



HAL
open science

Modélisation et optimisation numérique de l'étape de chauffage infrarouge pour la fabrication de bouteilles en PET par injection-soufflage

Maxime Bordival

► **To cite this version:**

Maxime Bordival. Modélisation et optimisation numérique de l'étape de chauffage infrarouge pour la fabrication de bouteilles en PET par injection-soufflage. Sciences de l'ingénieur [physics]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009. Français. NNT : 2009ENMP1647 . pastel-00005731

HAL Id: pastel-00005731

<https://pastel.hal.science/pastel-00005731v1>

Submitted on 19 Jan 2010

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.



Ecole Doctorale 364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

N° attribué par la bibliothèque

____/____/____/____/____/____/____/____/

T H E S E

pour obtenir le grade de
Docteur de l'École des Mines de Paris
Spécialité "Mécanique Numérique"

présentée et soutenue publiquement par

Maxime BORDIVAL

Soutenue le 06 juillet 2009

**MODELISATION ET OPTIMISATION NUMERIQUE DE L'ETAPE DE
CHAUFFAGE INFRAROUGE POUR LA FABRICATION DE
BOUTEILLES EN PET PAR INJECTION-SOUFFLAGE**

Directeur de thèse : Fabrice Schmidt / Yannick Le Maoult

Jury

Pr.	Jean-Marie BUCHLIN	Rapporteur
Pr.	Luc CHEVALIER	Rapporteur
Pr.	Noëlle BILLON	Présidente du jury
Pr.	Fabrice SCHMIDT	Examinateur
Dr.	Yannick LE MAOULT	Examinateur

Table des matières

Chapitre 1 Problématiques industrielles et objectifs de la thèse	5
1.1 Fabrication des bouteilles en PET par injection-soufflage avec bi-étirage en cycle froid.....	7
1.1.1 Le poly(éthylène téréphtalate) (PET)	7
1.1.2 Principe général du procédé d'injection-soufflage en cycle froid	8
1.1.3 Les systèmes de chauffage infrarouge	12
1.2 Problématiques et objectifs de la thèse.....	15
1.2.1 Problématiques industrielles relatives au chauffage IR des préformes	15
1.2.2 Objectifs de la thèse et démarche adoptée.....	15
Chapitre 2 Simulation numérique du chauffage infrarouge.....	19
2.1 Modélisation des transferts thermiques	21
2.1.1 Nature des transferts thermiques dans le cadre de l'injection-soufflage	21
2.1.2 Equation de la chaleur et terme source radiatif.....	23
2.1.3 Grandeurs et lois du rayonnement thermique	24
2.1.4 Equation du Transfert Radiatif (ETR).....	31
2.1.5 Application à l'injection-soufflage : loi de Beer-Lambert	32
2.2 Caractérisation du matériau de l'étude	35
2.2.1 Mesure des propriétés radiatives du PET T74F9.....	35
2.2.2 Propriétés thermiques du PET T74F9	41
2.3 Simulation numérique du chauffage IR.....	43
2.3.1 Etat de l'art.....	43
2.3.2 Le logiciel PLASTIRAD	45
2.3.3 Application : simulation du chauffage IR d'une préforme 18g.....	49
2.4 Conclusion partielle.....	55
Chapitre 3 Simulation thermo-mécanique de l'étape de soufflage.....	59
3.1 Implantation d'une loi de comportement dans ABAQUS®	61
3.1.1 Introduction : objectifs de l'étude	61

3.1.2	Comportement mécanique du PET amorphe dans la gamme de températures de mise forme	62
3.1.3	Modélisation du comportement du PET pour l'injection-soufflage.....	65
3.1.4	Choix d'une loi de comportement	70
3.1.5	Identification des paramètres constitutifs de la loi de G'Sell modifiée	72
3.1.6	Validation de l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®	84
3.1.7	Conclusion sur l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®	92
3.2	Mesure des conditions aux limites	94
3.2.1	Introduction : présentation du pilote de soufflage.....	94
3.2.2	Mesure de la pression et du débit de soufflage	95
3.2.3	Mesure de la distribution de température de la préforme	99
3.2.4	Mesure de la Résistance Thermique de Contact (RTC) préforme/moule	100
3.2.5	Conclusion sur les mesures des conditions aux limites	108
3.3	Simulation numérique de l'étape de soufflage.....	109
3.3.1	État de l'art	109
3.3.2	Points clefs du modèle développé avec le logiciel ABAQUS®	110
3.3.3	Simulation numérique du soufflage d'une bouteille 50 cl à fond plat	116
3.3.4	Conclusion sur la validation des résultats numériques.....	120
3.4	Conclusion partielle.....	121
Chapitre 4 Optimisation du chauffage infrarouge		121
4.1	Les méthodes d'optimisation non-linéaires.....	127
4.1.1	Introduction : terminologie.....	127
4.1.2	Classification des méthodes d'optimisation non-linéaire	129
4.1.3	L'algorithme SQP ("Sequential Quadratic Programming") Matlab®	138
4.1.4	L'algorithme de Nelder-Mead	144
4.1.5	Conclusion de l'étude bibliographique	156
4.2	Optimisation de la distribution de température de la préforme.....	157
4.2.1	Positionnement du problème	157
4.2.2	Résultats et discussion	160
4.2.3	Conclusion sur l'optimisation de la distribution de température de la préforme	164
4.3	Optimisation des paramètres de réglage du four IR	165
4.3.1	Positionnement du problème	165
4.3.2	Résultats et discussion	168
4.3.3	Conclusion sur l'optimisation des paramètres de réglage du four IR	171
4.4	Conclusion partielle.....	172

Conclusions et perspectives.....	173
Bibliographie.....	177
Annexe A Etablissement de l'Equation du Transfert Radiatif (ETR) [MOD-1993]	185
Annexe B Etat de l'art sur la simulation numérique du procédé d'injection-soufflage (Tableau non exhaustif).....	189
Annexe C Soufflage d'une membrane hémisphérique obéissant à une loi viscoplastique avec durcissement	191
Annexe D Etude de sensibilité : influence des coefficients d'échange convectif sur la distribution de température calculée avec PLASTIRAD	199

Nomenclature

A, B, C	Termes d'écroissage de la loi de G'sell
C_1, C_2	Constantes de la loi WLF
C_1^g, C_2^g	Constantes de la loi WLF à la température de transition vitreuse
$F_{i \rightarrow j}$	Facteur de forme entre les éléments i et j
$\mathcal{H}(x, \lambda, \mu)$	Hessien de la fonction Lagrangienne $\mathcal{L}(x, \lambda, \mu)$ par rapport à x
I	Matrice identité
K	Fonction consistance
L_0	Longueur utile initiale de l'éprouvette de traction
L	Longueur utile de l'éprouvette de traction au cours du temps
L_Q	Longueur du tube en quartz d'une lampe halogène
L_W	Longueur du filament de tungstène d'une lampe halogène
$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu)$	Lagrangien associé au problème d'optimisation général
$L_\lambda(s, \vec{\Omega})$	Luminance spectrale au point s dans la direction $\vec{\Omega}$
$L_\lambda^\circ(T)$	Luminance spectrale du corps noir à la température T
N	Nombre de nœuds du maillage
Pr	Nombre adimensionnel de Prandtl
$P(x)$	Fonction de pénalité
P_b	Pourcentage du bruit ajouté artificiellement à la fonction coût
P_i	Pourcentage de la puissance nominale affecté à la lampe i
P_λ	Fonction de phase
Ra	Nombre adimensionnel de Rayleigh
R_{Th}	Résistance thermique de contact
S	Tenseur déviateur des contraintes
S^2	Sphère unitaire
T_a	Température de l'air insufflé dans la préforme
T_c	Température de cristallisation
T_{cal}	Température calculée par le logiciel PLASTIRAD
T_F	Température du filament de tungstène
T_{FILM}	Température de film
T_g	Température de transition vitreuse

T_M	Température de la paroi interne du moule
T_{obj}	Température objectif fixée pour l'optimisation
T_P	Température de la paroi externe de la préforme
T_{PET}	Température du PET
T_λ	Transmittivité spectrale apparente
T_∞	Température de l'air ambiant
T_0	Température initiale
V	Vitesse de traverse
a_T	Facteur de glissement
c_1, c_2	Constantes de la loi de Planck
c_P	Capacité calorifique massique
d_Q	Diamètre du tube en quartz d'une lampe halogène
d_W	Diamètre du filament de tungstène d'une lampe halogène
d^k	Direction d'avancé, à l'itération k, d'un algorithme de descente
dS	Elément de surface unitaire
ds	Trajet optique infinitésimal
$d\lambda$	Variation infinitésimale de longueur d'onde
$d\Omega$	Angle solide unitaire
e	Épaisseur de la bouteille
e_Q	Épaisseur du tube en quartz d'une lampe halogène
e_W	Épaisseur d'une spire du filament de tungstène d'une lampe halogène
f	Fonction coût ou objectif
f_v	Forces volumiques
g	Fonctions contraintes d'inégalités
h	Fonctions contraintes d'égalités
h_a, h_c	Coefficient d'échange convectif
k	Conductivité thermique
k_0	Consistance
l_λ	Libre parcours moyen de photon
m	Indice de sensibilité à la vitesse de déformation
m_a	Masse d'air situé dans la cavité de la préforme
n	Nombre de variables d'optimisation
n_{pi}, n_{pe}, n_c	Normales extérieures
p	Pression hydrostatique
q	Débit massique d'air injecté dans la préforme

\vec{q}_c	Vecteur densité de flux conductif
\vec{q}_r	Vecteur densité de flux radiatif
$q_{\lambda 0}$	Densité de flux radiatif spectrale incidente
r	Opérateur de réflexion de l'algorithme de Nelder-Mead
s	Coordonnées d'un point dans un repère cartésien
t	Temps
t_{ch}	Temps de chauffage
t_{re}	Temps de refroidissement
v	Vecteur vitesse
u	Déplacement
x	Vecteur de variables d'optimisation
x^*	Minimum local
\bar{x}	Centre de gravité du simplexe
ΔP	Surpression appliquée pour le soufflage d'une membrane
Δt	Intervalle de temps
Δx	Perturbation imposée aux variables d'optimisation pour le calcul des dérivées par différences-finies
$\Delta \mathcal{E}$	Variation maximale autorisée pour la déformation à chaque incrément de temps de la simulation éléments-finis
$\Delta \lambda$	Bande spectrale
Γ_e	Surface d'un volume de contrôle Ω_e
Γ_{int}^l	Surface libre interne (paroi interne de la préforme)
Γ_{ext}^l	Surface libre externe (parti libre de la paroi externe de la préforme)
Γ^c	Aire de contact préforme/moule
Ψ	Fonction exacte pénalisée
Ω	Hémisphère
Ω_e	Volume de contrôle
Φ_λ	Flux radiatif spectral
$\Phi_{i\lambda}$	Flux radiatif spectral incident à une surface
$\Phi_{r\lambda}$	Flux radiatif spectral réfléchi par une surface
$\Phi_{t\lambda}$	Flux radiatif spectral transmis par une surface
α^k	Pas d'avancé, à l'itération k , d'un algorithme de descente
$\alpha_\lambda(\bar{\Omega}, T)$	Absorptivité directionnelle spectrale à la température T
$\alpha(T)$	Absorptivité hémisphérique totale à la température T
α_λ	Absorptivité hémisphérique spectrale

$\dot{\alpha}$	Vitesse de déformation en traction uniaxiale
β	Coefficient de la loi d'Arrhenius
β_λ	Coefficient d'extinction spectral
γ	Opérateur de contraction de l'algorithme de Nelder-Mead
$\varepsilon_\lambda(\bar{\Omega}, T)$	Emissivité directionnelle spectral à la température T
$\varepsilon(\bar{\Omega}, T)$	Emissivité directionnelle totale à la température T
$\varepsilon(T)$	Emissivité hémisphérique totale à la température T
$\varepsilon, \varepsilon_c, \varepsilon_f, \varepsilon_x$	Nombres réels positifs infinitésimaux
$\varepsilon_{\lambda, PET}$	Emissivité spectrale du PET
$\varepsilon_{\lambda, F}$	Emissivité spectrale du filament de tungstène
$\dot{\varepsilon}$	Tenseur des vitesses de déformation
$\dot{\bar{\varepsilon}}$	Vitesse de déformation équivalente
$\bar{\varepsilon}$	Déformation équivalente
η	Coefficient de pénalité
θ	Angle polaire
κ_λ	Coefficient d'absorption spectral
$\bar{\kappa}_{\Delta\lambda}$	Coefficient d'absorption moyen sur la bande spectrale $\Delta\lambda$
λ	Longueur d'onde
λ_c	Vecteur des multiplicateurs de Lagrange
λ_m	Longueur d'onde correspondant au maximum d'émission de la loi de Planck
μ_c	Vecteur des multiplicateurs de Lagrange
ν	Opérateur de rétrécissement de l'algorithme de Nelder-Mead
ρ	Masse volumique
ρ_λ	Réflectivité spectrale
σ	Tenseur des contraintes
$\bar{\sigma}$	Contrainte équivalente de Von Mises
σ_λ	Coefficient de diffusion spectral
σ_{SB}	Constante de Stefan-Boltzmann
τ_λ	Transmittivité spectrale
φ	Densité de flux de chaleur conductif
χ	Opérateur d'expansion de l'algorithme de Nelder-Mead
ω	Angle azimutal
∇f	Vecteur gradient de la fonction coût f
∇g	Matrice dont les colonnes représentent les vecteurs gradients des

	fonctions contraintes d'inégalités (inverse de la matrice Jacobienne)
∇h	Matrice dont les colonnes représentent les vecteurs gradients des fonctions contraintes d'égalités (inverse de la matrice Jacobienne)
∇T	Vecteur gradient de température
$\nabla \cdot (\vec{q}_r)$	Divergence du vecteur densité de flux radiatif (terme source radiatif)
$\nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*)$	Gradient du Lagrangien associé au problème d'optimisation général par rapport à x

Avant propos

Contexte de la thèse : le projet APT_PACK

Les travaux de thèse que nous allons présenter s'inscrivent dans le cadre du projet Européen APT_PACK ("Advanced knowledge of Polymer deformation for Tomorrow's PACKaging"). L'objectif principal de ce projet est de contribuer à l'optimisation des procédés de fabrication des emballages plastiques nécessitant une étape d'étirage. Deux procédés sont plus particulièrement concernés : le thermoformage, et l'injection-soufflage qui est notamment utilisé pour la fabrication des bouteilles en Poly(éthylène téréphtalate) (PET).

Quelques mots sur le marché Européen de l'emballage plastique

La fabrication d'emballages en matières plastiques regroupe la production de bouteilles, mais aussi de sacs et sachets, de boîtes, de bacs et caisses, d'articles de bouchage, et d'articles pour le transport (FIG. 1a). En 2008, ce secteur rassemblait en France 279 entreprises de 20 salariés ou plus, et générait un chiffre d'affaires de 7 milliards d'euros [Ses-2008]. La fabrication des emballages plastiques requiert 12,5 millions de tonnes de matières premières par an, dont 3.9 millions de tonnes pour le PET [DGC-2007]. Le plastique occupe le premier rang des matériaux d'emballage, avec 33 % de parts de marché en France (FIG. 1b) et 38 % en Europe. Les applications phares proviennent du secteur agroalimentaire qui constitue le premier client de l'emballage plastique (65 % des débouchés en Europe). L'activité de production et de commercialisation de bouteilles ou contenants en PET a généré, en 2005, un chiffre d'affaires de 1,4 milliard d'euros au sein de l'Union européenne, représentant un volume de 20 milliards d'unités vendues [DGC-2007].

Aujourd'hui, le secteur de l'emballage plastique est confronté à des contraintes environnementales de plus en plus fortes, ainsi qu'à l'augmentation du prix des matières premières. Les industriels sont donc amenés à étudier des solutions nouvelles, telles que l'utilisation de matériaux biodégradables, tout en maintenant leurs efforts concernant le recyclage, les économies d'énergie, et la réduction du poids des emballages fabriqués. Ces différentes problématiques sont à l'origine de la création du projet APT_PACK.

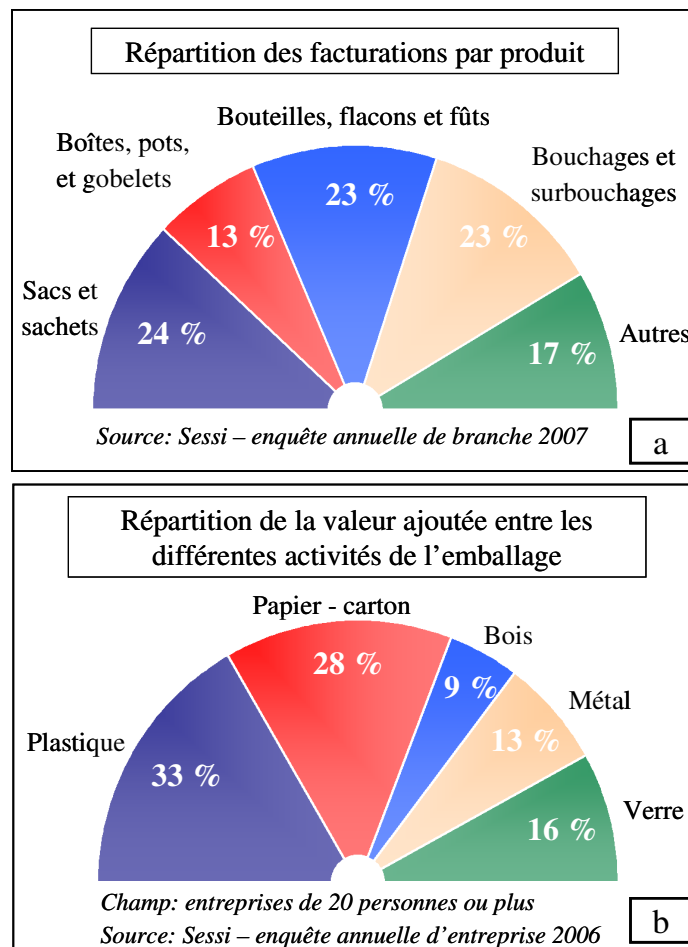


FIG. 1 - a) Le plastique prédomine le marché de l’emballage [SES-2008] – b) Parts des bouteilles et flacons sur le marché de l’emballage plastique [SES-2008]

Axes de recherche du projet APT_PACK

Le projet est coordonné par le CEMEF, Centre de Mise en Forme des Matériaux de Mines ParisTech, en partenariat avec ARMINES. Il est issu d’un consortium de huit groupes industriels, auxquels s’associent huit laboratoires de recherches, représentant au total dix nations différentes. Ce projet est donc fortement international. Les travaux de recherches réalisés dans ce projet sont répartis en quatre axes principaux :

1. L’étude du comportement mécanique des polymères mis en œuvre par injection-soufflage et thermoformage, et le développement de lois de comportement adaptées.
2. L’étude de l’évolution de la microstructure des polymères au cours de leur mise en forme.
3. L’étude des phénomènes thermiques et mécaniques mis en jeu, la modélisation, et l’optimisation des procédés concernés.
4. L’étude des corrélations entre microstructures, conditions de mise en œuvre, et propriétés du produit final (propriétés mécaniques entre autres).

Objectifs du CROMeP dans le cadre du projet APT_PACK

Le CROMeP est impliqué dans l'axe N°3 du projet APT_PACK. Les objectifs fixés concernent la modélisation des transferts thermiques intervenant durant le procédé d'injection-soufflage en cycle froid. Ce procédé, notamment utilisé pour la fabrication des bouteilles en PET, comprend deux étapes principales. La première étape, dite de *conditionnement thermique*, consiste à chauffer une préforme en PET (sorte de tube à essai) avant que celle-ci ne soit conformée en bouteille par *étirage-soufflage* lors de la seconde étape. Bien que le principe général de ce procédé soit relativement simple, il subsiste encore de nombreuses problématiques concernant la maîtrise des propriétés finales de la bouteille, telles que sa distribution d'épaisseur.

Les travaux de recherche présentés dans cette thèse sont étroitement liés aux objectifs du CROMeP. L'objectif principal de cette étude est le développement d'une méthode numérique dédiée à l'optimisation de l'étape de conditionnement thermique.

Structure du manuscrit

Ce manuscrit s'articule autour de quatre chapitres :

- ✓ Le premier chapitre est consacré à la présentation du procédé d'injection-soufflage avec bi-étirage en cycle froid. Un intérêt tout particulier sera accordé à la présentation des problématiques relatives à la phase de conditionnement thermique. Nous définirons les objectifs de la thèse, et présenterons la démarche adoptée.
- ✓ Le second chapitre vise à présenter le modèle numérique mis en œuvre pour *simuler le chauffage infrarouge* des préformes. L'objectif est de mettre en évidence la fiabilité du modèle, en vue d'intégrer ce dernier dans une boucle d'optimisation.
- ✓ Le troisième chapitre porte sur la *modélisation et la simulation du soufflage de la bouteille*. Après avoir présenté les mesures des conditions aux limites thermiques et mécaniques requises pour les simulations, nous validerons le modèle à l'aide de mesures expérimentales réalisées sur un pilote de laboratoire.
- ✓ Enfin, le dernier chapitre de ce manuscrit est consacré à *l'optimisation du chauffage infrarouge*. Nous mettrons en évidence l'efficacité de la méthode d'optimisation numérique développée en confrontant les résultats numériques à des mesures expérimentales réalisées sur une machine de soufflage semi-industrielle.

