mines de Paris* (2006).
- [2]. L. Chevalier, Y. Marco, G. Regnier, Modification des propriétés durant le soufflage des bouteilles plastiques en PET, *Mec. Ind.* 2, 229-248 (2009).
- [3]. A. Mahendrasingam, C. Martin, W. Fuller, D.J. Blundell, Effect of draw ratio and temperature on the strain-induced crystallization of PET at fast draw rates, *Polymer*, 40, 5553-5565 (1999).
- [4]. Y.M. Salomeia, G.H. Menary, C.G. Armstrong, Experimental investigation of stretch blow molding, part I: Instrumentation in an industrial environment and part II: Analysis of process variables, blowing kinematics and bottle properties (2013).
- [5]. Z.J. Yang, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, G.H. Menary, Finite element modelling of stretch-blow moulding of PET bottles using Buckley model: plant tests and effects of process conditions and material parameters, *ARCHIVE Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part E Journal of Process Mechanical Engineering*, 218, 4, 237-250 (2004).
- [6]. C.P. Buckley, D.C. Jonest, Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition, *Polymer*, 36, 17, 3301-3312 (1995).
- [7]. F.M. Schmidt, J.F. Agassant, M. Bellet, L. Desoutter, Viscoelastic simulation of PET stretch blow molding process, *J. Non-Newtonian Fluid Mech*, 64, 19-42 (1996).
- [8]. J.P. McEvoy, C.G. Armstrong, R.J. Crawford, Simulation of the stretch blow molding process of PET bottles, *Inc. Adv Polym Tech*, 17, 339-352 (1998).
- [9]. H. Menary, C.G. Armstrong, R.J. Crawford, G.H. McEvoy, Modelling of polyethylene terephthalate in injection stretch-blow molding, *Plastics Rubber and Composites*, 29, 7 (2000).
- [10]. X.T. Pham, F. Thibault and L.T. Lim, Modeling and simulation of stretch blow molding of polyethylene terephthalate, *Polym. Eng. Sci.*, 44, 1460-1472 (2004).
- [11]. G.H. Menary, C.W. Tan, E.M.A. Harkin-Jones, C.G. Armstrong, P.J. Martin, Biaxial deformation and experimental study of PET at conditions applicable to stretch blow molding, *Polymer Engineering and Science*, 52, 3, 671-688 (2011).
- [12]. Z.J. Yang, E.M.A. Harkin-Jones, G.H. Menary, C.G. Armstrong, Coupled temperature-displacement modelling of injection stretch-blow moulding of PET bottles using Buckley model, *Journal of Materials Processing Technology*, 153-154 (2004).
- [13]. K.C. Lin, C.H. Chen, H.C. Peng, H.C. Kuan, Experimental and simulation of PET injection stretch blow molding of a 600ml bottle, *International Symposium on Computer, Communication, Control and Automation*, 573-576 (2010).
- [14]. R. van Dijk, F. van Keulen, J.C. Sterk, Simulation of closed thin-walled structures partially filled with fluid, *International Journal of Solids and Structures*, 37, 6063-6083 (2000).
- [15]. Strength as an Issue in the Manufacture of lightweight wine bottles, *Glass Technology Services* (2008).
- [16]. M. Bordival, F.M. Schmidt, Y.L. Maout, V. Velay, Optimization of preform temperature distribution for the stretch-blow molding of PET bottles: Infrared heating and blowing modeling, *Polymer*

- Engineering and Science*, 49, 783-793 (2009).
- [17]. Y.C. Chang, C.T. Liu, W.L. Hung, Optimization of process parameters using weighted convex loss functions, *European Journal of Operational Research*, 196, 752–763 (2009).
- [18]. M. Sambridge, J. Braun, M. McQueen, Geophysique parameterization and interpolation of irregular data using natural neighbor, *Geophysics Journal International*, 122, 837-857 (1995).
- [19]. N. Sukumar, B. Moran, T. Belytschko, The natural element method in solid mechanics, *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 43, 839-887 (1998).
- [20]. T. Belytschko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free-Galerkin methods, *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 37, 229-256 (1994).
- [21]. W.K. Liu, S. Jun, Y.F. Zhang, Reproducing kernel particle methods, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 20, 1081-1106 (1995).
- [22]. L.B. Lucy, A numerical approach to the testing of fusion process, *The Astronomic Journal*, 88, 1013-1024 (1977).
- [23]. R. Sibson, A. Vector, Identity for the Dirichlet tessellations, *Math. Proc. Camb.*, 87, 151-155 (1980).
- [24]. J. Yvonnet, D. Ryckelynck, P. Lorong, F. Chinesta, A new extension of the natural element method for non-convex and discontinuous problems: the constrained natural element method (C-NEM), *International Journal for Numerical Methods in engineering*, 60, 1451-1474 (2004).
- [25]. J. Yvonnet, P. Villon, F. Chinesta, Natural element approximations involving bubbles for treating incompressible media, *Inter Journal for Numerical Methods in Engineering*, 66, 1125-1152 (2006).
- [26]. B. Cosson, Modélisation et simulation numérique du procédé desoufflage par bi-orientation des bouteilles en PET, *Thèse de doctorat, L'Université Paris-est* (2008).
- [27]. B. Delaunay, Sur la sphère vide, *Bulletin of Academy of Sciences of the USSR*, 7, 793-800 (1934).
- [28]. F. Thibault, A. Malo, B. Lanctot, R. Diraddo, Preform shape and operating condition optimization for the stretch blow molding process, *Polymer Eng. and Sc.*, 47, 3, 289-301 (2007).
- [29]. M.C. Boyce, S. Socrate, P.G. Llana, Constitutive model for the finite deformation stress-strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition, *Polymer*, 41, 2183-2201 (2000).
- [30]. L. Chevalier and Y. Marco, Identification of a strain induced crystallisation model for PET under uni and biaxial loading: influence of temperature dispersion, *Mechanics and Materials*, 39, 596-609 (2006).
- [31]. B. Cosson, L. Chevalier, J. Yvonnet, Simulation du procédé de soufflage par la méthode des éléments naturels contraints (C-NEM): application à l'optimisation du procédé, *Mate&Tech*, 95, 1-9 (2008).
- [32]. G.M. Voronoi, Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, Recherches sur les paralléloèdres primitifs, *J. Reine Angew. Math*, 134, 198-287 (1908).
- [33]. G.H. Menary, C.W. Tan, M. Picard, N. Billon, C.G. Armstrong, E.M.A. Harkin-Jones, numerical simulation of injection stretch blow moulding: comparison with experimental free blow trials, *CP907, 10 ESAFORM Conference on Material Forming*, (2007).