Chapitre 1

Problématiques industrielles et objectifs de la thèse

Table des matières

1.1	Fabrication des bouteilles en PET par injection-soufflage avec bi-étirage en cycle froid.....	7
1.1.1	Le poly(éthylène téréphtalate) (PET).....	7
a)	Nature semi-cristalline du PET	7
b)	Éléments clefs à l'origine du succès du PET	8
1.1.2	Principe général du procédé d'injection-soufflage en cycle froid.....	8
a)	Fabrication de la préforme	8
b)	Mise en forme de la bouteille	9
c)	Principales propriétés d'une bouteille	11
1.1.3	Les systèmes de chauffage infrarouge.....	12
a)	Description d'un module de chauffe.....	12
b)	Principaux paramètres de réglage du four IR.....	14
1.2	Problématiques et objectifs de la thèse.....	15
1.2.1	Problématiques industrielles relatives au chauffage IR des préformes	15
1.2.2	Objectifs de la thèse et démarche adoptée.....	15

1.1 Fabrication des bouteilles en PET par injection-soufflage avec bi-étirage en cycle froid

Le procédé d'injection-soufflage en cycle froid est utilisé pour la fabrication de corps creux, tels que les bouteilles ou les flacons, destinés au conditionnement des eaux minérales plates ou gazeuses, des jus de fruits, ou encore des boissons carbonatées. A l'heure actuelle, ce procédé permet d'atteindre des cadences de production de l'ordre de 60 000 bouteilles par heure. Sur un marché de grande consommation comme celui de la boisson, ces hautes cadences sont nécessaires pour une bonne rentabilité. Le procédé d'injection-soufflage s'adresse essentiellement à des matières thermoplastiques. Citons par exemple le polypropylène (PP), ou encore le polylactide (PLA) qui est un polymère biocompostable issu de matières premières renouvelables. A l'heure actuelle, le poly(éthylène téréphtalate) (PET) reste toutefois le polymère le plus utilisé pour la fabrication des bouteilles par injection-soufflage.

1.1.1 Le poly(éthylène téréphtalate) (PET)

a) Nature semi-cristalline du PET

Le PET est un thermoplastique semi-cristallin de la famille des polyesters saturés. Il est obtenu par polycondensation à partir d'acide téréphtalique et d'éthylène glycol. La FIG. 1.1 illustre sa formule chimique.

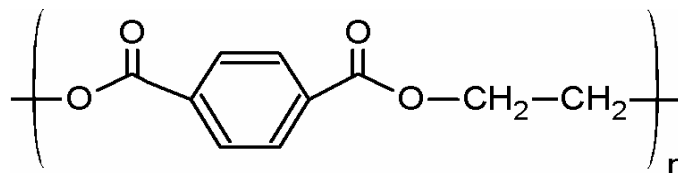


FIG. 1.1 - Unité constitutive du poly(éthylène téréphtalate) (PET)

La structure du PET peut être amorphe ou partiellement cristalline (jusqu'à 50 %). Entre sa température de transition vitreuse (environ 80 °C) et sa température de fusion (environ 250 °C), le PET peut cristalliser thermiquement, ou sous l'effet de la déformation. La cristallisation thermique peut avoir lieu lors du refroidissement du matériau depuis l'état fondu, ou lors de son chauffage depuis l'état vitreux (cristallisation dite froide). Cette cristallisation est fortement affectée par les vitesses de chauffage/refroidissement. Elle se traduit par le développement de structures cristallines de type sphérolitique, dont la taille caractéristique est de l'ordre de la centaine de micromètres [MAR-2003]. La cristallisation thermiquement activée représente une limitation pour la mise en œuvre du PET par injection-soufflage. D'une part, les cristaux formés

sont suffisamment volumineux par rapport aux longueurs d'ondes du rayonnement visible pour opacifier le matériau (et donc la bouteille). D'autre part, les cristaux rigidifient le matériau et, par conséquent, nuisent à la bonne mise en forme de la bouteille. En revanche, le second type de cristallisation est recherché. La cristallisation induite, générée lors de la sollicitation du PET en élongation, confère au matériau des propriétés particulièrement intéressantes. Elle est une des origines du succès du PET sur le marché de l'emballage plastique, et a fortiori, sur le marché de la bouteille.

b) Eléments clefs à l'origine du succès du PET

Lors de la fabrication d'une bouteille par injection-soufflage, le PET est utilisé dans son état amorphe. Dans cet état, le PET présente la capacité de promouvoir, sous l'action de la déformation, une phase cristalline induite née de l'orientation moléculaire. Cette phase cristalline est à l'origine du renforcement considérable des propriétés mécaniques de la bouteille [GOR-2001a]. L'utilisation du PET a permis la réalisation de bouteilles 30% plus légères que celles fabriquées à partir de polychlorure de vinyle (PVC) à résistance mécanique équivalente. D'autre part, le PET offre une grande transparence optique. En effet, la taille des cristaux formés lors de la déformation (quelques dizaines de nanomètres) est suffisamment faible par rapport aux longueurs d'ondes du rayonnement visible pour garantir une bonne transparence de la bouteille. Enfin, le PET présente des propriétés barrières au CO₂ très attractives, ce qui a contribué à son succès sur le marché du conditionnement des boissons carbonatées.

1.1.2 Principe général du procédé d'injection-soufflage en cycle froid

a) Fabrication de la préforme

Le procédé d'injection-soufflage requiert la fabrication préalable d'un semi-produit, appelé préforme. Il s'agit d'une pièce cylindrique creuse, moulée par injection à partir de résine de PET. Cette préforme sera par la suite conformée en bouteille par une opération d'étirage-soufflage. Lorsque l'injection de la préforme et le soufflage sont réalisés en ligne, le procédé est dit en *cycle chaud* (ou "one-step"). En revanche, si à l'issue de sa fabrication la préforme est stockée pour être soufflée ultérieurement (éventuellement sur un autre site de production) le procédé est dit en *cycle froid* (ou "two-steps") [DEN-1989]. Cette seconde variante présente l'avantage de découpler la fabrication de la préforme de celle de la bouteille, ce qui permet de mieux gérer les flux de production et les éventuelles pannes. En contre partie, elle génère des problèmes de stockage, ainsi que des problèmes de dégradation des préformes, notamment du fait de l'augmentation de leur taux d'humidité.

Le cadre de cette étude étant limité au procédé d'injection-soufflage en cycle froid, nous n'aborderons pas les problématiques liées à la fabrication des préformes par injection-moulage. Soulignons toutefois que les préformes doivent impérativement être injectées à l'état amorphe. Pour cela, le PET, injecté à l'état fondu, est trempé dans le moule de la presse à injecter. En pratique, les moules d'injection sont réglés en température grâce à des canaux de refroidissement. Les vitesses de refroidissement (environ $300\text{ }^{\circ}\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$) sont alors suffisamment élevées pour limiter la cristallisation thermique du PET [MAR-2003]. A l'issue de leur fabrication, les préformes présentent un taux de cristallinité inférieur à 5% [GOR-2001a].

Les préformes sont dimensionnées en fonction de la géométrie de la bouteille que l'on souhaite fabriquer, et des propriétés mécaniques du PET mis en œuvre. Pour une bouteille de 1.5 litre par exemple, la préforme aura typiquement une épaisseur comprise entre 3 et 4 mm, un diamètre variant de 20 à 30 mm, une hauteur d'environ 100 mm, pour un poids total avoisinant 26 grammes. La FIG. 1.2 illustre un exemple de préformes destinées à la fabrication de bouteilles d'eau minérale (géométries des préformes utilisées dans le cadre du projet APT_PACK).

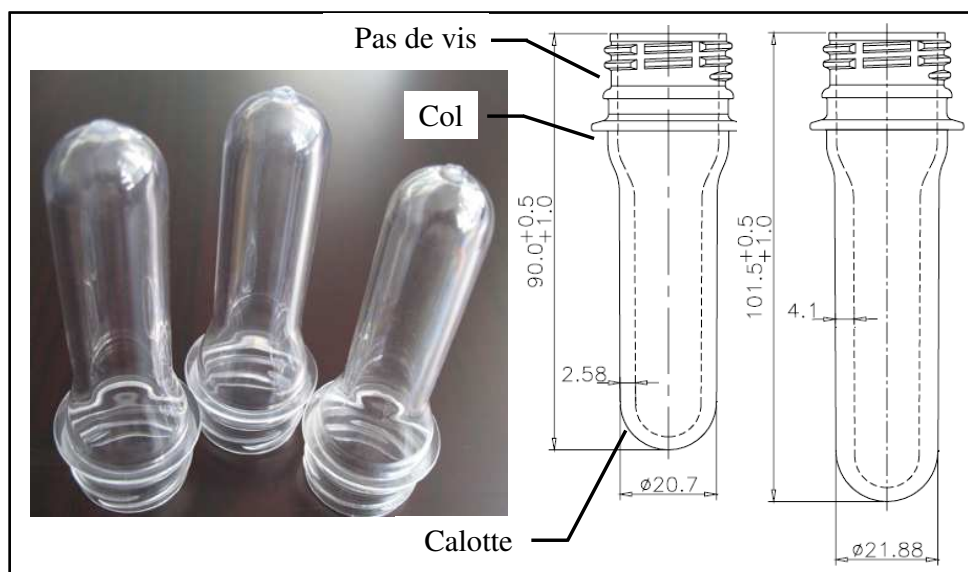


FIG. 1.2 - Exemple de préformes en PET - Géométries des préformes utilisées dans le cadre du projet APT_PACK

b) Mise en forme de la bouteille

A l'issue de la période de stockage, la préforme est acheminée vers une machine de soufflage à l'aide d'une rampe d'accès. La bouteille est alors fabriquée en deux étapes (FIG. 1.3).

✓ **Conditionnement thermique de la préforme :**

La préforme étant stockée à la température ambiante (soit approximativement 20°C), une étape de conditionnement thermique est nécessaire afin d'amener sa température au delà de la température de transition vitreuse du PET (qui est d'environ 80°C). La gamme de température de formage est typiquement comprise entre 90 et 110°C pour le PET. Sur cette plage de températures, le PET adopte un comportement visqueux-caoutchoutique caractérisé, entre autres, par une forte élasticité qui autorise des taux de déformation pouvant atteindre 500 %.

Le conditionnement thermique est réalisé par le passage de la préforme dans un four infrarouge (IR) (FIG. 1.3). La composition du four IR, ainsi que ses différents paramètres de réglage, seront présentés en détail dans la partie consacrée aux systèmes de chauffage. Le PET étant semi-transparent vis à vis du rayonnement IR, une fraction du rayonnement IR est absorbé dans l'épaisseur de la préforme, ce qui permet d'obtenir un chauffage "à cœur". Les temps de chauffage sont généralement de l'ordre de 15 s à 30 s. Nous présenterons ultérieurement les différentes problématiques relatives au chauffage des préformes.

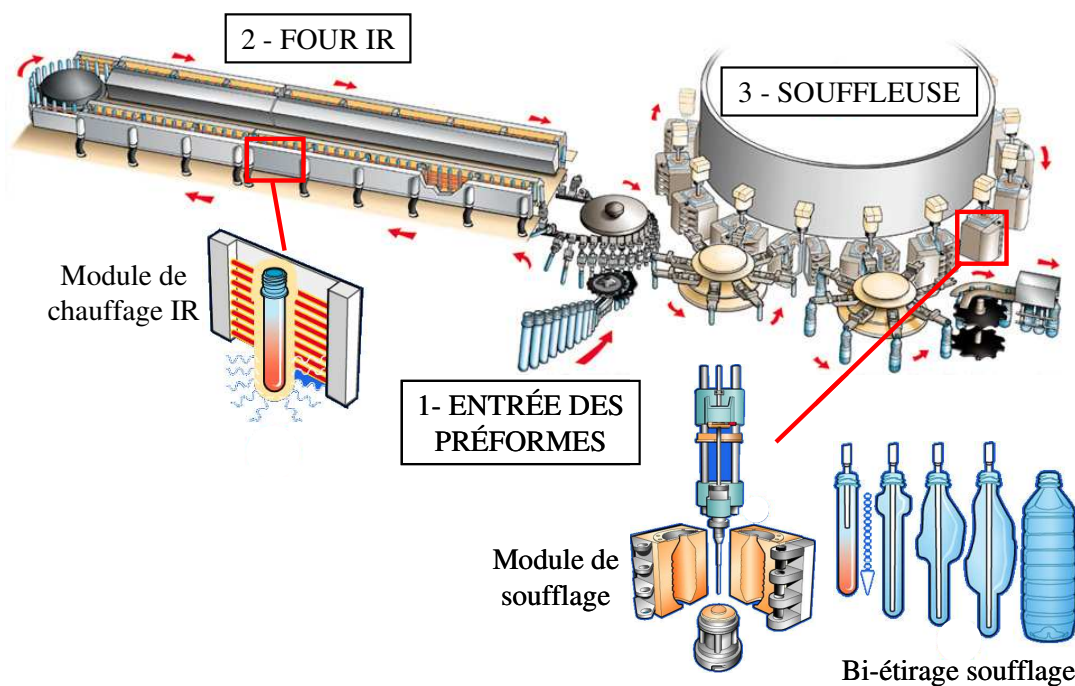


FIG. 1.3 - Illustration du principe général de la fabrication d'une bouteille par injection-soufflage en cycle froid par une souffleuse rotative

✓ **Étirage-soufflage de la préforme :**

A l'issue du conditionnement thermique, la préforme est acheminée vers le module de soufflage, et confinée dans un moule. La bouteille est alors mise en forme en trois étapes :

- Une phase d'étirage pure : la préforme est étirée longitudinalement à l'aide d'une canne dont la vitesse de déplacement vertical est comprise entre 200 mm.s^{-1} et 1000 mm.s^{-1} . La

canne peut éventuellement être régulée en température. Le taux d'étirage longitudinal est de l'ordre de 200 %.

- Une phase d'étirage-soufflage : après un certain déplacement de la canne, appelé Retard au Pré-Soufflage (RPS), de l'air sous pression est injecté à l'intérieur de la préforme afin d'assurer la déformation orthoradiale. La pression nominale de pré-soufflage est de l'ordre de 8 bars. Les phases d'étirage et de pré-soufflage cumulées durent généralement moins de 0.6 s. Cette durée est toutefois suffisante pour assurer la mise en forme quasi-complète de la bouteille. Les vitesses de déformations peuvent atteindre 30 s^{-1} . Le taux d'étirage radial peut atteindre plus de 500 %.
- Une phase de soufflage pure : cette dernière étape consiste à appliquer une pression plus importante (environ 40 bars) afin de finaliser la déformation, mais surtout de maintenir la préforme en contact avec le moule contre lequel elle se refroidit. La température du moule est généralement régulée, par le biais de canaux de refroidissement, à des températures avoisinant $12 \text{ }^\circ\text{C}$. La phase de soufflage dure 2 s à 3 s, elle est aussi la plus longue.

Enfin, après dégazage, la bouteille est éjectée puis acheminée vers les lignes de remplissage, et d'étiquetage.

Les paramètres de réglage modifiables par l'opérateur (pour la phase d'étirage-soufflage) sont les suivants :

- La vitesse de déplacement de la canne d'étirage, ainsi que sa température de régulation.
- Le Retard au Pré-Soufflage (RPS) (en mm).
- La pression nominale de pré-soufflage et la position du limiteur de débit de pré-soufflage.
- La durée du pré-soufflage.
- La pression de soufflage.
- La durée du soufflage.
- La température de régulation du moule.

Ces paramètres de réglage, de même que les paramètres de réglage du four IR, jouent un rôle déterminant sur les propriétés de la bouteille.

c) Principales propriétés d'une bouteille

Les propriétés majeures utilisées pour mesurer la qualité d'une bouteille sont les suivantes :

- Ses propriétés mécaniques (par exemple sa résistance au choc, à l'écrasement, etc...).
- Ses propriétés optiques : notamment sa transparence vis à vis du rayonnement visible.
- Ses propriétés barrières : i.e. sa perméabilité au gaz. Cette propriété est cruciale pour le conditionnement des boissons carbonatées.

Les propriétés mécaniques de la bouteille sont elles même affectées par *sa distribution d'épaisseur*. Pour de nombreuses géométries de bouteilles, il est souhaitable que l'épaisseur du

corps de la bouteille soit la plus uniforme possible afin d'assurer une bonne rigidité de la structure [BER-1999]. De plus, la maîtrise de l'épaisseur est indispensable afin de réduire la quantité de matière consommée.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, ces différentes propriétés sont étroitement liées à l'état microstructural du PET à l'issue de la mise en forme de la bouteille. Or l'évolution de la microstructure du PET est elle même fortement dépendante des conditions de mise en œuvre, notamment des conditions de chauffage de la préforme.

1.1.3 Les systèmes de chauffage infrarouge

a) Description d'un module de chauffage

Le four infrarouge est composé de modules de chauffage dont le nombre varie en fonction de la machine de soufflage. Les souffleuses destinées aux petites séries disposent d'un ou deux modules de chauffage seulement, tandis que les souffleuses rotatives les plus performantes en possèdent plusieurs dizaines. Chaque module est composé, d'une part, d'un râtelier équipé de lampes halogènes montées sur un panneau radiant, et d'autre part, d'un réflecteur en aluminium poli (FIG. 1.4). La préforme transite entre le râtelier et le réflecteur métallique, absorbant ainsi une fraction du flux radiatif émis par les lampes. La préforme est animée d'un mouvement de rotation afin d'assurer une bonne homogénéité de sa température dans la direction circumférentielle. D'autre part, les modules de chauffage sont généralement équipés d'un système de ventilation. Celui-ci permet d'évacuer la chaleur excédentaire afin de limiter l'échauffement du four, et d'éviter l'usure prématurée des éléments chauffants. Ce système de ventilation contribue aussi à refroidir la paroi externe de la préforme, afin d'éviter que celle-ci ne cristallise thermiquement durant le chauffage. Enfin, le col de la préforme, injecté aux dimensions définitives de la bouteille, est protégé du rayonnement grâce à deux déflecteurs refroidis par circulation d'eau. Le but d'un tel système est de limiter les risques de déformation du col susceptible de compromettre, après remplissage, l'opération de bouchage de la bouteille.

La distance entre deux lampes (entraxe) est généralement fixée lors de la conception du râtelier. En revanche, chaque lampe peut être rapprochée ou éloignée de la préforme grâce à des cales métalliques. La puissance nominale des lampes varie généralement entre 2 kW et 3 kW. Des potentiomètres permettent de modifier les pourcentages de la puissance nominale affectés à chacune des lampes. Ainsi, il est possible de contrôler la répartition du flux radiatif reçu par la préforme.

La FIG. 1.5 illustre les dimensions caractéristiques d'une lampe halogène dont la puissance nominale est égale à 2 kW. Les lampes halogènes sont composées d'un filament de tungstène confiné dans un tube en quartz. Le tube en quartz renferme un gaz neutre (Argon) ainsi que des traces d'élément halogène. Ainsi, le tungstène est isolé du milieu extérieur, et plus particulièrement de l'oxygène au contact duquel il s'oxyde.

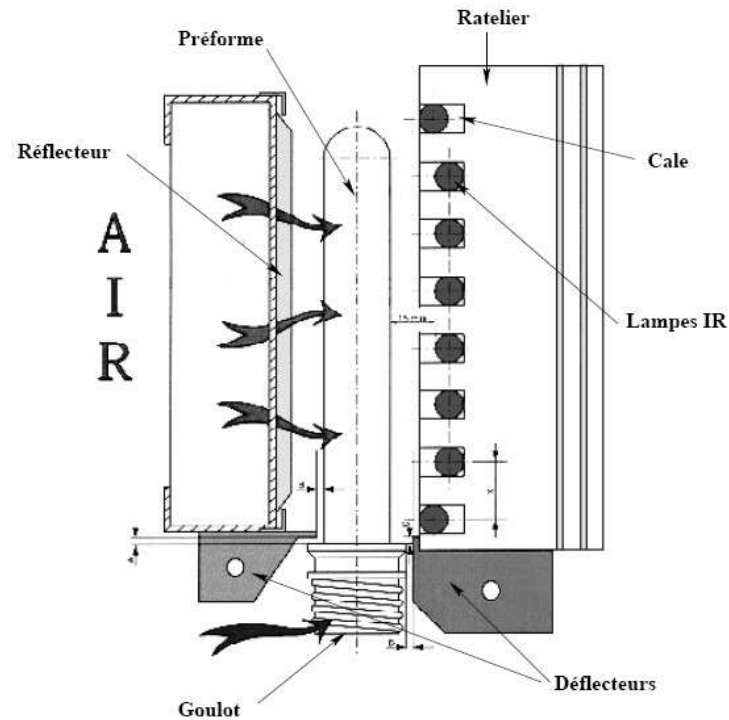


FIG. 1.4 - Schéma d'un module de chauffage infrarouge - Figure extraite de [GOR-2001a]

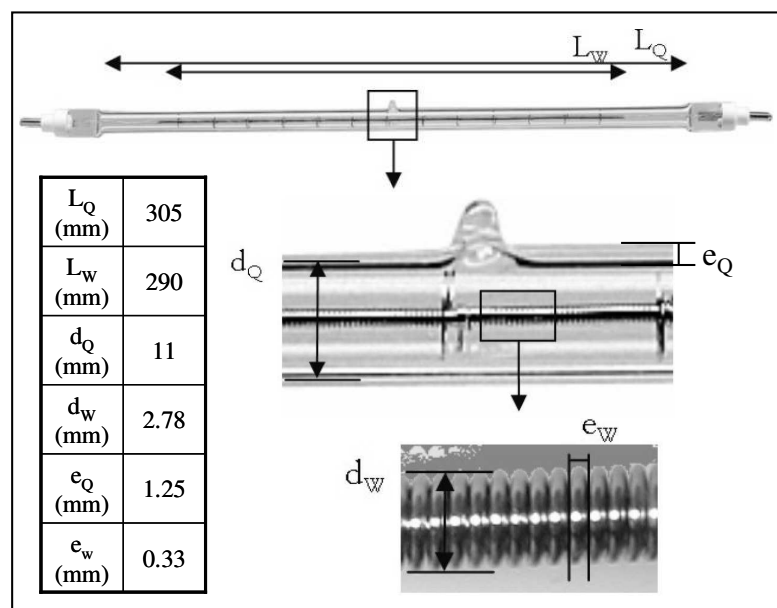


FIG. 1.5 - Dimensions d'une lampe halogène de puissance nominale 2 kW - Figure extraite de [DEL-2006]

Le filament se comporte comme un élément résistif, dans lequel le passage du courant se manifeste par une dissipation de chaleur par effet Joule. Pour une lampe réglée à pleine puissance, la température d'équilibre du filament est typiquement de l'ordre de 2400 K, et le rayonnement qu'il émet est majoritairement compris entre 0.5 et 5 μm . L'émission est

maximale aux alentours de $1.3 \mu\text{m}$, ce qui correspond à un rayonnement dans l'infrarouge court, tel que l'illustre la FIG. 1.6. Le rayonnement émis par le filament représente 90% du rayonnement total émis par la lampe.

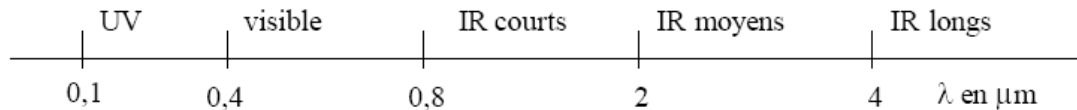


FIG. 1.6 - Bandes spectrales correspondant au rayonnement UV, visible, et IR

Sur cette bande spectrale, le quartz transmet environ 90% du rayonnement ce qui justifie son emploi [MON-2001]. Il est important de noter que la température du filament, ainsi que son spectre d'émission, varient sensiblement en fonction de la tension appliquée aux bornes de la lampe. L'étude réalisée par [MON-2001] révèle qu'une diminution de la puissance d'alimentation induit une diminution de la température du filament, ce qui provoque un décalage du spectre d'émission vers des longueurs d'ondes plus importantes. Ce phénomène joue un rôle important sur le chauffage IR. En effet, l'absorption du PET dépend fortement de la longueur d'onde. Enfin, certaines lampes sont recouvertes d'un revêtement céramique jouant le rôle de réflecteur.

A l'issue de la phase de chauffage, la température de la paroi externe de la préforme est très supérieure à celle de la paroi interne. Généralement, la phase de chauffage est suivie d'une phase de maintien durant laquelle l'émission des lampes est interrompue. La paroi externe de la préforme est alors refroidie par convection, tandis que la paroi interne s'échauffe du fait de la diffusion de la chaleur dans l'épaisseur de la préforme. Cette phase vise à modifier le profil de température dans l'épaisseur de la préforme. Sous réserve que le temps de maintien soit suffisamment long, la température de la paroi interne peut devenir supérieure à celle de la paroi externe. Cette *inversion de température* est souhaitable afin de garantir une déformation homogène, et de conserver la transparence optique de la bouteille [KIM-1985], [VEN-1998].

b) Principaux paramètres de réglage du four IR

Les paramètres de réglage du four affectant la distribution de température de la préforme sont :

- La fraction de la puissance nominale affectée à chacune des lampes.
- La position de chacune des lampes vis à vis de la préforme.
- La vitesse d'avancée de la préforme dans le four IR : cette vitesse conditionne le temps de chauffage ainsi que le temps de maintien.
- La puissance délivrée au ventilateur.

1.2 Problématiques et objectifs de la thèse

1.2.1 Problématiques industrielles relatives au chauffage IR des préformes

Le conditionnement thermique de la préforme apparaît clairement comme une étape critique du procédé d'injection-soufflage en cycle froid :

- Tout d'abord, le temps de chauffage peut représenter jusqu'à 90% de la durée totale d'un cycle. Le chauffage IR de la préforme affecte donc fortement la productivité du procédé.
- D'autre part, la consommation électrique des lampes IR représente jusqu'à 95% de la consommation électrique totale d'une souffleuse. Le rendement énergétique du four IR, défini comme étant le rapport entre l'énergie calorifique emmagasinée par la préforme et l'énergie électrique totale consommée par les lampes IR, est de l'ordre de 20% [MON-2001]. Autrement dit, une forte majorité du rayonnement IR émis par les lampes n'est pas absorbée par la préforme. L'énergie absorbée par les parois du four IR, ainsi que celle absorbée par l'air pulsé par le système de ventilation, représentent une part importante des pertes énergétiques.
- Enfin, le conditionnement thermique de la préforme joue un rôle essentiel sur les propriétés finales de la bouteille. En effet, la distribution de température de la préforme affecte fortement la distribution d'épaisseur de la bouteille. Elle affecte aussi l'orientation moléculaire et la cristallisation induite au cours de la déformation, qui a leur tour, affectent les propriétés mécaniques, optiques, et barrières de la bouteille [KIM-1985], [VEN-1998].

1.2.2 Objectifs de la thèse et démarche adoptée

L'objectif de cette thèse est le développement d'une méthode d'optimisation numérique permettant de *calculer automatiquement* les paramètres de réglage du four IR. L'enjeu est de réduire le temps nécessaire au réglage du four, tout en garantissant un chauffage adéquat. Deux problématiques découlent de cet objectif :

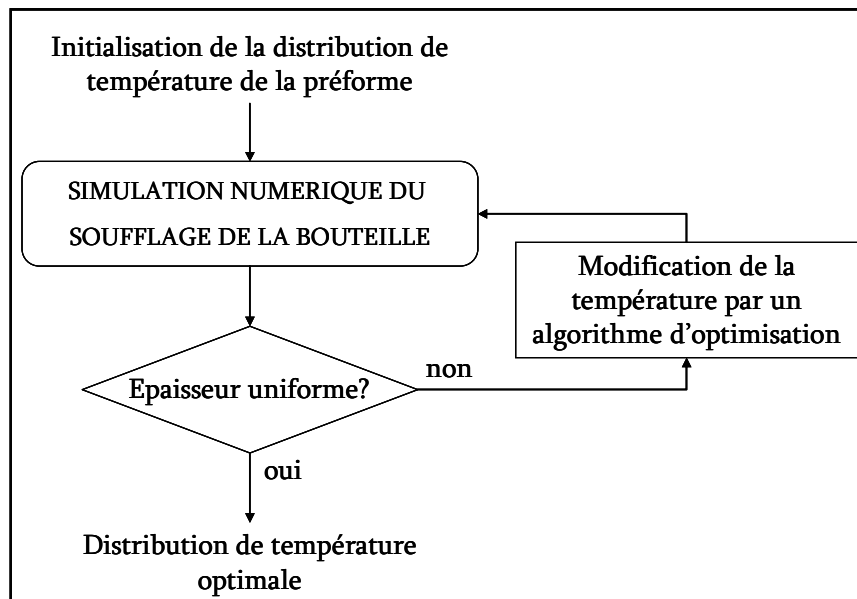
- *Quelle doit être la distribution de température dans la préforme à l'issue du chauffage IR ?*
- *Comment régler le four IR afin que la préforme présente cette distribution de température ?*

Pour répondre à ces problématiques, nous avons développé une procédure d'optimisation décomposée en deux étapes. Le principe général de cette méthode est illustré par la FIG. 1.7.

La première phase de l'optimisation repose sur le couplage entre un algorithme d'optimisation non-linéaire, avec des simulations du soufflage réalisées par éléments-finis avec le logiciel ABAQUS®. La procédure consiste à modifier itérativement la distribution de température de la préforme, jusqu'à l'obtention d'une bouteille dont l'épaisseur calculée est la plus uniforme

possible. La seconde phase repose sur le couplage entre un algorithme d'optimisation non-linéaire avec des simulations numériques du conditionnement thermique. La procédure consiste à modifier itérativement les paramètres de réglage du four IR, jusqu'à ce que la préforme présente une distribution de température conforme à celle calculée par optimisation dans la première étape.

ETAPE 1: calcul de la distribution de température optimale



ETAPE 2: optimisation des paramètres de réglage pour le four IR

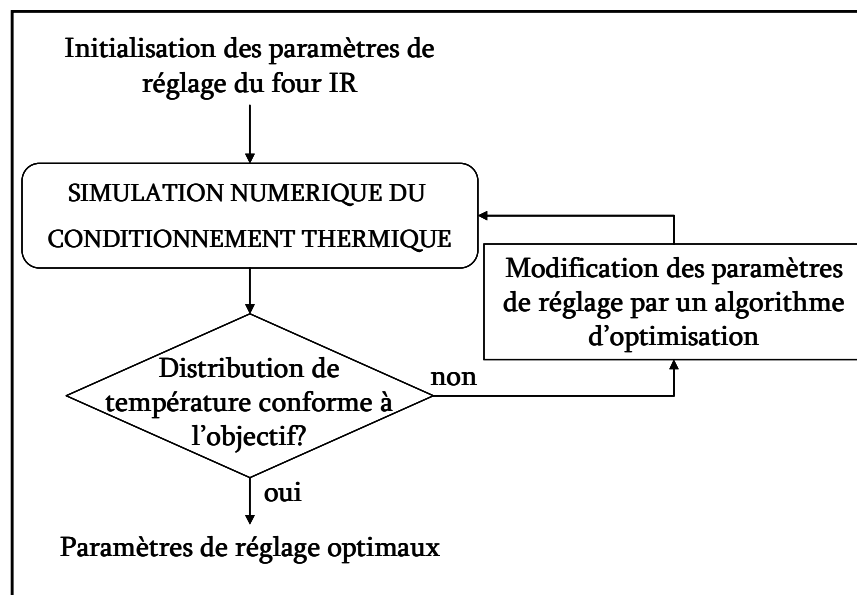


FIG. 1.7 - Illustration de la stratégie d'optimisation développée

L'objectif ultime de l'optimisation est de calculer les paramètres de réglage du four IR permettant d'obtenir une bouteille dont l'épaisseur est la plus uniforme possible. L'épaisseur de la bouteille est aussi fortement affectée par les paramètres de réglage relatifs à la phase de mise en forme, et plus particulièrement par le Retard au Pré-Soufflage (RPS) [SCH-1995], [GOR-2001a]. Afin de découpler l'effet de la température de la préforme de celui du RPS, nous avons appliqué la méthode d'optimisation au soufflage d'une bouteille de faible contenance (50cl) ne nécessitant pas de canne d'étirage (par conséquent il n'existe pas de RPS).

Dans le chapitre suivant, nous présentons le modèle numérique mis en œuvre pour simuler l'étape de conditionnement thermique.

Chapitre 2

Simulation numérique du chauffage infrarouge

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, le conditionnement thermique des préformes est la première étape dans la fabrication de bouteilles par injection-soufflage en cycle froid. Nous avons auparavant évoqué la relation étroite entre les propriétés finales de la bouteille, et la distribution de température de la préforme à l'issue du chauffage IR. Par conséquent, prédire avec fiabilité cette distribution de température est d'un intérêt majeur. Dans ce chapitre, nous présentons le modèle numérique mis en œuvre pour simuler l'étape de chauffage IR. L'enjeu principal de cette étude est de mettre en évidence la fiabilité du modèle, en vue d'intégrer celui-ci dans une boucle d'optimisation.

Nous proposons dans un premier temps une revue bibliographique des grandeurs et lois fondamentales régissant les transferts thermiques mis en jeu durant l'étape de chauffage IR. L'accent est mis sur la problématique principale de la modélisation, à savoir le calcul du "terme source radiatif". Nous exposons les hypothèses simplificatrices adoptées dans notre modèle, et discutons leur validité dans le cadre de l'injection-soufflage. Enfin nous présentons le logiciel utilisé pour simuler l'étape de chauffage infrarouge.

Le second volet de ce chapitre est consacré à la mesure des propriétés thermiques et radiatives du PET de l'étude, propriétés requises pour la simulation numérique du chauffage. Enfin, les résultats numériques sont validés par comparaison avec des mesures de température réalisées par thermographie infrarouge sur un pilote de laboratoire.

Table des matières

2.1	Modélisation des transferts thermiques	21
2.1.1	Nature des transferts thermiques dans le cadre de l'injection-soufflage.....	21
2.1.2	Equation de la chaleur et terme source radiatif.....	23
2.1.3	Grandeurs et lois du rayonnement thermique	24
a)	Luminance spectrale.....	24
b)	Luminance du corps noir	25
c)	Emissivité.....	26
d)	Corps gris et source Lambertienne.....	27
e)	Propriétés radiatives d'un Milieu Semi-Transparent (MST).....	28
2.1.4	Equation du Transfert Radiatif (ETR)	31
2.1.5	Application à l'injection-soufflage : loi de Beer-Lambert	32
a)	Hypothèse du milieu non-diffusant.....	32
b)	Hypothèse du milieu froid	33
c)	Loi de Beer-Lambert	34
2.2	Caractérisation du matériau de l'étude	35
2.2.1	Mesure des propriétés radiatives du PET T74F9	35
a)	Préparation des échantillons et dispositif expérimental.....	35
b)	Mesure de la réflectivité spectrale spéculaire.....	36
c)	Calcul du coefficient d'absorption.....	36
d)	Calcul de l'émissivité	39
2.2.2	Propriétés thermiques du PET T74F9.....	41
a)	Conductivité thermique	41
b)	Capacité calorifique massique	41
2.3	Simulation numérique du chauffage IR.....	43
2.3.1	Etat de l'art	43
2.3.2	Le logiciel PLASTIRAD.....	45
a)	Méthode des volumes finis et maillage	45
b)	Conditions aux limites – pertes convectives et radiatives.....	46
c)	Calcul des flux radiatifs incidents.....	48
d)	Calcul du terme source radiatif	49
2.3.3	Application : simulation du chauffage IR d'une préforme 18g	49
a)	Configuration et dispositif expérimental.....	49
b)	Conception du maillage pour la simulation.....	51
c)	Résultats et discussion.....	52
2.4	Conclusion partielle.....	55

2.1 Modélisation des transferts thermiques

2.1.1 Nature des transferts thermiques dans le cadre de l'injection-soufflage

Le conditionnement thermique d'une préforme en PET met en jeu des transferts thermiques de différentes natures. Les *transferts radiatifs* jouent bien entendu un rôle prédominant durant la phase de chauffage infrarouge. Les *transferts convectifs*, qui résultent de la différence de température entre la préforme et l'air ambiant, jouent quant à eux un rôle majeur notamment durant la phase de refroidissement. Enfin, les gradients thermiques générés par les deux premiers types de transferts sont à l'origine des *transferts conductifs* au sein de la préforme. Au cours du conditionnement thermique, ces trois types d'échange de chaleur sont couplés, et fortement transitoires.

Les transferts radiatifs

Lorsque la préforme pénètre dans le four IR, elle est brutalement soumise à de fortes densités de flux radiatif. Une fraction du rayonnement incident est *réfléchi*e par la surface de la préforme, tandis que l'autre fraction se propage à travers son épaisseur. Au cours de sa propagation, le flux radiatif est progressivement *absorbé* provoquant ainsi l'échauffement du PET. La part non-absorbée du flux radiatif est *transmise* à l'intérieur de la cavité délimitée par la paroi interne de la préforme.

D'autre part, la préforme émet elle aussi un rayonnement thermique. Ce phénomène est appelé *émission propre*. Une fraction du flux radiatif émis est rayonnée vers le milieu environnant (air ambiant, parois du four, etc...) à travers la paroi externe de la préforme. Une autre fraction est émise dans la cavité délimitée par les parois internes de la préforme. Enfin, la dernière fraction est réabsorbée par le PET (sans réflexion intermédiaire). Ce phénomène est caractéristique d'un *milieu semi-transparent* pour lequel les mécanismes d'émission et d'absorption ne sont pas surfaciques, mais volumiques*. La FIG. 2.1 illustre schématiquement ces différents transferts radiatifs.

Les principales difficultés liées à la modélisation des transferts radiatifs résident d'une part dans la prise en compte de la dépendance spectrale et directionnelle du rayonnement, et d'autre part dans la description des phénomènes d'émission et absorption. Ceci ne peut être réalisé sans une connaissance précise des propriétés radiatives des matériaux mis en jeu (lampes IR, PET).

* Cependant, dans le cas du PET, le phénomène d'émission peut être considéré comme étant surfacique sur certaines plages de longueur d'onde. Ce point sera discuté ultérieurement.

Les transferts convectifs

L'écart de température entre la préforme et l'air ambiant est à l'origine des transferts convectifs. Ces transferts de chaleur ont lieu au voisinage de la paroi de la préforme, dans une zone restreinte appelée couche limite. L'air en mouvement transporte de la chaleur par advection. Le mouvement de l'air peut être généré par le gradient de température dans la couche limite (*convection naturelle*) ou avec l'aide d'un travail extérieur comme celui fourni par un système de ventilation (*convection forcée*).

En théorie, la résolution du problème convectif complet consiste à déterminer les champs de vitesse et de température de l'air dans la couche limite. Cependant, dans le cadre de notre étude, nous cherchons uniquement à estimer le flux de chaleur perdu par la surface de la préforme. Dans ce contexte, la principale problématique est l'estimation des coefficients d'échange entre l'air ambiant et la paroi de la préforme. Ce type de transfert de chaleur peut alors être considéré comme étant surfacique.

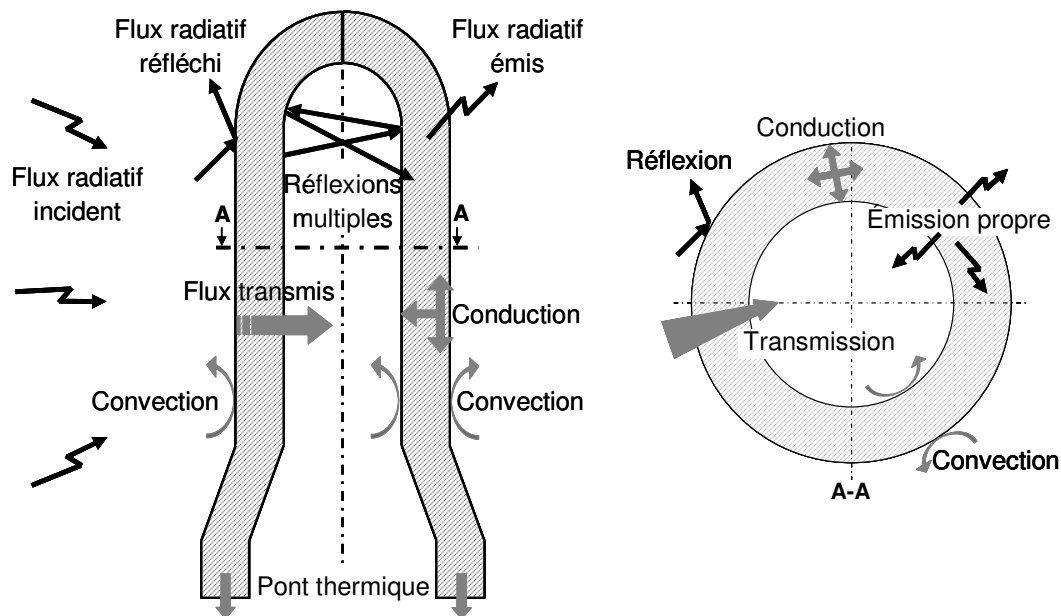


FIG. 2.1 - Nature des transferts thermiques

Les transferts conductifs

Les deux types de transferts thermiques présentés ci-dessus génèrent des gradients de température au sein de la préforme. Ces gradients sont à l'origine des transferts conductifs. Dans le cas le plus général, la diffusion de la chaleur est tridimensionnelle. En effet, la préforme n'est a priori pas éclairée de manière uniforme suivant sa hauteur, ce qui procure une composante longitudinale au flux conductif. D'autre part, la rotation de la préforme induit qu'à un instant donné la préforme n'est pas éclairée de manière uniforme selon l'angle d'observation (composante azimutale du flux conductif).

Enfin précisons que le pont thermique existant entre le pas de vis de la préforme et le système de fixation est à l'origine de pertes thermiques par conduction. Ces pertes sont particulièrement importantes lorsque le système de fixation est régulé en température. Le but d'une telle régulation est de maintenir le pas de vis de la préforme à une température inférieure à la température de transition vitreuse du PET, limitant ainsi ses déformations au cours de la mise en forme.

A travers cette vue d'ensemble, nous avons dégagé les principales problématiques associées à la modélisation de chacun des types de transferts thermiques. Nous abordons à présent les aspects mathématiques liés à la modélisation de ces transferts de chaleur. Rappelons que l'objectif principale de cette modélisation est de prédire la distribution de température de la préforme suite à son conditionnement thermique.

2.1.2 Equation de la chaleur et terme source radiatif

L'évolution de la température en un point de la préforme est régie par l'équation de la chaleur. Cette équation traduit la conservation de l'énergie interne d'un système [OZI-1993] :

$$\rho c_p \frac{dT}{dt} = -\nabla \cdot (\vec{q}_c + \vec{q}_r) = \nabla \cdot (k \nabla T - \vec{q}_r) \quad (2.1)$$

où T est la température, ρ , c_p , et k sont respectivement la masse volumique, la capacité calorifique massique et la conductivité thermique du PET. La densité de flux radiatif est notée \vec{q}_r . Enfin, la densité de flux conductif \vec{q}_c est reliée au gradient de température selon la loi de Fourier.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, les transferts convectifs sont surfaciques. Ils n'interviennent donc pas explicitement dans l'équation de la chaleur. En revanche, ils peuvent être pris en compte à travers une condition aux limites de type Fourier :

$$-k \nabla T \cdot n = h_c (T_p - T_\infty) \quad (2.2)$$

Cette équation traduit le fait que le flux de chaleur à la surface de la préforme est proportionnel à la différence de température entre la paroi de la préforme (T_p), et l'air ambiant (T_∞), selon la loi de Newton. Le vecteur n représente la normale extérieure à la paroi considérée, et h_c le coefficient d'échange convectif moyen.

La divergence du flux radiatif $\nabla \cdot (\vec{q}_r)$ présentée dans l'équation (2.1) représente l'énergie radiative absorbée par unité de volume au niveau du point matériel considéré. Ce terme est plus

communément appelé *terme source radiatif*. Tout l'enjeu de la modélisation des transferts radiatifs réside dans l'estimation de ce terme source.

2.1.3 Grandeurs et lois du rayonnement thermique

a) Luminance spectrale

Le terme source radiatif peut être relié à une grandeur fondamentale du transfert radiatif : la luminance. La luminance apporte deux informations supplémentaires par rapport au flux radiatifs : la dépendance spectrale et la dépendance directionnelle du rayonnement.

Par définition, la luminance spectrale $L_\lambda(s, \vec{\Omega})$ au point s est la fraction du flux d'énergie radiative ϕ_λ transportée à travers une surface élémentaire dS dans un angle solide unitaire $d\Omega$ centré sur la direction $\vec{\Omega}$, par les photons de longueurs d'ondes comprises entre λ et $\lambda+d\lambda$:

$$L_\lambda(s, \vec{\Omega}) = \frac{d\phi_\lambda}{dS \cos \theta d\Omega d\lambda} \quad (2.3)$$

La FIG. 2.2 illustre les notations adoptées.

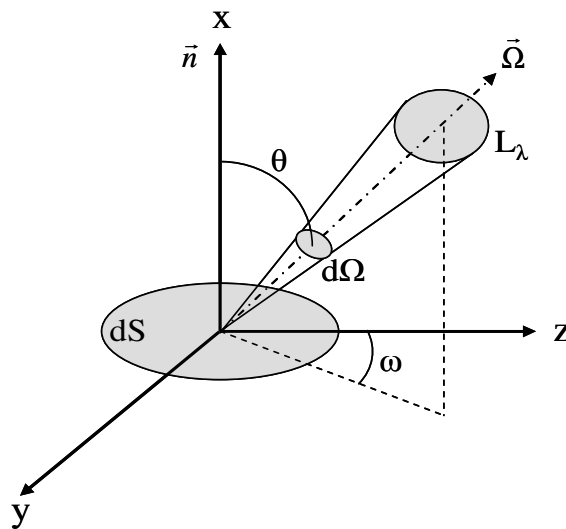


FIG. 2.2 - Définition de la luminance spectrale

La luminance est une fonction de six variables : les trois coordonnées de position du point s , les deux coordonnées angulaires (la direction $\vec{\Omega}$ étant repérée par l'angle polaire θ et l'azimut ω), et enfin la longueur d'onde. Elle s'exprime en $W.m^{-2}.sr^{-1}.\mu m^{-1}$.

Le vecteur densité de flux radiatif (nécessaire au calcul du terme source) est obtenu par intégration de la luminance sur tout le spectre ainsi que sur l'ensemble des directions au travers d'une sphère unitaire S^2 :

$$\bar{q}_r = \int_0^{\infty} \int_{S^2} \bar{\Omega} L_{\lambda}(s, \bar{\Omega}) d\Omega d\lambda \quad (2.4)$$

b) Luminance du corps noir

Chaque corps rayonne selon une loi qui lui est propre. Il existe cependant une source dont la luminance spectrale est une fonction universelle de la longueur d'onde et de la température. Ce système physique, appelé *corps noir*, est par définition un corps qui absorbe tout le rayonnement qu'il reçoit (pas de réflexion ni de transmission) et émet un rayonnement dont la luminance est donnée par la loi de Planck [DEV-1984] :

$$L_{\lambda}^{\circ} = \frac{c_1}{\lambda^5} \left[\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (2.5)$$

où T désigne la température du corps en Kelvin, et c_1 et c_2 sont deux constantes définies par : $c_1 \approx 1,19 \cdot 10^8 \text{ W.m}^{-2}.\mu\text{m}^4$ et $c_2 \approx 14388 \mu\text{m.K}$.

Par ailleurs le rayonnement émis par un corps noir est isotrope, c'est-à-dire qu'il est le même quelle que soit la direction d'émission considérée. La luminance totale du corps noir s'obtient en intégrant la luminance monochromatique sur tout le spectre des longueurs d'ondes. On obtient alors la loi de Stefan-Boltzmann :

$$L^{\circ}(T) = \int_0^{\infty} L_{\lambda}^{\circ}(T) d\lambda = \frac{\sigma_{SB} \cdot T^4}{\pi} \quad (2.6)$$

où σ_{SB} est la constante de Stefan-Boltzmann : $\sigma_{SB} = 5,6698 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$.

Cette loi met en évidence que la luminance du corps noir dépend de la température à la puissance quatre. Autrement dit l'énergie rayonnée par un corps croît très rapidement avec sa température.

Une autre caractéristique importante de l'émission du corps noir est illustrée par la FIG. 2.3, qui représente l'évolution de la luminance du corps noir en fonction de la longueur d'onde, pour trois valeurs différentes de température : $T = 400 \text{ K}$, 900 K , et 2400 K . Nous avons choisi ces valeurs car elles représentent respectivement la température de la préforme en fin de chauffage, la température d'une lampe céramique, et enfin de la température d'une lampe halogène.

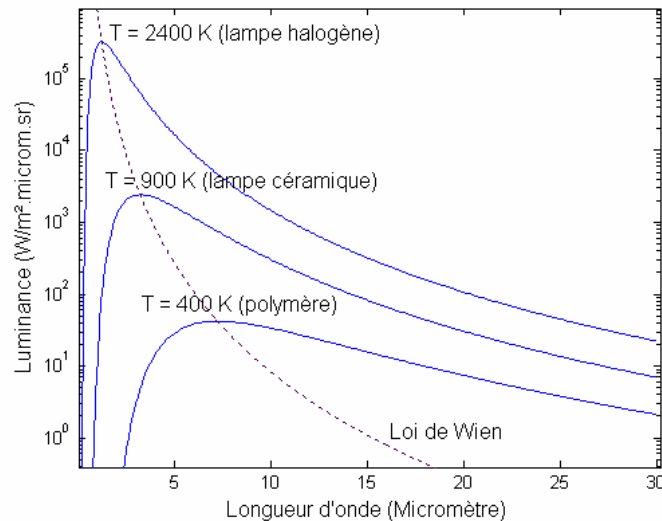


FIG. 2.3 - Luminance du corps noir – Loi de Wien

Cette figure révèle que les maxima des courbes de luminance sont d'autant plus rapprochés des courtes longueurs d'ondes que la température est élevée. Ce phénomène a été observé et traduit mathématiquement par Wien, sous la forme de la *loi de déplacement de Wien* :

$$\lambda_m \cdot T = 2898 \mu\text{m} \cdot \text{K} \quad (2.7)$$

où λ_m représente la longueur d'onde correspondant au maximum d'émission. Comme nous le verrons ultérieurement, ce phénomène joue un rôle important lors du chauffage IR. A titre d'exemple, une lampe halogène dont la température du filament de tungstène avoisine typiquement les 2400 K émet le maximum d'énergie à 1.2 μm , c'est à dire dans le proche IR.

c) Emissivité

Le corps noir joue le rôle de référence pour définir l'émission d'un corps quelconque. Ainsi, la luminance d'un corps quelconque est généralement comparée à celle du corps noir par l'intermédiaire d'une grandeur appelée *émissivité*.

L'émissivité directionnelle spectrale $\varepsilon_\lambda(\vec{\Omega}, T)$ d'un corps est définie comme étant le rapport de sa luminance directionnelle spectrale $L_\lambda(\vec{\Omega}, T)$ sur la luminance spectrale du corps noir $L_\lambda^\circ(T)$ à la même température T :

$$\varepsilon_\lambda(\vec{\Omega}, T) = \frac{L_\lambda(\vec{\Omega}, T)}{L_\lambda^\circ(T)} \quad (2.8)$$

Par conséquent l'émissivité du corps noir est égale à un, quelle que soit la longueur d'onde.

Par ailleurs, l'émissivité directionnelle totale est obtenue par intégration de l'émissivité directionnelle spectrale sur tout le spectre :

$$\varepsilon(\bar{\Omega}, T) = \frac{\int_0^{\infty} \varepsilon_{\lambda}(\bar{\Omega}, T) L_{\lambda}^{\circ}(T) d\lambda}{\int_0^{\infty} L_{\lambda}^{\circ}(T) d\lambda} \quad (2.9)$$

Enfin, l'émissivité hémisphérique totale, aussi appelée émissivité moyenne de Planck, est obtenue par intégration de l'émissivité directionnelle totale sur un hémisphère Ω (l'angle θ est définie FIG. 2.2) :

$$\varepsilon(T) = \int_{\Omega=2\pi} \varepsilon(\bar{\Omega}, T) \cos \theta d\Omega \quad (2.10)$$

Dans le cas le plus général, l'émissivité d'un corps est donc une fonction de quatre variables : la température, les coordonnées angulaires définissant l'angle d'émission, et la longueur d'onde. Certaines simplifications peuvent cependant être apportées dans le cas des corps gris, ou Lambertien.

d) Corps gris et source Lambertienne

Un corps est dit gris si ses propriétés radiatives, et notamment son émissivité, ne dépendent pas de la longueur d'onde. Une source de rayonnement est dite Lambertienne si sa luminance est isotrope, autrement dit si elle émet de manière diffuse. La luminance d'un corps gris à émission diffuse est illustrée par la FIG. 2.4.

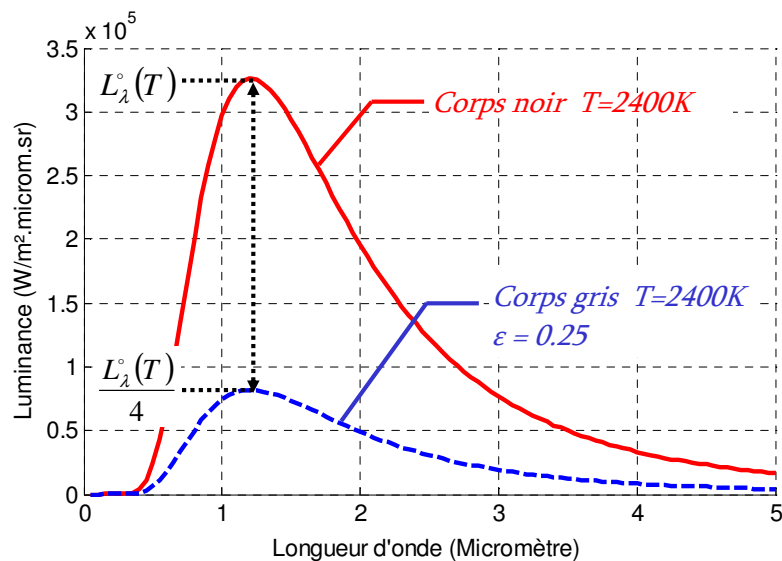


FIG. 2.4 - Luminance d'un corps gris

e) Propriétés radiatives d'un Milieu Semi-Transparent (MST)

Un milieu est désigné comme semi-transparent dans une bande de longueurs d'ondes donnée lorsqu'il transmet partiellement ces ondes. Dans ces conditions, il réfléchit et absorbe aussi partiellement (il n'est ni transparent ni opaque).

Considérons la surface d'un corps semi-transparent éclairé par un flux incident ϕ_i . Le flux incident se décompose en un flux réfléchi ϕ_r , un flux absorbé ϕ_a , et un flux transmis ϕ_t , tel que l'illustre la FIG. 2.5.

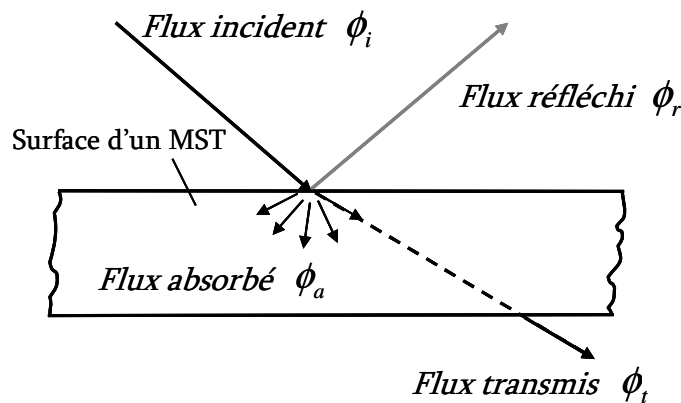


FIG. 2.5 - Propriétés radiative d'une surface

Les fractions réfléchie, absorbée, et transmise sont respectivement appelées *réflectivité*, *absorptivité*, et *transmittivité*. Dans le cas d'un corps Lambertien, elles sont définies par :

$$\rho_\lambda = \frac{\phi_{r\lambda}}{\phi_{i\lambda}} \quad ; \quad \alpha_\lambda = \frac{\phi_{a\lambda}}{\phi_{i\lambda}} \quad ; \quad \tau_\lambda = \frac{\phi_{t\lambda}}{\phi_{i\lambda}} \quad (2.11)$$

où ρ_λ , α_λ , et τ_λ désignent respectivement la réflectivité, l'absorptivité et la transmittivité spectrale. A l'image de l'émissivité, ces propriétés radiatives peuvent être directionnelles ou hémisphériques, spectrales ou totales.

Précisons que la réflexion d'une surface peut être diffuse, spéculaire, ou quelconque, comme l'illustre la FIG. 2.6. Dans le cas d'une réflexion diffuse, le rayonnement réfléchi est isotrope. Il ne dépend pas de l'angle d'incidence et demeure le même quelle que soit la direction. La réflexion spéculaire est, quant à elle, caractérisée par un angle de réflexion identique à l'angle d'incidence, dans le plan de la normale à la surface. Enfin, dans le cas le plus général, le rayonnement réfléchi dépend à la fois de l'angle d'incidence et de l'angle de réflexion. Ces différents types de réflexions sont fortement dépendants de l'état de surface du matériau considéré.

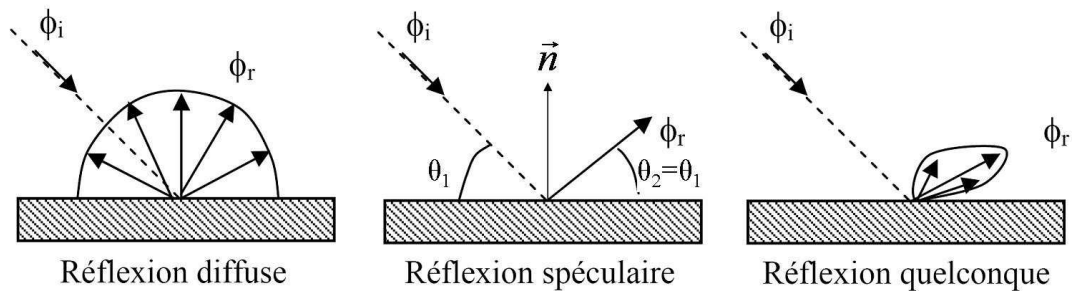


FIG. 2.6 - Différents types de réflexion d'une surface – Figure extraite de [AND-2005]

Lois de Kirchhoff

La 1^{ère} loi de Kirchhoff traduit la conservation du flux radiatif incident [DEV-1984] :

$$\phi_{i\lambda} = \rho_{\lambda}\phi_{i\lambda} + \alpha_{\lambda}\phi_{i\lambda} + \tau_{\lambda}\phi_{i\lambda} \quad \Leftrightarrow \quad 1 = \rho_{\lambda} + \alpha_{\lambda} + \tau_{\lambda} \quad (2.12)$$

Pour un corps noir, la réflectivité et la transmittivité sont nulles. Par conséquent, son absorptivité est égale à un. Par ailleurs l'émissivité d'un corps noir est elle aussi égale à un, ce qui implique :

$$\alpha(T) = \varepsilon(T) = 1 \quad (2.13)$$

Pour cette raison, le corps noir est généralement qualifié d'absorbeur et d'émetteur parfait. L'égalité entre l'absorptivité et l'émissivité est en réalité généralisable à tout corps à l'équilibre thermodynamique :

$$\alpha_{\lambda}(\vec{\Omega}, T) = \varepsilon_{\lambda}(\vec{\Omega}, T) \quad (2.14)$$

Cette relation, plus connue sous le nom de seconde loi de Kirchhoff, traduit l'égalité entre l'énergie radiative absorbée et l'énergie radiative émise par un système à l'équilibre thermique dont la température est uniforme.

Transmittivité et extinction du rayonnement

Une fois le flux radiatif transmis à travers la surface d'un MST, l'atténuation du rayonnement est le fruit de deux processus : l'absorption et la diffusion*. Dans le premier cas, une partie de l'énergie est transformée en chaleur tandis que dans le second, l'énergie est redistribuée dans l'espace par des centres diffusants. Si ce phénomène est négligeable devant l'absorption du rayonnement, le milieu est dit *non-diffusant*.

* En dépit de leur dénomination identique, la diffusion du rayonnement (*scattering* en anglais) et la diffusion de la chaleur (*diffusion* en anglais) sont deux phénomènes bien distincts.

L'atténuation du rayonnement dans une direction donnée peut être exprimée par la relation suivante [MOD-1993] :

$$dL_\lambda(s + ds, \vec{\Omega}) = -\beta_\lambda(\vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(s, \vec{\Omega}) \cdot ds \quad (2.15)$$

où $dL_\lambda(s + ds, \vec{\Omega})$ représente l'atténuation de la luminance spectrale au point s après avoir parcouru un trajet ds dans la direction $\vec{\Omega}$. Le *coefficient d'extinction* directionnel spectral $\beta_\lambda(\vec{\Omega})$, exprimé en m^{-1} , englobe à la fois l'atténuation du rayonnement par absorption et par diffusion. Il se décompose de la manière suivante (dans le cas d'un milieu isotrope) :

$$\beta_\lambda = \kappa_\lambda + \sigma_\lambda \quad [m^{-1}] \quad (2.16)$$

où κ_λ et σ_λ représentent respectivement le *coefficient d'absorption* et le *coefficient de diffusion*. La FIG. 2.7 illustre les notations adoptées.

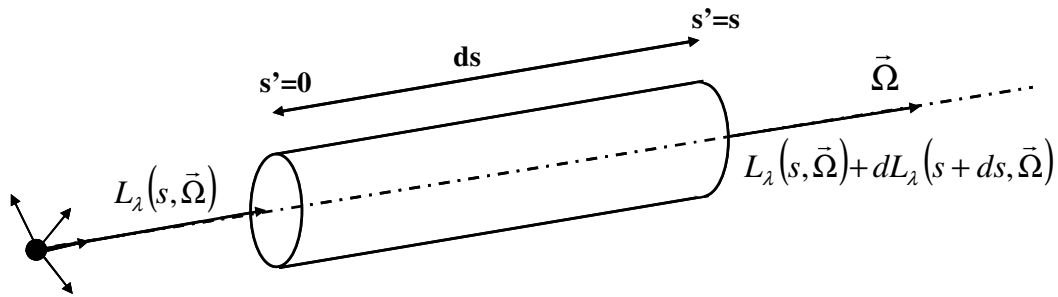


FIG. 2.7 - Variation de la luminance à travers un élément de volume

Dans le cas où ces deux coefficients sont constants suivant un trajet optique ds , l'équation (2.15) peut être intégrée pour obtenir la relation suivante :

$$L_\lambda(s, \vec{\Omega}) = L_\lambda(0, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\beta_\lambda s} \quad (2.17)$$

Cette relation, appelée *loi de Beer*, révèle que les processus d'absorption et de diffusion atténuent la luminance de manière exponentielle. La transmittivité de la couche traversée est alors donnée par :

$$\tau_\lambda(\vec{\Omega}) = \frac{L_\lambda(s, \vec{\Omega})}{L_\lambda(0, \vec{\Omega})} = e^{-\beta_\lambda s} \quad (2.18)$$

La profondeur de pénétration du rayonnement dans le milieu peut être évaluée grâce à un paramètre appelé *libre parcours de photon* l_λ . Ce paramètre est l'inverse du coefficient d'extinction, et s'exprime en mètre :

$$l_\lambda = \frac{1}{\beta_\lambda} \quad (2.19)$$

D'après les équations (2.12) et (2.18), le libre parcours de photon l_λ correspond à une atténuation de 63% de la luminance incidente :

$$\alpha_\lambda = 1 - \tau_\lambda = 1 - e^{-\beta_\lambda \cdot l_\lambda} = 1 - e^{-1} = 0.63 \quad (2.20)$$

Lorsque le libre parcours moyen de photon est très faible devant l'épaisseur du milieu, ce dernier est considéré comme étant optiquement épais. Si au contraire l'épaisseur du milieu est très faible devant le libre parcours moyen de photon, le milieu est dit optiquement mince.

Les propriétés radiatives présentées ci-dessus permettent de décrire l'atténuation du rayonnement dans un MST. Les variations de la luminance dans le milieu sont cependant affectées par un autre phénomène : l'émission propre. La prise en compte de ce phénomène conduit à un bilan plus complexe des transferts radiatifs, sous la forme d'une équation appelée *Equation du Transfert Radiatif* (ETR).

2.1.4 Equation du Transfert Radiatif (ETR)

Comme nous l'avons évoqué précédemment, la distribution de la luminance au sein d'un MST est affectée par les mécanismes d'émission, d'absorption, et de diffusion. En réalisant un bilan de ces différents processus sur un élément de volume d'un MST, on obtient l'équation régissant la conservation de l'énergie radiative dans le milieu : l'*Equation du Transfert Radiatif* (ETR). L'établissement de cette équation est présenté en Annexe A.

$$\begin{aligned} \frac{dL_\lambda(s, \vec{\Omega})}{ds} = & \underbrace{-\beta_\lambda \cdot L_\lambda(s, \vec{\Omega})}_1 + \underbrace{\kappa_\lambda \cdot L_\lambda^\circ(T(s))}_2 \\ & + \underbrace{\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega=4\pi} \beta_\lambda \cdot P_\lambda(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(s, \vec{\Omega}') d\Omega'}_3 \end{aligned} \quad (2.21)$$

où la fonction de phase $P_\lambda(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ représente la probabilité pour qu'un faisceau incident dans l'angle solide élémentaire $d\Omega'$ centré sur la direction $\vec{\Omega}'$ soit diffusé dans l'angle solide $d\Omega$ centré sur la direction $\vec{\Omega}$. La FIG. 2.7 illustre les notations adoptées.

Cette équation exprime la variation de la luminance le long d'un trajet optique de longueur ds dans la direction $\vec{\Omega}$, comme étant la somme de trois termes. Le premier terme traduit

l'atténuation du rayonnement par absorption et diffusion. Le second traduit le gain par émission propre. Enfin le troisième terme traduit le gain par diffusion. Il représente la fraction du rayonnement diffusée dans la direction $\vec{\Omega}$ en provenance de tout l'espace.

2.1.5 Application à l'injection-soufflage : loi de Beer-Lambert

L'ETR, sous sa forme la plus générale, est une équation intégral-différentielle de transport. Sa résolution requiert la connaissance de la distribution de la température, qui elle-même, requiert la connaissance de la distribution de la luminance. En d'autres termes, l'ETR et l'équation de la chaleur forment un système couplé dont la résolution demeure très délicate.

Cependant, dans le cadre du chauffage IR d'une préforme en PET, certaines hypothèses simplificatrices peuvent être adoptées.

a) Hypothèse du milieu non-diffusant

Avant l'étape de chauffage, les préformes en PET présentent généralement moins de 5% de cristallinité [MON-2001], [GOR-2001], [MAR-2003]. Dans cet état quasi-amorphe, le PET ne diffuse a priori pas le rayonnement IR. Ceci peut se justifier par la taille caractéristique de la maille cristalline du PET (de l'ordre de l'Å), très petite par rapport à la longueur d'onde des lampes IR (de l'ordre du µm).

En revanche, la cristallisation thermique du PET provoque l'apparition de structures cristallines de type sphérolitique suffisamment volumineuses pour provoquer la diffusion du rayonnement [LEB-2001], [DEN-1995] puisque celles-ci ont un diamètre variant de 1 à 100 µm [MAR-2003]. Cependant la cristallisation thermique du PET est un phénomène relativement lent et les vitesses de chauffage caractéristiques des préformes en PET sont suffisamment élevées pour limiter l'apparition de ce type de cristallisation (ceci constitue un avantage majeur du chauffage infrarouge par rapport au chauffage convectif). Ces structures cristallines ont en effet tendance à opacifier le matériau et à le rigidifier affectant ainsi l'étape de mise en forme. Autrement dit, il est acceptable de supposer que la cristallisation thermique n'affecte pas significativement le chauffage IR, et que le milieu peut être considéré comme non-diffusant. Il serait toutefois important de quantifier l'erreur commise en adoptant cette hypothèse. Nous reviendrons sur ce point dans la conclusion du chapitre.

Dans ces conditions l'ETR se réduit à l'équation suivante :

$$\frac{dL_\lambda(s, \vec{\Omega})}{ds} = \kappa_\lambda \left[L_\lambda^\circ(T(s)) - L_\lambda(s, \vec{\Omega}) \right] \quad (2.22)$$

Cette équation possède une solution formelle, qui s'exprime sous sa forme intégrale par [VIS-1975] :

$$L_\lambda(s, \vec{\Omega}) = \underbrace{L_\lambda(0, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\kappa_\lambda s}}_1 + \underbrace{\int_{s'=0}^{s'=s} \kappa_\lambda L_\lambda^\circ(T(s')) \cdot e^{\kappa_\lambda(s'-s)} ds'}_2 \quad (2.23)$$

où le premier terme du membre de droite représente la transmission du rayonnement incident (provenant en grande majorité des lampes IR), et le second terme l'absorption du rayonnement émis par la préforme (le rayonnement émis et ré-absorbé par le PET).

b) Hypothèse du milieu froid

Dans le cadre de l'injection-soufflage la température des émetteurs infrarouges est beaucoup plus élevée que celle de la préforme, y compris à l'issue de la phase de chauffage. Typiquement, le filament d'une lampe émettant dans l'infrarouge court verra sa température atteindre 2450 K, pour une longueur d'onde comprise entre 0.6 et 10 μm . La préforme quant à elle, verra sa température croître de 300 K à 400 K au maximum. Dans ces conditions la luminance du PET, induite par sa température, est négligeable devant la luminance du milieu extérieur. Le milieu est dit froid. Le critère utilisé pour déterminer si le milieu peut être considéré comme étant froid est le rapport entre la luminance totale de la source sur la luminance totale du corps noir à la température du polymère :

$$R = \frac{\int_0^\infty \varepsilon_{\lambda,F} L_\lambda^\circ(T_F) d\lambda}{\int_0^\infty \varepsilon_{\lambda,PET} L_\lambda^\circ(T_{PET}) d\lambda} \approx \frac{\varepsilon_F T_F^4}{\varepsilon_{PET} T_{PET}^4} \quad (2.24)$$

où T_F et T_{PET} désignent respectivement la température du filament de tungstène et la température du PET. Nous avons réalisé ce calcul en adoptant les valeurs d'émissivité mesurées par [MON-2001], soit $\varepsilon_{PET} = 0.93$ et $\varepsilon_F = 0.26$. Dans ce cas, le rapport R vaut approximativement 400, autrement dit il est très supérieur à l'unité. Le terme d'émission propre de l'équation (2.23) devient négligeable devant le terme de transmission. L'équation (2.23) devient alors :

$$L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) = L_\lambda(\vec{0}, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\kappa_\lambda s} \quad (2.25)$$

On retrouve l'équation de Beer (équation (2.17)) pour un milieu non diffusant [MOD-1993]. Cette équation traduit le fait que la luminance en tout point du milieu est une fonction exponentielle décroissante de la luminance incidente. Ainsi, si le coefficient d'absorption κ_λ est considéré comme indépendant de la température, la distribution de la luminance est elle aussi indépendante de la température au sein de la préforme. Il est alors possible de résoudre l'équation de la chaleur sans résoudre l'ETR.

c) Loi de Beer-Lambert

En appliquant la définition du vecteur densité de flux radiatif (équation (2.4)), et en considérant une propagation unidirectionnelle du rayonnement incident dans la direction radiale de la préforme, l'équation (2.25) peut être reformulée ainsi :

$$q_{\lambda}(s) = q_{\lambda 0} e^{-\kappa_{\lambda} s} \quad (2.26)$$

Cette équation, plus connue sous le nom de *loi de Beer-Lambert*, traduit le fait que la densité de flux radiatif incidente $q_{\lambda 0}$ est absorbée selon une exponentielle décroissante, comme l'illustre la FIG. 2.8. Les marqueurs rectangulaires indiquent la profondeur de pénétration du rayonnement définie par l'équation (2.19).

La valeur du coefficient d'absorption conditionne la répartition de l'absorption du rayonnement dans l'épaisseur du matériau. Une valeur élevée du coefficient d'absorption correspond à un rayonnement peu pénétrant et par conséquent induit une élévation de température beaucoup plus rapide à la surface de la préforme que dans son épaisseur. A l'extrême, une valeur infinie du coefficient d'absorption correspond à un matériau opaque pour lequel l'absorption du rayonnement s'effectue dans une couche superficielle mince. Par opposition, une valeur faible du coefficient d'absorption correspond à un rayonnement plus pénétrant.

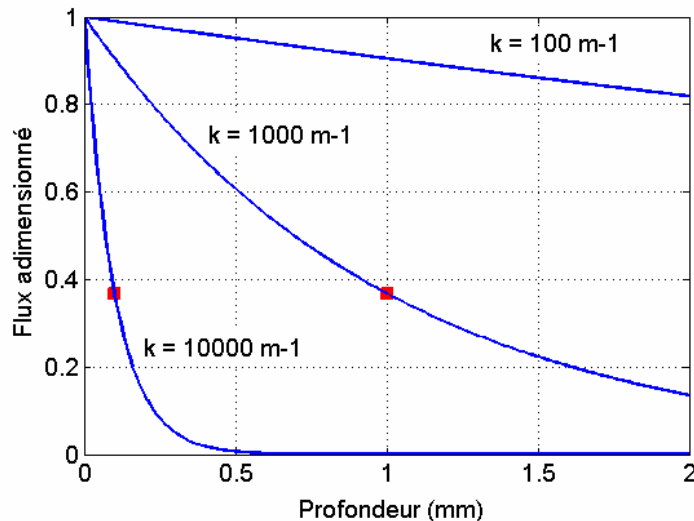


FIG. 2.8 - Illustration de la Loi de Beer-Lambert

Le coefficient d'absorption joue un rôle majeur sur les gradients thermiques générés dans l'épaisseur de la préforme. C'est pourquoi la mesure de ce coefficient est un point crucial en vue de réaliser des simulations fiables du chauffage infrarouge.

Dans la partie suivante nous nous intéressons à la caractérisation du matériau de l'étude. Nous portons notre intérêt spécifiquement sur les propriétés thermiques et radiatives nécessaires aux simulations numériques du chauffage IR.

2.2 Caractérisation du matériau de l'étude

Le PET utilisé dans cette étude est le T74F9, synthétisé par la société Tergal Fibres, Compagnie Européenne de Plasturgie. Ce grade de PET fut utilisé par différents auteurs lors de travaux antérieurs [GOR-2001], [DEL-2006]. Un certain nombre de propriétés mécaniques et rhéologiques sont reportés dans ces travaux. Dans cette partie nous nous intéressons spécifiquement aux propriétés radiatives et thermiques.

2.2.1 Mesure des propriétés radiatives du PET T74F9

a) Préparation des échantillons et dispositif expérimental

Les mesures sont réalisées à température ambiante à l'aide d'un spectromètre infrarouge à transformé de Fourier « Spectrum 2000-Perkin Elmer » fonctionnant dans la gamme 2.5-25 μm . Le fonctionnement général de ce spectromètre, décrit par [AND-2005], est illustré par la FIG. 2.9.

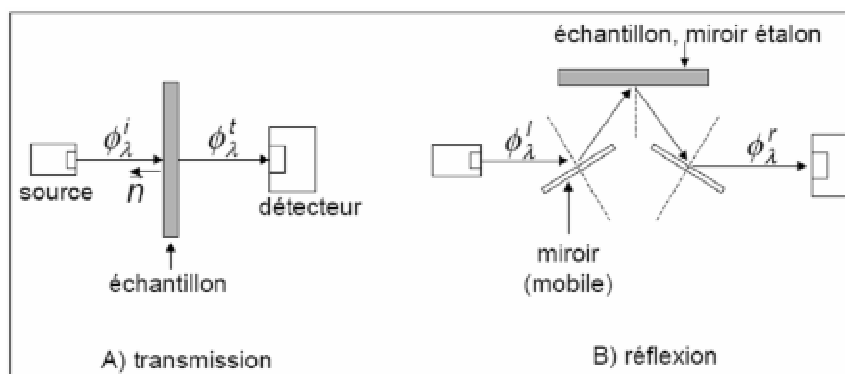


FIG. 2.9 - Illustration des mesures spectrométriques [MON-2001]

Deux types d'échantillons sont nécessaires à la mesure des propriétés radiatives :

- Des échantillons fins destinés aux mesures en mode transmission. Ils sont obtenus à partir de préformes injectées par la société Logoplaste, partenaire du CROMeP dans le cadre du projet APT_PACK. Les préformes sont tout d'abord prédécoupées en échantillons rectangulaires, puis polies suivant le protocole proposé par [MON-2001], pour atteindre des épaisseurs variant de 45 à 250 μm .
- Des échantillons épais pour les mesures en réflexion. Ces derniers sont obtenus à partir de plaques d'épaisseurs égales à 5 mm, injectées par la société Logoplaste.

La démarche suivie pour déterminer les propriétés radiatives du PET à partir des mesures en transmission et en réflexion est présentée dans les paragraphes suivants.

b) Mesure de la réflectivité spectrale spéculaire

La réflectivité spectrale du PET est obtenue directement par une mesure en réflexion (FIG. 2.9 B). Pour que les mesures soient fiables les échantillons doivent impérativement être opaques vis à vis des longueurs d'ondes considérées. Comme nous le constaterons, cette condition est largement satisfaite pour des échantillons de quelques mm d'épaisseur. Il est important de souligner que cette mesure suppose que le matériau réfléchit le rayonnement de manière spéculaire. Par conséquent il est probable que le coefficient de réflexion obtenu par cette méthode soit sous-estimé. Une des perspectives de ce travail serait de mesurer la réflectivité diffuse du PET à l'aide d'un spectromètre doté d'une sphère intégrante, tel que le propose [GAR-2006]. La FIG. 2.16 illustre une comparaison entre les valeurs mesurées sur les échantillons de T74F9 et les valeurs obtenues par [MON-2001] pour un autre grade de PET.

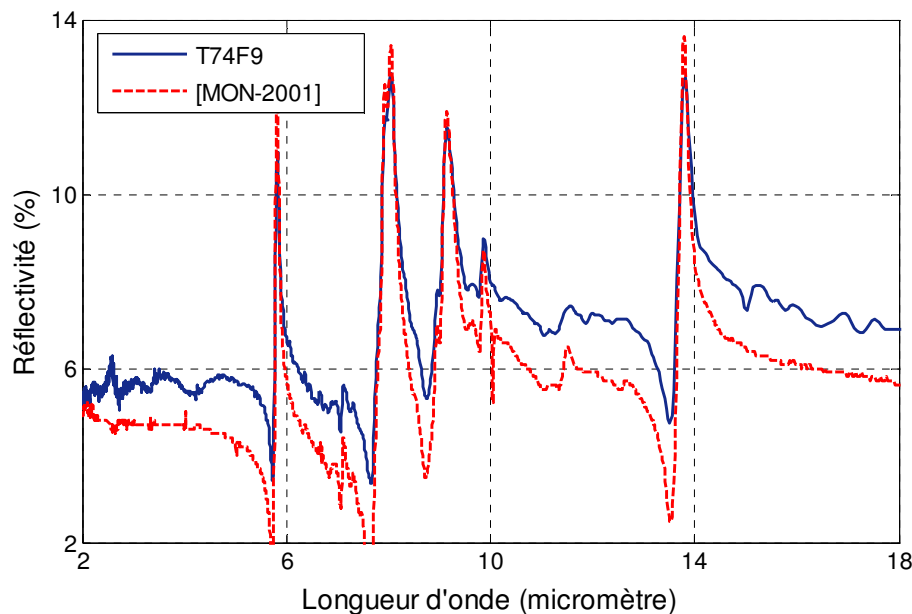


FIG. 2.10 - Coefficient de réflexion spectral mesuré par spectrométrie IR

Nous remarquons une nette similitude entre ces deux résultats, tant du point de vue qualitatif que quantitatif. En effet les pics spectraux sont localisés à des longueurs d'ondes identiques pour les deux matériaux. Notons que le pourcentage de réflexion moyen est d'environ 7 %.

c) Calcul du coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est obtenu indirectement à l'aide des mesures en transmission. Ce type de mesures permet d'obtenir le coefficient de transmission apparent T_λ du PET. Ce paramètre représente la fraction de la luminance incidente que transmet l'échantillon. Il résulte donc à la fois de l'absorption de l'échantillon, de sa réflexion, et bien entendu de son épaisseur.

En supposant que l'absorption du PET obéit à la loi de Beer-Lambert, le coefficient de transmission apparent s'exprime ainsi [MON-2004] :

$$T_\lambda \approx \frac{1-\rho_\lambda}{1+\rho_\lambda} \tau_\lambda \approx \frac{1-\rho_\lambda}{1+\rho_\lambda} e^{-\kappa_\lambda d} \quad (2.27)$$

où τ_λ et ρ_λ désignent respectivement la transmittivité et la réflectivité spectrale définies par l'équation (2.11), et d représente l'épaisseur de l'échantillon. En prenant le logarithme, cette équation devient linéaire :

$$-\ln T_\lambda = -\ln \tau_\lambda + \ln \frac{1+\rho_\lambda}{1-\rho_\lambda} = \kappa_\lambda d + C_\lambda \quad (2.28)$$

Le coefficient d'absorption κ_λ est alors directement accessible en déterminant les pentes des droites expérimentales. Le coefficient d'absorption, propriété intrinsèque du PET, permet de caractériser l'absorption du rayonnement indépendamment de l'épaisseur de l'échantillon.

La FIG. 2.11 illustre un exemple de résultats bruts obtenus par des mesures en transmission sur deux échantillons d'épaisseurs différentes.

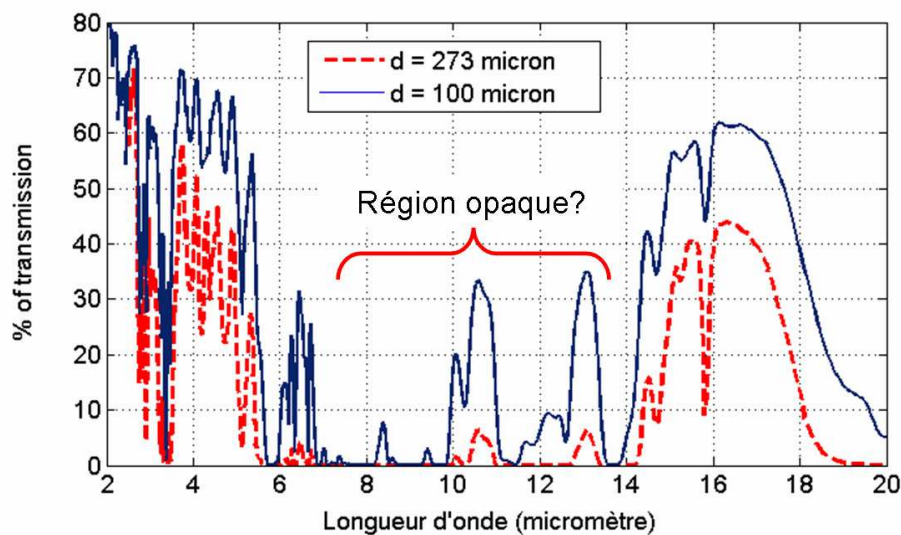


FIG. 2.11 - Coefficient de transmission apparent mesuré par spectrométrie IR pour des échantillons de différentes épaisseurs

En toute logique le pourcentage de transmission est d'autant plus élevé que l'épaisseur de l'échantillon est faible. Nous distinguons des bandes spectrales plus ou moins transparentes vis à vis du rayonnement IR :

- En deçà de 7 μm la transmission est importante. Comme nous l'avons déjà évoqué (2.1.3), c'est dans cette bande spectrale que les lampes halogènes émettent le maximum d'énergie.
- La bande [8-14] μm retient particulièrement notre attention car c'est dans cette région que l'absorption du PET est la plus élevée. D'après la FIG. 2.11, la transmission maximale d'un échantillon de 0.27 mm d'épaisseur est de 5 % dans cette bande spectrale (la transmission peut toutefois être supérieure à 20 % pour un échantillon dont l'épaisseur est égale à 0.1 mm).

Ce spectre brut nous a d'ores et déjà permis d'identifier des bandes spectrales distinctes sur lesquelles le PET absorbe différemment le rayonnement. Cependant il demeure délicat de procéder à une étude plus quantitative, et il serait intéressant de s'affranchir de l'épaisseur de l'échantillon qui affecte fortement la transmission apparente. Pour cela le coefficient d'absorption, propriété intrinsèque du PET, est déterminé suivant la procédure décrite précédemment. La FIG. 2.12 illustre une comparaison entre les résultats obtenus pour le T74F9 et ceux obtenus par [MON-2001] pour un autre grade de PET.

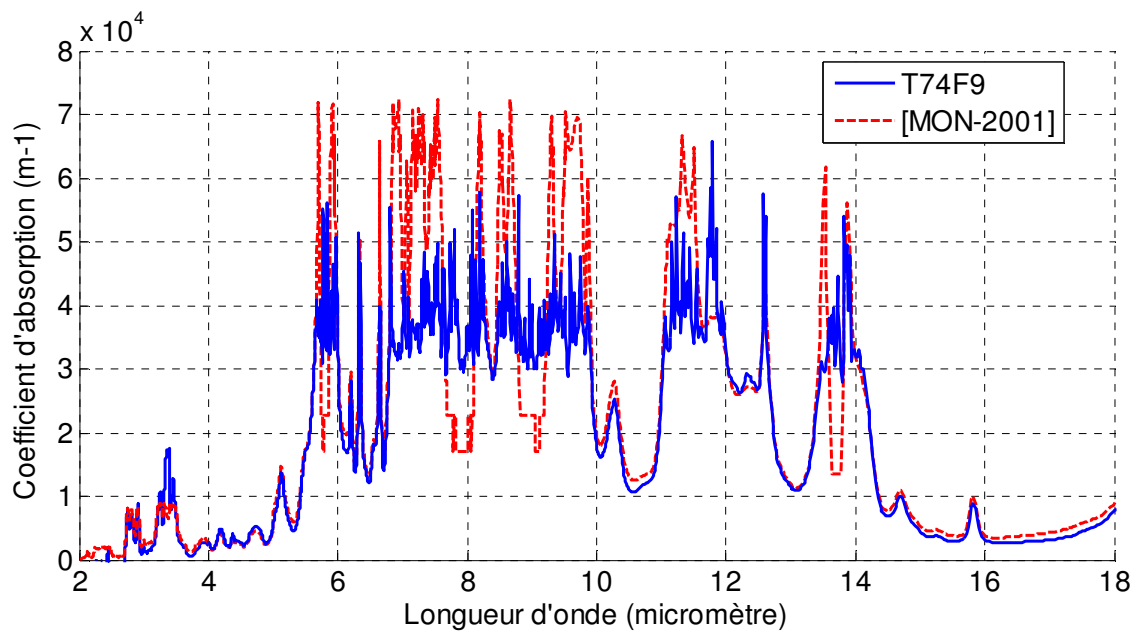


FIG. 2.12 - Coefficient d'absorption spectrale mesuré par spectrométrie IR

Nous constatons tout d'abord que les raies spectrales sont localisées à des longueurs d'ondes identiques pour les deux matériaux. Pour les longueurs d'ondes inférieures à 5 μm , c'est à dire dans la bande spectrale sur laquelle les lampes IR émettent le plus d'énergie, les coefficients d'absorption des deux PET présentent des valeurs similaires. En revanche, les coefficients d'absorption des deux PET varient avec des amplitudes différentes sur la bande spectrale [6-14] μm . Dans cette bande spectrale, la fraction du flux radiatif émis par les lampes IR est d'environ

5 %. Par conséquent, ces différences ont a priori un effet relativement limité sur l'élévation de température de la préforme.

A présent, nous souhaitons mettre à profit ces mesures afin d'estimer quantitativement le degré d'opacité du PET dans la bande spectrale $\Delta\lambda = [8-14] \mu\text{m}$. Pour cela, nous proposons de calculer le coefficient d'absorption moyen $\bar{\kappa}_{\Delta\lambda}$ sur cette bande spectrale. Ce coefficient est défini par :

$$\bar{\kappa}_{\Delta\lambda}(T) = \frac{\int_{\Delta\lambda} \kappa_{\lambda} L_{\lambda}^{\circ}(T) d\lambda}{\int_{\Delta\lambda} L_{\lambda}^{\circ}(T) d\lambda} \quad (2.29)$$

A l'aide de ce coefficient, nous sommes à même de calculer le libre parcours moyen de photons $\bar{l}_{\Delta\lambda}$, ou profondeur de pénétration du rayonnement (rappelons qu'il s'agit simplement de l'inverse du coefficient d'absorption). Les résultats sont reportés dans le TAB. 2.1.

PET	T (K)	$\Delta\lambda$ (μm)	$\bar{\kappa}_{\Delta\lambda}$ (m^{-1})	$\bar{l}_{\Delta\lambda}$ (μm)
T74F9	400	8 - 14	3.1×10^4	32
PET [MON 2001]	400	8 - 14	3.5×10^4	28

TAB. 2.1 - Profondeurs de pénétration dans la bande [8–14] μm

Les résultats révèlent que la profondeur de pénétration moyenne sur la bande spectrale [8-14] μm varie de 28 à 32 μm pour les deux matériaux, et ce, à la température du polymère en fin de chauffage (400 K). Autrement dit les mécanismes d'absorption ont lieu dans une couche superficielle mince devant l'épaisseur de la préforme : cette dernière peut être considérée comme étant opaque. Cette notion d'opacité par bandes peut être exploitée pour la mesure de température par thermographie IR. En effet si l'absorption du rayonnement est surfacique, il en est de même de l'émission propre. Le rayonnement émis par la préforme dans cette bande spectrale est donc purement surfacique, et directement lié à sa température de surface.

d) Calcul de l'émissivité

Les mesures de températures par thermographie IR (caméra IR, pyromètre) requièrent la connaissance préalable de l'émissivité du matériau dont on souhaite mesurer la température. L'émissivité spectrale du PET peut être déduite des mesures présentées précédemment. En effet, en appliquant la loi de Kirchhoff (équation (2.12)) au cas particulier du corps opaque (dont la transmittivité est nulle), l'émissivité est directement reliée à la réflectivité du matériau :

$$\varepsilon_\lambda = 1 - \rho_\lambda \quad (2.30)$$

Par conséquent les mesures de réflexion réalisées sur des échantillons épais nous permettent de déterminer l'émissivité spectrale. L'émissivité moyenne de Planck, définie par les équations (2.9) et (2.10), peut alors être calculée pour différentes plages de longueurs d'ondes, et pour des températures correspondant à celles du PET au cours du chauffage (de 300 à 400 K). Soulignons qu'il s'agit de la température intervenant dans l'expression de l'émissivité moyenne définie par l'équation (2.9). L'émissivité spectrale reste mesurée à la température ambiante, soit approximativement 20°C. Les résultats sont illustrés par la FIG. 2.13.

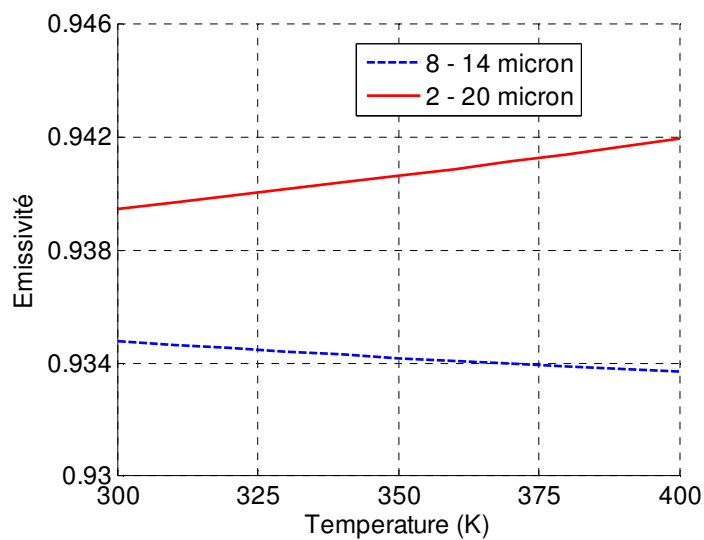


FIG. 2.13 - Emissivité moyenne de Planck du PET T74F9

Cette figure révèle que l'émissivité varie peu dans cette gamme de températures et de longueurs d'ondes. La valeur moyenne de 0.93 sera utilisée dans la suite de notre étude.

D'autre part, l'évolution de l'émissivité spectrale en fonction de l'épaisseur d peut être obtenue en écrivant la loi de Kirchhoff sous sa forme la plus générale, et en supposant que l'absorption du PET obéit à la loi de Beer-Lambert:

$$\varepsilon_\lambda = 1 - \rho_\lambda - \tau_\lambda = 1 - \rho_\lambda - e^{-\kappa_\lambda d} \quad (2.31)$$

L'émissivité moyenne de Planck peut alors être calculée sur la bande spectrale [8-14] μm en appliquant l'équation (2.9). La FIG. 2.14 illustre les résultats obtenus. Cette figure révèle que l'émissivité du PET atteint une valeur constante pour une épaisseur d'échantillon supérieure à 0.2 mm. Nous retrouvons la valeur de 0.93 déterminée précédemment. Au delà de cette épaisseur le PET peut être considéré comme étant opaque vis à vis du rayonnement IR.

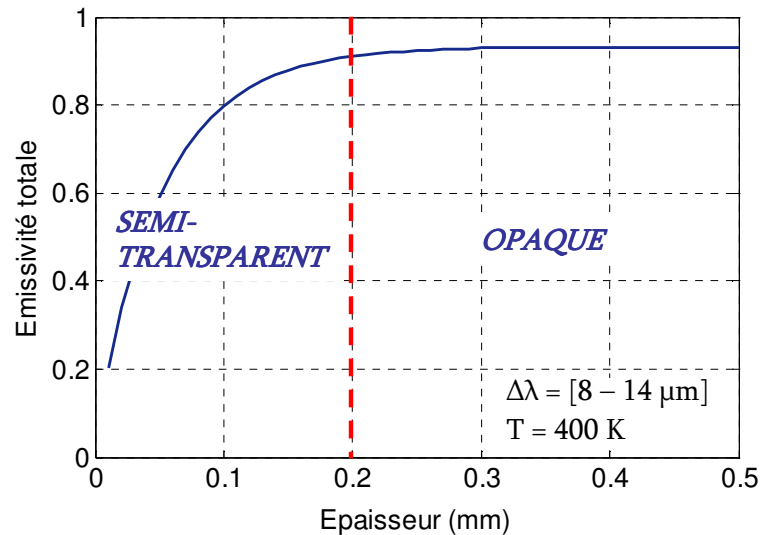


FIG. 2.14 - Variations de l'émissivité du PET T74F9 en fonction de l'épaisseur

L'épaisseur moyenne des préformes utilisées dans notre étude étant supérieure à 2.5 mm, nous pouvons affirmer que les mesures de température réalisées par thermographie IR fourniront des températures de surface. En revanche, à l'issue de l'étape de soufflage, l'épaisseur de la préforme peut atteindre 0.2 mm. Nous serions alors à la limite d'opacité du PET.

2.2.2 Propriétés thermiques du PET T74F9

Deux propriétés thermiques du PET sont requises pour la simulation numérique du chauffage IR. Il s'agit de la conductivité thermique et de la capacité calorifique massique. La première traduit la faculté du matériau à conduire un flux de chaleur sous l'effet d'un gradient thermique. La seconde représente la quantité d'énergie nécessaire pour élever la température d'un kilogramme de matière de 1 °C.

a) Conductivité thermique

Selon Esser [ESS-1987], la conductivité thermique des polymères tels que le PET est indépendante de la température. Une revue bibliographique portant sur les valeurs de conductivités thermiques adoptées pour le PET est proposée par [CHA-2007]. Cette étude révèle que la conductivité thermique du PET est généralement comprise entre 0.25 et 0.29 W.m⁻¹.K⁻¹. Dans la suite de notre étude nous adopterons la valeur moyenne de 0.27 W.m⁻¹.K⁻¹.

b) Capacité calorifique massique

Les mesures de capacité calorifique massique ont été réalisées par Analyse Enthalpique Différentielle (AED) (plus communément appelé DSC de l'anglais "Differential Scanning

Calorimetry") à l'aide d'un calorimètre DSC Perkin Elmer. Nous avons suivi le protocole proposé par [AND-2005] que l'on retrouve généralement dans la littérature, à savoir une vitesse de chauffage constante de $10 \text{ K}\cdot\text{min}^{-1}$ sous un débit d'azote de $25 \text{ ml}\cdot\text{min}^{-1}$. La gamme de température étudiée s'étend de 20 à 120 °C, ce qui correspond à l'intervalle de température d'une préforme au cours d'un essai de chauffage IR.

Les échantillons utilisés sont obtenus par découpe de préformes 18g composées de PET T74F9 et injectées par la société Logoplaste. Nous garantissons ainsi que l'"histoire thermique" des échantillons est la même que celle des préformes. Ce point est crucial pour un matériau semi-cristallin tel que le PET. En effet les conditions de mise en forme des échantillons, notamment la vitesse de refroidissement depuis l'état fondu, affectent leur état structural, qui à son tour affecte les résultats obtenus par DSC [GOR-2001].

La FIG. 2.15 illustre une comparaison entre les résultats obtenus pour le PET T74F9, et ceux reportés dans les travaux de [MON-2001] pour un autre grade de PET.

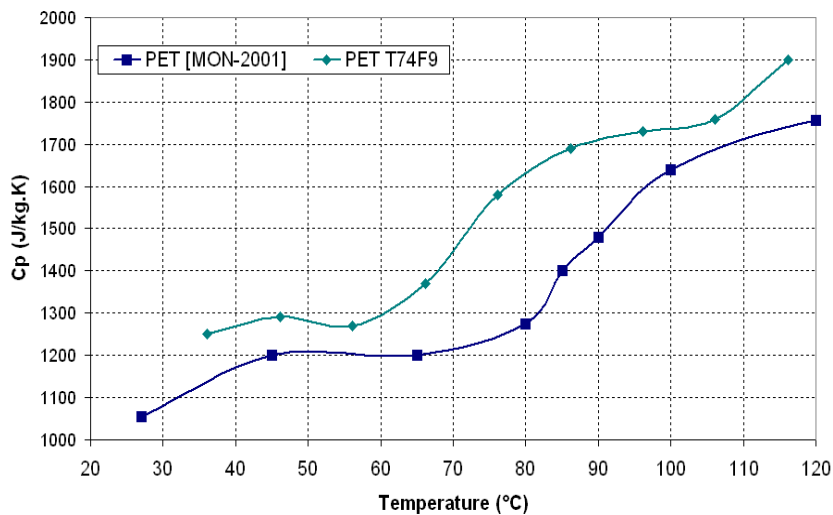


FIG. 2.15 - Capacité calorifique massique du PET T74F9

Nous pouvons constater que la capacité calorifique massique du PET présente une variation importante sur l'intervalle de température correspondant à celui du chauffage IR d'une préforme. En effet sa valeur augmente d'environ 50 % entre 40 et 110 °C. Ce phénomène est dû à la transition vitreuse du PET, qui pour le T74F9, se situe aux alentours de 75 °C [GOR-2001]. Comme nous l'avons montré, cette variation a un effet très important sur la température de la préforme, ce qui justifie l'intérêt porté à cette mesure.

En conclusion, les mesures des propriétés radiatives et thermiques du PET que nous avons présentées vont jouer un rôle crucial dans la réalisation des simulations numériques du chauffage IR. Nous allons à présent nous intéresser au modèle mis en œuvre pour réaliser ces simulations.

2.3 Simulation numérique du chauffage IR

2.3.1 Etat de l'art

La distribution de température de la préforme à la sortie du four apparaît clairement comme un paramètre prépondérant lors de la mise en forme d'une bouteille en PET. En effet, la température affecte non seulement la cinétique de mise en forme mais aussi la répartition d'épaisseur du produit final. D'autre part elle affecte la cristallisation induite durant le soufflage, et par conséquent les propriétés mécaniques et optiques de la bouteille [KIM-1985], [VEN-1992], [DEN-1995]. C'est pourquoi les deux dernières décennies ont vu croître le nombre de modèles destinés à la simulation de l'étape de chauffage IR.

Parmi les premières études réalisées sur ce sujet nous pouvons citer les travaux de [LEB-1989] ainsi que de [SHE-1991]. Tout deux proposent de calculer la distribution de température dans l'épaisseur d'un cylindre en PET uniformément éclairé sur sa hauteur. L'enjeu principal de ces travaux est de démontrer la validité de la loi de Beer-Lambert, mise en œuvre pour calculer l'absorption du rayonnement IR. Cependant, le rayonnement des émetteurs n'est pas modélisé. Autrement dit les flux radiatifs reçus par la préforme doivent être mesurés pour être appliqués en tant que conditions aux limites.

Les travaux menés par [DIR-1993], [HAR-1996], [MAR-1999], [VEN-1999] et [YOU-2001] visent à modéliser les émetteurs IR afin de calculer les flux radiatifs reçu par la surface de la préforme. Les modèles présentés par [HAR-1996] et [YOU-2001] prennent notamment en compte les réflecteurs métalliques, ainsi que le mouvement de la préforme dans le four.

Les premières simulations en trois dimensions sont présentées par [MON-2001]. Ce dernier développe un logiciel basé sur la méthode des volumes-finis, capable de prendre en compte des géométries de préformes complexes. De plus, une modélisation fine des émetteurs IR est proposée, ainsi qu'un calcul du terme source prenant en compte la dépendance spectrale du rayonnement. Un exemple de simulation en 3D par éléments-finis est présenté par [HUA-2005], qui utilise le logiciel commercial ANSYS[®]. Le PET est cependant considéré comme un corps opaque.

L'hypothèse forte utilisée dans l'ensemble des études citées ci-dessus, est que le flux radiatif se propage de manière unidirectionnelle dans l'épaisseur de la préforme. [MIC-2004] ainsi que [CHA-2007] présente tout deux des modèles de transferts radiatifs capables de prendre en compte la dépendance directionnelle et spectrale du rayonnement. [CHA-2007] implémente la méthode du Raytracing en trois dimensions dans le logiciel FORGE3[®]. Cette méthode utilisée dans le domaine de la synthèse d'image, permet de rendre compte du trajet réel des photons dans l'épaisseur de la préforme. [MIC-2004] utilise quant à lui la méthode des zones pour

résoudre l'Equation du Transfert Radiatif dans la préforme. Une synthèse de ces différents travaux est présentée par la TAB. 2.2.

Source	Dimension du problème thermique	Discrétisation préforme	Absorption du flux radiatif	Calcul des flux radiatifs
[LEB-1989]	2D	Différences-finies	Coefficient d'absorption moyen	NON
[SHE-1991]	1D	Eléments-finis	" "	NON
[HAR-1996]	2D-Axi	Eléments-finis (ABAQUS®)	" "	Facteurs de forme analytiques
[MAR-1999]	1D	Eléments-finis Membranes multi-couches	" "	Facteurs de forme
[VEN-1999]	1D	Différences-finies	" "	Facteurs de forme
[MON-2001]	3D	Volumes-finis Quadrangles	Coefficient d'absorption spectral	Facteurs de forme numériques
[YOU-2001]	1D	Eléments-finis Membranes multi-couches	Coefficient d'absorption moyen	Facteurs de forme
[MIC-2004]	3D	Eléments-finis	Coefficient d'absorption spectral	Méthode des zones
[HUA-2005]	3D	Eléments-finis (ANSYS®) Hexaèdres	Milieu opaque	Facteur de forme
[CHA-2007]	3D	Eléments-finis (FORGE3®) Tétraèdres	Coefficient d'absorption spectral	Raytracing

TAB. 2.2 - Simulation numérique du chauffage IR appliquée à l'injection-soufflage – État de l'art

Dans le cadre de notre étude, nous avons mis en œuvre le logiciel baptisé PLASTIRAD, développé par [MON-2001].

2.3.2 Le logiciel PLASTIRAD

PLASTIRAD est un solveur thermique 3D dédié à la simulation du chauffage IR. Initialement conçu pour le procédé d'injection-soufflage, il fut appliqué au thermoformage au cours de la thèse de S. Andrieu [AND-2005]. Plus généralement, ce logiciel peut être mis en œuvre pour les procédés mettant en jeu une étape de chauffage IR, sous réserve que le matériau chauffé soit non-diffusant (à ce jour aucun modèle de diffusion n'a été implémenté). Les paragraphes suivants visent à présenter les points clefs du modèle.

a) Méthode des volumes finis et maillage

La résolution numérique de l'équation de la chaleur est réalisée à l'aide d'une discrétisation de type volumes finis en trois dimensions. Cette méthode consiste à mailler la préforme en volumes de contrôle, et à intégrer l'équation de la chaleur (1.1) sur chaque élément de volume, et sur le temps entre un instant t et un instant $t + \Delta t$:

$$\int_{\Delta \Omega_e} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega_e dt = \int_{\Delta \Omega_e} \nabla \cdot (k \nabla T) d\Omega_e dt - \int_{\Delta \Omega_e} \nabla \cdot \vec{q}_r d\Omega_e dt \quad (2.32)$$

où Ω_e représente un volume de contrôle. Sur chaque élément de volume, l'ensemble des propriétés du matériau ainsi que sa température sont supposées uniformes. Après application du théorème de Gauss, l'équation (2.32) peut s'écrire sous la forme intégral-différentielle suivante :

$$V \int_{\Delta} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dt = \iint_{\Delta \Gamma} (\nabla k T \cdot \vec{n}) d\Gamma dt - \iint_{\Delta \Gamma} (\vec{q}_r \cdot \vec{n}) d\Gamma dt \quad (2.33)$$

où Γ est la surface du volume de contrôle, et V le volume d'un élément. Cette expression fait apparaître un bilan des flux à travers les surfaces Γ de chaque volume de contrôle. Le gradient thermique aux interfaces est ensuite calculé en supposant que la température varie linéairement entre chaque point du maillage. Enfin l'intégration temporelle est réalisée à l'aide d'un schéma implicite à pas de temps constant.

La FIG. 2.16 illustre un exemple de maillage de type volumes finis. La principale limite du logiciel réside dans son manque de souplesse vis à vis du maillage. En effet, les contraintes à respecter sont nombreuses : maillage structuré de type quadrangle, bonne orthogonalité des mailles, faible distorsions des éléments. En d'autres termes, tout maillage libre est à proscrire. Ces contraintes proviennent des hypothèses et simplifications adoptées dans le modèle. Soulignons toutefois que ces hypothèses ont permis une réduction très sensible des temps de calcul.

D'autre part, un des atouts du logiciel est sa capacité à prendre en compte les maillages de type éléments finis, grâce à un module de conversion de maillage. Ceci permet d'exploiter toute la puissance des logiciels de maillage commerciaux (IDEAS® dans le cadre de cette étude), qui proposent en général des maillages éléments finis.

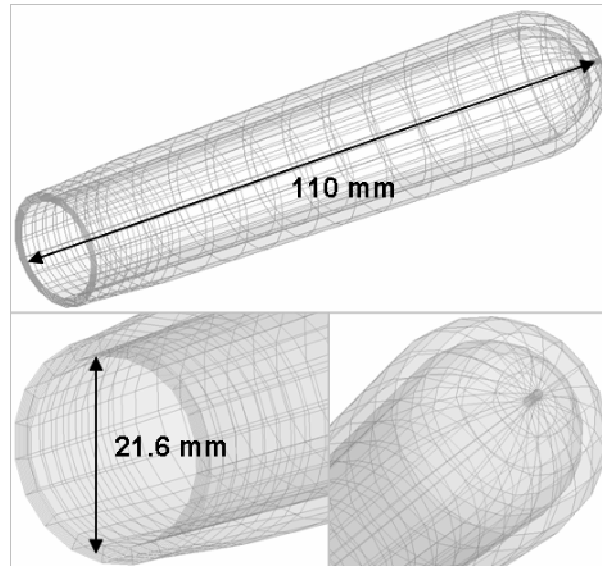


FIG. 2.16 - Exemple de maillage volumes finis

b) Conditions aux limites – pertes convectives et radiatives

Deux types de pertes de chaleur sont prises en compte au niveau de la surface externe de la préforme. La première est due au refroidissement par convection (forcée en présence d'un système de ventilation, naturelle dans le cas contraire). La seconde est due à l'émission propre du matériau. Ces pertes convectives et radiatives sont particulièrement importantes, notamment durant la phase d'équilibre (après arrêt du chauffage).

Ces phénomènes étant considérés surfaciques, ils sont pris en compte à travers une condition aux limites de type Fourier :

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_P = h_c (T_P - T_\infty) + \varepsilon_{PET} \sigma_{SB} (T_P^4 - T_\infty^4) \quad (2.34)$$

où h_c représente le coefficient d'échange convectif moyen, et σ_{SB} la constante de Stefan-Boltzman ($\sigma_{SB} = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$). T_P désigne la température de surface externe de la préforme, et T_∞ la température de l'air ambiant. L'émissivité moyenne de Planck ε_{PET} est définie par l'équation (2.10). Dans cette étude nous adoptons la valeur de 0.93, déterminée au paragraphe 2.2.1.

Le four IR du pilote de soufflage du CROMeP ne dispose d'aucun système de ventilation. Dans ces conditions, la convection entre la surface externe de la préforme et l'air ambiant est de type naturelle. Le coefficient d'échange convectif moyen peut être estimé à l'aide de la corrélation de Churchill and Chu [CHU-1975] établie pour un écoulement autour d'un cylindre ou d'une plaque verticale en convection naturelle :

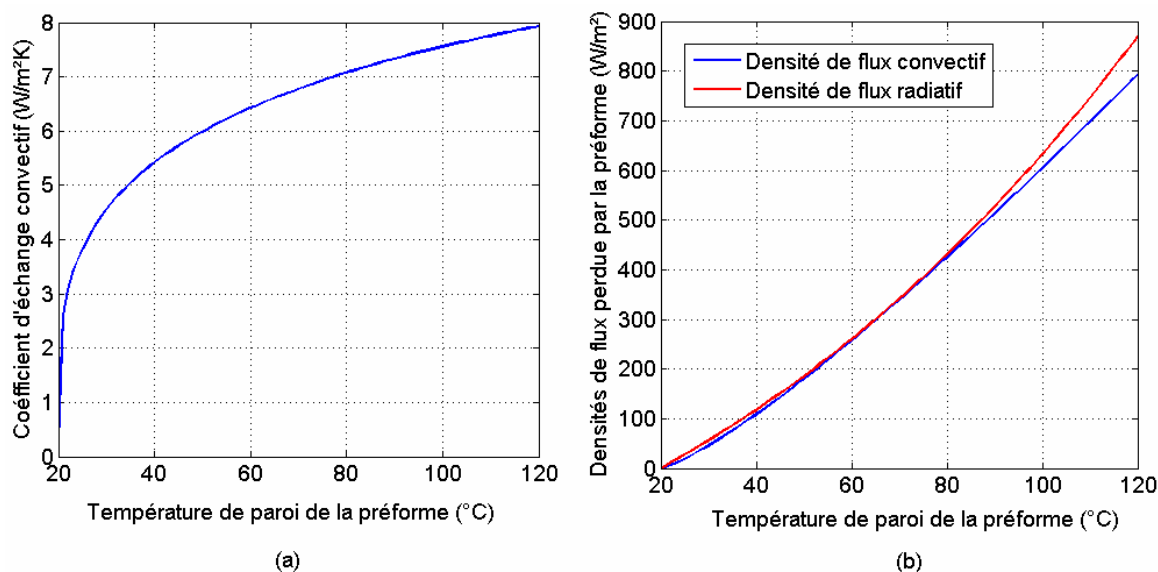
$$h_c = \frac{k}{L} \left[0.825 + \frac{0.387 Ra^{1/6}}{\left\langle 1 + (0.492 / Pr)^{9/16} \right\rangle^{8/27}} \right]^2 ; \quad Ra \leq 10^9 \quad (2.35)$$

où k désigne la conductivité thermique du PET, L la hauteur de la préforme. Les nombres adimensionnels Ra et Pr désignent respectivement le nombre de Rayleigh et de Prandtl [CHE-1999]. Il est à noter que cette corrélation n'est valable que si le nombre de Rayleigh est inférieur à 10^9 , ce qui est le cas dans notre étude comme l'illustre la TAB. 2.3.

T_{PET} (°C)	T_{FILM} (°C)	Pr	Ra
20	20	0.690	0
60	40	0.689	1.05×10^6
100	60	0.688	1.6×10^6

TAB. 2.3 - Nombres de Prandtl et de Rayleigh pour différentes températures de film

Ces résultats prennent en compte la variation des propriétés physiques et thermiques de l'air en fonction de la température. Le calcul des nombres adimensionnels est réalisé à la température de film T_{FILM} , moyenne algébrique entre la température du PET T_{PET} et la température de l'air ambiant. La FIG. 2.17 illustre les résultats obtenus avec cette corrélation. Le solveur thermique ne permettant pas d'appliquer un coefficient d'échange thermodépendant, nous devons choisir un intervalle de température afin d'effectuer une moyenne. La gamme [80-120] °C semble être la plus judicieuse. En effet c'est dans cette gamme de températures, correspondant à la phase de maintien, que la convection joue un rôle prédominant. Durant la phase de chauffage les pertes convectives sont négligeables devant les apports énergétiques du rayonnement incident. A titre indicatif la densité de flux reçue par la surface de la préforme (ou éclairage) est de l'ordre de 40 kW.m^{-2} [MON-2001], alors que la densité de flux perdue par convection est d'environ 0.5 kW.m^{-2} comme l'illustre la FIG. 2.17 (b). Dans la suite de cette étude, la valeur moyenne de $7.5 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ sera adoptée pour le coefficient d'échange. La FIG. 2.17b révèle que les pertes radiatives et convectives sont du même ordre de grandeur durant toute la durée du chauffage ainsi que durant la phase de maintien.



**FIG. 2.17 - (a) Coefficient d'échange convectif préforme/air ambiant
(b) Densités de flux perdue par la surface de la préforme**

Lorsque le four IR est équipé d'un système de ventilation (ce qui est généralement le cas sur les machines de soufflage industrielles) la convection est de type forcée. Les mesures réalisées par [MON-2004] sur un four industriel révèlent que les coefficients d'échange sont de l'ordre de 30 à 50 $\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$. De plus, le coefficient d'échange varie sensiblement suivant la hauteur de la préforme. Le logiciel PLASTIRAD est capable de prendre en compte ces variations.

Enfin, il est important de noter que la paroi interne de la préforme n'est soumise à aucun échange convectif (les échanges radiatifs sont toutefois pris en compte). Cette hypothèse a été validée expérimentalement par [MON-2001].

c) Calcul des flux radiatifs incidents

La densité de flux radiatif reçue par la préforme en tout point de sa surface (plus communément appelée *éclairement*) est calculée en deux étapes :

- Calcul du flux émis par une lampe : dans un premier temps les lampes sont assimilées à des corps isothermes à émission diffuse. Leur température est calculée à l'aide du modèle de Pettersson [PET-2000]. Ce modèle permet de prendre en compte les spécificités de chacune des lampes halogènes (longueur et épaisseur du filament de tungstène, taille des spires, épaisseur du quartz, puissance etc...). Leur spectre d'émission est alors décrit par la loi de Planck (équation (2.5)). Le flux radiatif émis par chacune des lampes est ainsi parfaitement défini. L'influence des réflecteurs métalliques ainsi que des réflecteurs céramiques intégrés aux lampes IR est prise en compte par le biais de coefficients correcteurs, suivant la méthode décrite par [MON-2001].

- Calcul de la fraction du flux reçu par la préforme : dans un second temps, la surface de chacune des lampes est maillée en éléments rectangulaires dont la contribution au chauffage de la préforme est calculée par le biais de *facteurs de forme*. Par définition, le facteur de forme $F_{i \rightarrow j}$ entre une surface S_i et une surface S_j est la fraction du flux radiatif émis par S_i directement reçu par S_j . Ces facteurs de forme sont calculés numériquement par la méthode des contours, et réactualisés à chaque pas de temps pour prendre en compte le mouvement de la préforme au sein du four.

Finalement les densités de flux radiatifs incidents sont calculées à l'aide de la relation suivante :

$$q_{\lambda 0, p} = (1 - \rho_\lambda) \sum_{i=1}^{N_l} \sum_{j=1}^{N_e} (F_{ij \rightarrow p} S_i) \varepsilon_{\lambda, F} \pi L_\lambda(T_i) \quad (2.36)$$

où $q_{\lambda 0, p}$ désigne la densité de flux radiatif spectral reçue par l'élément de surface p de la préforme. Ce flux prend en compte les contributions des N_e éléments de surface de chacune des N_l lampes dont la température est notée T_i . $\varepsilon_{\lambda, F}$ désigne l'émissivité spectrale du filament de tungstène. Enfin, le coefficient de réflexion spectrale du PET, noté ρ_λ , permet de prendre en compte la fraction du flux réfléchi à la surface de la préforme.

d) Calcul du terme source radiatif

En adoptant l'équation de Beer-Lambert (équation (2.25)), le terme source radiatif s'écrit :

$$\nabla \cdot \vec{q}_r(s) = \int_{\Delta\lambda} -\kappa_\lambda q_{\lambda 0} e^{-\kappa_\lambda s} d\lambda \quad (2.37)$$

Connaissant les valeurs des flux incidents, cette expression est facilement intégrable numériquement (à l'aide de la méthode de Gauss par exemple).

2.3.3 Application : simulation du chauffage IR d'une préforme 18g

Le modèle présenté précédemment a été mis en œuvre afin de simuler le chauffage IR d'une préforme dans les mêmes conditions opératoire que celles du pilote de laboratoire du CROMeP. L'objectif est de valider ces simulations à l'aide de mesures thermographiques afin de mettre en évidence la fiabilité du modèle, en vue d'intégrer celui-ci dans une boucle d'optimisation.

a) Configuration et dispositif expérimental

Le pilote de soufflage du CROMeP dispose d'un four infrarouge composé de six lampes halogène Philips présentant chacune une puissance nominale de 1 kW. La surface arrière de ces

lampes (face cachée de la préforme) est recouverte d'un revêtement céramique jouant le rôle de réflecteur. Le four dispose de plus d'un réflecteur métallique arrière comme l'illustre la FIG. 2.18. Durant son séjour au sein du four, la préforme est animée d'un mouvement de rotation à la vitesse de 1.2 tr/sec. Les paramètres de contrôle de l'utilisateur sont les suivants :

- Le temps de chauffage.
- Le temps de maintien.
- Le pourcentage de la puissance nominale affecté à chacune des lampes.

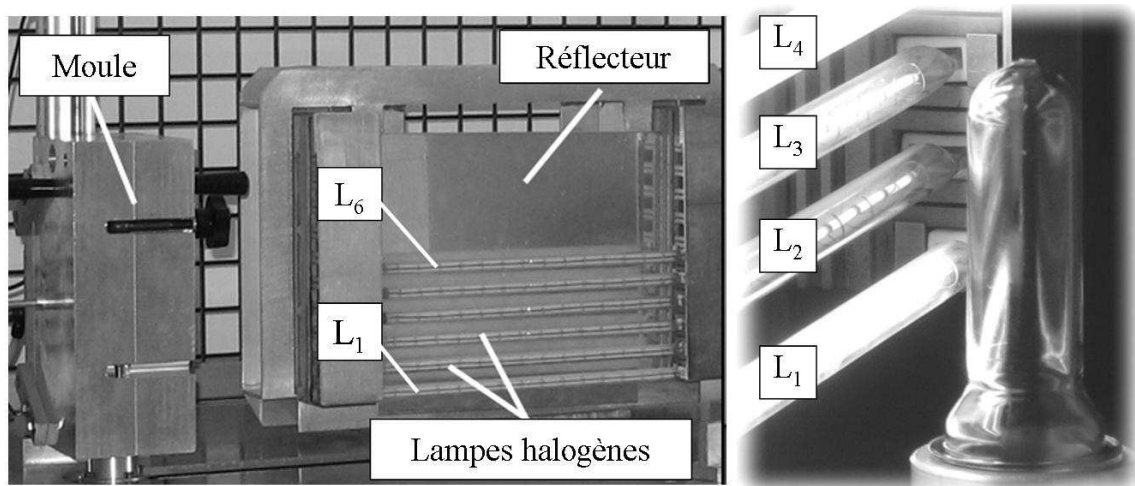


FIG. 2.18 - Four IR du pilote de laboratoire du CROMeP

La préforme utilisée pour les essais est identique à celle qui sert à l'élaboration des échantillons nécessaires aux mesures spectrométriques. Elle est composée de PET T74F9, injecté par la société Logoplaste. Destinée à la fabrication de bouteilles 50 cl, son poids est de 18 g et son épaisseur moyenne de 2.58 mm. Ses dimensions sont illustrées par la FIG. 2.19.

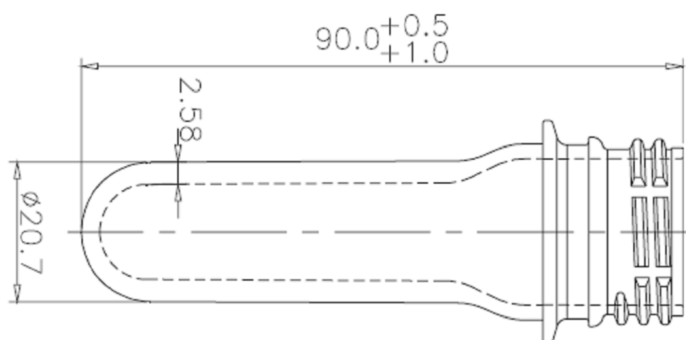


FIG. 2.19 - Préforme APT_PACK 18 g T74F9

Au cours du chauffage IR, la température externe de la préforme est mesurée à l'aide d'une caméra infrarouge AGEMA 880 LW fonctionnant dans la gamme [8-12] μm . Les paramètres de

réglage utilisés durant les essais sont reportés dans le TAB. 2.4. Nous notons P_i le pourcentage de la puissance nominale affecté à la lampe L_i . Les indices sont illustrés par la FIG. 2.18.

P_1 (%)	P_2 (%)	P_3 (%)	P_4 (%)	P_5 (%)	P_6 (%)	t_{ch} (s)	t_{re} (s)
100	100	18	5	50	100	50	10

TAB. 2.4 - Paramètres procédé utilisés pour les essais de chauffage

b) Conception du maillage pour la simulation

La géométrie ainsi que le maillage 3D sont réalisés à l'aide du logiciel IDEAS[®]. Comme nous l'avons évoqué précédemment, de nombreuses contraintes sont à respecter afin que le solveur PLASTIRAD puisse convertir le maillage éléments-finis en maillage volumes-finis. Pour cette étude nous avons adopté un maillage structuré composé de quadrangles à huit nœuds. Les mailles sont orthogonales dans l'épaisseur de la préforme afin de faciliter le calcul de la propagation du flux radiatif. Enfin, un intérêt tout particulier a été apporté à la distorsion des éléments, notamment au niveau de la calotte de la préforme, ainsi qu'à l'étrépage des mailles.

En suivant les recommandations proposées par [MON-2001] suite à son étude paramétrique du logiciel PLASTIRAD, nous avons choisi un nombre de mailles dans l'épaisseur de la préforme égal à dix, ainsi qu'un pas de temps de 0.1 s. Le nombre de nœuds du maillage s'élève à 14500. Les FIG. 2.20 et FIG. 2.21 illustrent respectivement la géométrie et le maillage de la préforme.

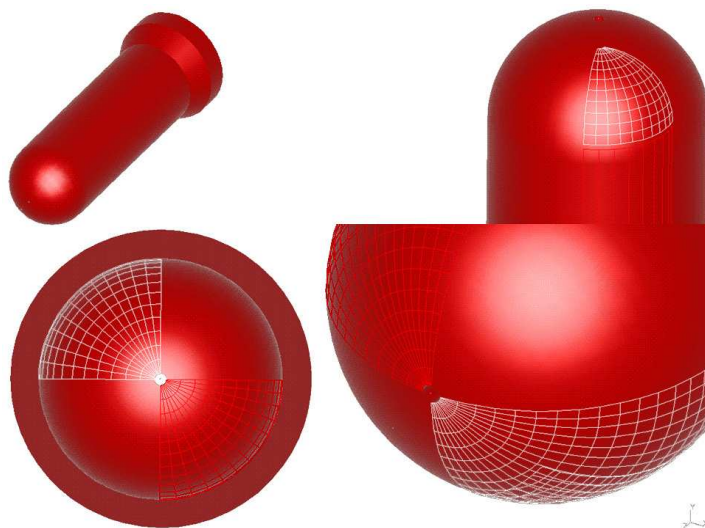


FIG. 2.20 - Géométrie de la préforme réalisée avec IDEAS[®]

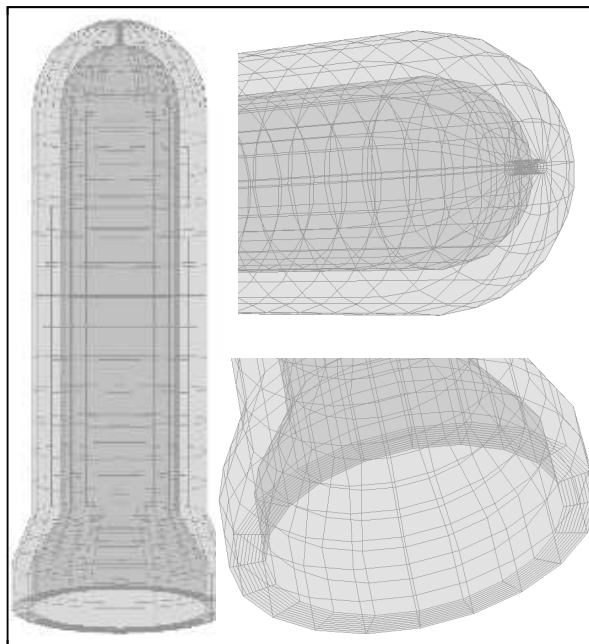


FIG. 2.21 - Maillage de la préforme réalisé avec IDEAS®

c) Résultats et discussion

La FIG. 2.22 illustre la variation de la température de la préforme au cours du temps, au niveau d'un point localisé à une distance de 47 mm du pas de vis (point choisi car il correspond au nœud médian du maillage). Cette figure permet de mettre en évidence plusieurs points :

- Tout d'abord nous constatons un très bon accord entre la température externe prédite numériquement et la température mesurée à l'aide de la caméra IR. A l'issue de la phase de chauffage *l'erreur sur la température est inférieure à 5 %*.
- L'évolution de la température externe durant la phase de maintien est elle aussi en accord avec les mesures. Ceci révèle que les pertes thermiques sont correctement estimées.
- Enfin, nous pouvons constater qu'après 3 s de maintien, la température interne de la préforme devient supérieure à la température externe. Ce phénomène d'inversion de température est dû au fait que la paroi externe de la préforme est refroidie par convection, tandis que la diffusion de la chaleur dans l'épaisseur de la préforme a tendance à augmenter la température de la face interne (rappelons que la face interne de la préforme n'est soumise à aucun transfert de chaleur convectif).

Le gradient thermique généré par cette inversion de température joue un rôle crucial durant la phase de mise en forme. En effet le taux d'étirage (rapport entre le rayon initial et le rayon final) au niveau de la paroi interne de la préforme est largement supérieur à celui de la paroi externe. Les contraintes induites durant la mise en forme sont par conséquent très supérieures au niveau de la paroi interne. Le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme permet

donc d'homogénéiser la contrainte. D'autre part il a été démontré que la distribution de température dans l'épaisseur de la préforme affecte l'orientation des molécules induite lors de l'étirage biaxial de la préforme. Cette orientation affecte à son tour les propriétés mécaniques, optiques et barrières (perméabilité au gaz) de la bouteille [KIM-1985], [VEN-1998]. D'après l'étude proposée par [VEN-1998], l'anisotropie des propriétés optiques de la bouteille à travers son épaisseur est minimale lorsque la température externe de la préforme est inférieure à la température interne. Cette étude démontre donc l'importance du phénomène d'inversion.

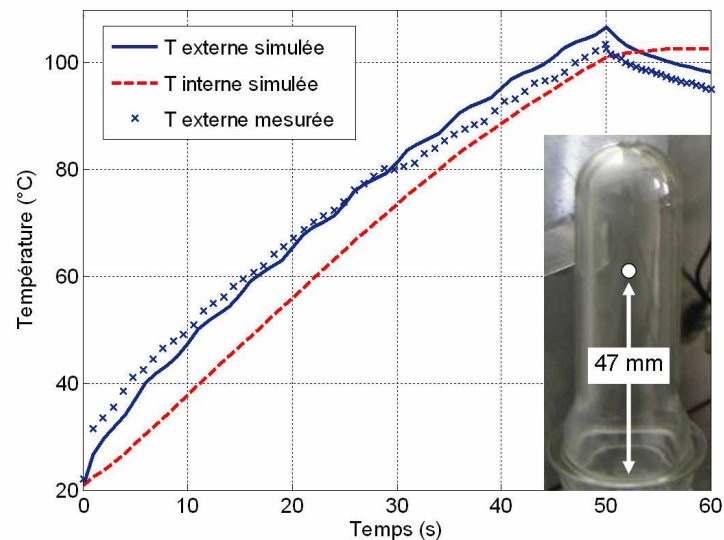


FIG. 2.22 - Variation de la température de la préforme en fonction du temps – Validation expérimentale des simulations numériques

Un des atouts majeurs du modèle numérique mis en œuvre est la possibilité d'accéder au profil de température dans l'épaisseur de la préforme (FIG. 2.23). Il est intéressant de noter que ce profil n'est pas linéaire, mais exponentiel. Dans le cadre de cette étude, nous n'avons pas validé expérimentalement le gradient de température calculé dans l'épaisseur de la préforme. Ceci fait toutefois partie intégrante de nos perspectives. Pour cela, différentes approches sont envisageables. Une première méthode, proposée par [HUA-2006], consiste à introduire des thermocouples dans l'épaisseur de la préforme. Cette méthode demeure néanmoins très délicate à mettre en œuvre. D'une part, les thermocouples absorbent une fraction du flux radiatif pendant le chauffage, et d'autre part ils sont susceptibles de générer des ponts thermiques. Ces deux phénomènes doivent être pris en compte par le biais de modèles correctifs délicats à mettre en œuvre. Une autre approche, proposée par [MON-2001], consiste à découper la préforme longitudinalement. Durant le chauffage, les deux parties de la préforme sont mises en contact à l'aide d'une graisse thermique présentant la même conductivité thermique que le PET. Les deux parties sont ensuite dissociées durant toute la phase de refroidissement, afin d'accéder à la température de la surface interne par une mesure thermographique.

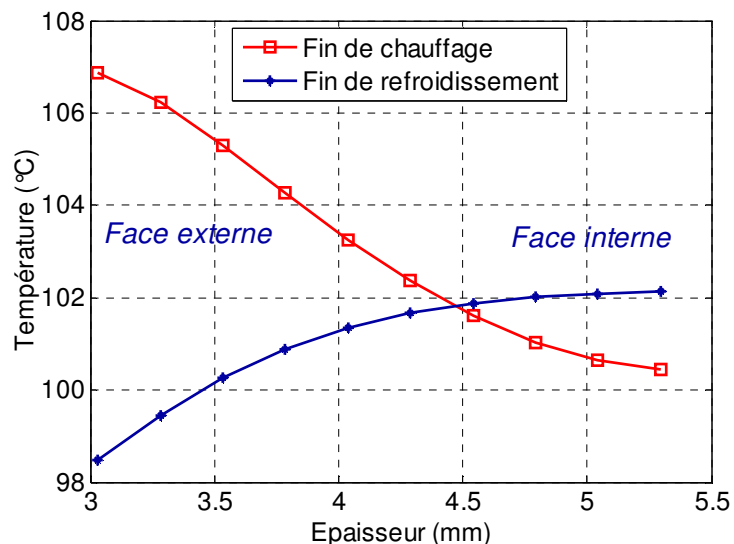


FIG. 2.23 - Profil de température dans l'épaisseur de la préforme (à une distance de 47 mm du pas de vis) - Résultats numériques

Enfin les simulations permettent de prédire la distribution de température suivant la hauteur de la préforme tel que l'illustre la FIG. 2.24. Nous pouvons à nouveau constater un bon accord entre les prédictions et les mesures expérimentales. L'erreur relative entre les températures calculées et mesurées est inférieure à 5 %.

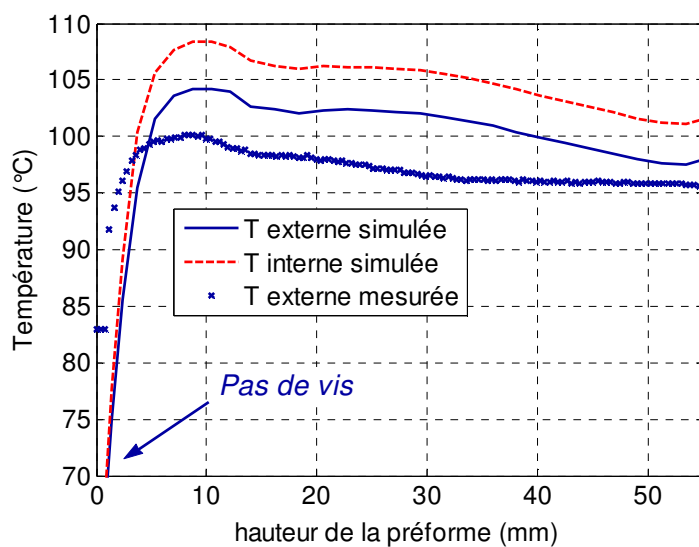


FIG. 2.24 - Profils de température suivant la hauteur de la préforme - Validation des simulations numériques

2.4 Conclusion partielle

Dans ce chapitre nous avons présenté les lois régissant les transferts thermiques intervenant durant l'étape de conditionnement thermique, en mettant l'accent sur la modélisation des transferts radiatifs. Un intérêt tout particulier a été accordé à la mesure des propriétés radiatives du PET utilisé dans le cadre de notre étude. Les mesures spectrométriques nous ont permis de déterminer le coefficient d'absorption spectral et l'émissivité spectrale du PET. Ces deux propriétés sont d'un intérêt majeur. D'une part, elles sont nécessaires au recalage des températures que nous avons mesurées avec une caméra IR. D'autre part, elles nous ont permis de réaliser des simulations du conditionnement thermique avec le logiciel de chauffage IR développé au laboratoire.

Toutefois, différentes remarques peuvent être émises à propos de ces mesures. Tout d'abord, les mesures de réflectivités ont été réalisées en supposant que la réflexion des échantillons de PET était totalement spéculaire. Une perspective intéressante serait d'utiliser un spectromètre IR doté d'une sphère intégrante afin de mesurer le pourcentage de spécularité réel des échantillons. D'autre part, les propriétés radiatives ont été mesurées à la température ambiante (soit approximativement 20 °C). Une autre perspective serait de mesurer les propriétés radiatives du PET pour des températures plus proches de celles obtenues en fin de chauffage, i.e. environ 100°C. Une des problématiques relatives à ce type de mesure réside dans la cristallisation thermique du PET, qui pourrait engendrer des centres diffusants susceptibles de perturber les mesures. Enfin, nous avons montré que la loi de Beer-Lambert, utilisée pour calculer l'absorption du rayonnement dans la préforme, n'était valable qu'en adoptant les hypothèses du milieu froid et non-diffusant. L'hypothèse du milieu froid est bien vérifiée dans le cadre du chauffage IR d'une préforme en PET pour l'injection-soufflage. En revanche, l'hypothèse du milieu non-diffusant reste un sujet ouvert. La problématique consiste à déterminer si, dans le cadre de l'injection-soufflage, le chauffage IR peut générer des centres diffusants (structures cristallines de type sphérolitique) suffisamment nombreux pour diffuser significativement le rayonnement IR dans la préforme.

Dans un second temps, nous avons mis en œuvre le modèle de chauffage développé au laboratoire, afin de simuler le conditionnement thermique d'une préforme en PET. Les résultats numériques ont été validés expérimentalement à l'aide de mesures de température réalisées sur un pilote de laboratoire. Cette étude démontre que le modèle est capable de prédire l'évolution de la température de la préforme au cours du temps, ainsi que le profil de température longitudinal de la préforme, avec une *erreur inférieure à 5%*.

En conclusion, cette étude a permis de mettre en évidence la fiabilité du modèle dans la perspective d'intégrer ce dernier dans une boucle d'optimisation. Nous disposons d'un outil

numérique permettant de relier les paramètres de réglage du four IR à la distribution 3D de température de la préforme en fin de chauffage. Toute la problématique consiste à présent à définir les objectifs de l'optimisation. Comment définir la distribution de température optimale pour la préforme ?

Il est clair que cette distribution de température optimale est fortement dépendante des conditions de mise en forme (paramètres de soufflage), ainsi que de la géométrie du problème (design de la préforme et du moule). Il est donc difficile de dissocier l'étape de chauffage de celle de mise en forme. D'autre part, un critère majeur permettant de juger de la qualité d'une bouteille demeure *la répartition d'épaisseurs* de cette dernière. Il est donc a priori plus simple d'identifier une répartition d'épaisseurs optimale. Cette nécessité de prédire la distribution d'épaisseur de la bouteille finale est à l'origine du développement d'un modèle numérique destiné à la simulation de l'étape de mise en forme. La présentation de ce modèle fait l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 3

Simulation thermo-mécanique de l'étape de soufflage

Comme nous l'avons évoqué en conclusion du chapitre précédant, l'optimisation du chauffage IR requiert une vision globale du procédé. En effet, la distribution de température optimale de la préforme à la sortie du four IR dépend fortement des paramètres de réglage adoptés sur la machine de soufflage. Un des critères permettant d'apprécier la qualité d'une bouteille demeure sa distribution d'épaisseur. Par conséquent, il est d'un intérêt majeur d'étudier l'influence de la température de la préforme sur la répartition d'épaisseur de la bouteille. Dans ce but, nous avons développé des simulations numériques de l'étape de soufflage. Notre objectif final est de coupler ces simulations avec un algorithme d'optimisation afin de déterminer la distribution de température optimale de la préforme. L'objet de ce chapitre est de présenter le modèle numérique développé pour simuler l'étape de soufflage.

Dans un premier temps, nous abordons la modélisation du comportement rhéologique du PET, qui apparaît clairement comme un point capital du modèle. L'objectif est d'appréhender le comportement mécanique du PET en élongation, et d'identifier une loi de comportement adaptée parmi celles proposées dans la littérature.

Le second volet de ce chapitre est consacré à la mesure des différentes conditions aux limites mécaniques et thermiques requises pour les simulations.

Enfin, nous présentons une validation des résultats numériques par comparaison avec des mesures d'épaisseurs et de pressions réalisées sur un pilote de laboratoire.

Table des matières

3.1	Implantation d'une loi de comportement dans ABAQUS®	61
3.1.1	Introduction : objectifs de l'étude.....	61
3.1.2	Comportement mécanique du PET amorphe dans la gamme de températures de mise forme	62
a)	Un état majoritairement caoutchoutique	62
b)	Influence de la température et de la vitesse de déformation	62
c)	Influence du type de sollicitation.....	64
d)	Un comportement visco-hyperélastique.....	64
3.1.3	Modélisation du comportement du PET pour l'injection-soufflage.....	65
a)	Lois de type viscoélastique.....	65
b)	Lois de type hyperélastique	66
c)	Modèles hybrides vitreux-caoutchoutique (visco-hyperélastique).....	66
d)	Lois de type viscoplastique.....	68
e)	Modélisation de la thermodépendance.....	68
f)	Synthèse	69
3.1.4	Choix d'une loi de comportement	70
a)	Caractéristiques recherchées.....	70
b)	Loi de G'Sell modifiée	70
3.1.5	Identification des paramètres constitutifs de la loi de G'Sell modifiée	72
a)	Présentation des essais de traction équi-biaxiale.....	72
b)	Identification de l'indice de pseudo-plasticité.....	73
c)	Identification de la consistance K ($T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$) à la température de référence.....	76
d)	Identification de la thermodépendance	80
3.1.6	Validation de l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®	84
a)	Traction uniaxiale à vitesse de traverse constante.....	85
b)	Soufflage d'une membrane hémisphérique	89
c)	Conclusion sur la validation de l'implantation de la loi de comportement	92
3.1.7	Conclusion sur l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®	92
3.2	Mesure des conditions aux limites	94
3.2.1	Introduction : présentation du pilote de soufflage.....	94
3.2.2	Mesure de la pression et du débit de soufflage	95
3.2.3	Mesure de la distribution de température de la préforme	99
3.2.4	Mesure de la Résistance Thermique de Contact (RTC) préforme/moule	100
a)	Définition de la RTC	100
b)	Revue bibliographique sommaire	100
c)	Principe général de la mesure	101

d)	Mesure de la température de surface de la préforme.....	102
e)	Mesure de la densité de flux de chaleur à l'interface préforme/moule	104
f)	Calcul du coefficient d'échange / influence de la pression de soufflage nominale	106
3.2.5	Conclusion sur les mesures des conditions aux limites	108
3.3	Simulation numérique de l'étape de soufflage	109
3.3.1	État de l'art.....	109
3.3.2	Points clefs du modèle développé avec le logiciel ABAQUS®	110
a)	Le problème thermomécanique	110
b)	Options choisies pour la résolution numérique	113
c)	Calcul de la pression de soufflage	113
d)	Maillage de la préforme	115
3.3.3	Simulation numérique du soufflage d'une bouteille 50 cl à fond plat.....	116
a)	Configuration adoptée.....	116
b)	Validation des résultats numériques	117
3.3.4	Conclusion sur la validation des résultats numériques	120
3.4	Conclusion partielle.....	121

3.1 Implantation d'une loi de comportement dans ABAQUS®

3.1.1 Introduction : objectifs de l'étude

Le succès que connaît aujourd'hui le PET dans le domaine de l'emballage, et plus particulièrement dans la fabrication de bouteilles en plastique, est dû en grande partie à ses propriétés mécaniques et rhéologiques. De ce point de vue, les principaux attraits du PET sont les suivants [GOR-2001a] :

- Son aptitude à l'étirage : rappelons que le procédé d'injection-soufflage met en jeu des déformations pouvant atteindre 400 %.
- Le renforcement de ses propriétés mécaniques dû à la cristallisation induite et à l'orientation moléculaire développées sous l'effet de la déformation [MAR-2003].
- Le durcissement structural que manifeste le PET lorsqu'il est sollicité en élongation. Ce durcissement, qui semble découler de l'orientation moléculaire et/ou de la cristallisation induite ([WEL-1998], [MAH-2000], [GOR-2001b], [DUP-2005]) permet de réguler les épaisseurs par auto-consolidation du matériau au cours de la déformation. Ce point est capital compte tenu de la relation étroite entre la qualité de la bouteille et la régularité de son épaisseur [BER-1999].

Les propriétés macroscopiques évoquées ci-dessus sont étroitement liées à l'évolution de la microstructure du PET au cours de sa mise en forme. Ce sujet fait l'objet de nombreux travaux et dépasse le cadre de notre étude.

La rhéologie du PET joue donc un rôle majeur dans la modélisation du procédé d'injection-soufflage. Toutefois, l'étude approfondie du comportement rhéologique du PET dépasse le cadre de nos travaux, et serait incompatible avec la réalisation de l'ensemble des objectifs fixés. C'est pourquoi nous avons fait le choix de nous appuyer sur des résultats bibliographiques afin de choisir, d'identifier, et d'implémenter une loi de comportement dans ABAQUS®. Nos objectifs sont donc les suivants :

- Sélectionner une loi de comportement adaptée (selon des critères que nous définirons ultérieurement) disponible dans la littérature, tout en précisant ses avantages et ses inconvénients.
- Identifier les paramètres constitutifs de cette loi de comportement à partir de résultats expérimentaux disponibles dans la littérature.
- Implanter la loi de comportement dans le logiciel ABAQUS®, puis valider l'implantation à l'aide de solutions analytiques de référence.

Dans le paragraphe suivant, nous présentons les principales caractéristiques du comportement du PET en élongation.

3.1.2 Comportement mécanique du PET amorphe dans la gamme de températures de mise forme

a) Un état majoritairement caoutchoutique

Industriellement, le soufflage de bouteilles en PET est généralement réalisé entre 90 et 110°C. Cette plage de température de mise en œuvre se trouve limitée, aux basses températures, par la transition α , et aux hautes températures, par l'apparition d'une phase cristalline thermiquement activée [GOR-2001a]. Ces deux limites, qui dépendent en outre de la vitesse de sollicitation, marquent un changement profond du comportement du PET amorphe, avec notamment une chute des modules élastique et visqueux (FIG. 3.1).

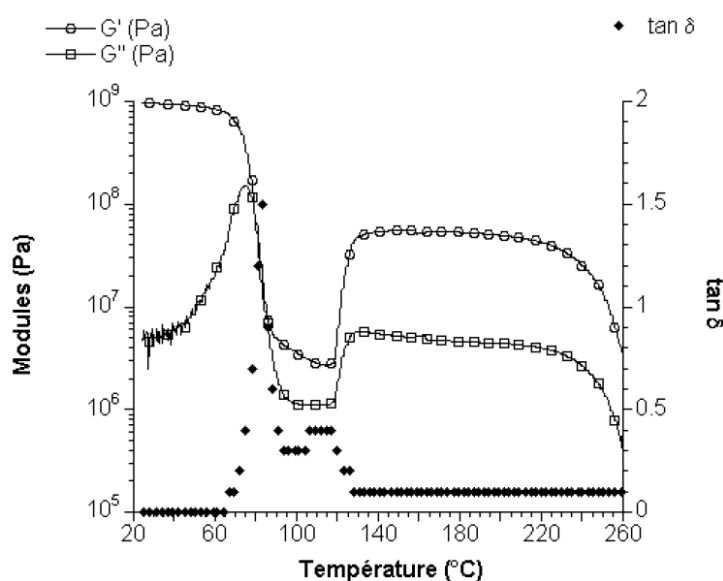


FIG. 3.1 - Mesure du module élastique G' et du module visqueux G'' du PET T74F9. Mesures de torsion à $1\text{rad}\cdot\text{s}^{-1}$ avec un chauffage à $1^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ [GOR-2001a]

Dans la gamme de températures de formage, le PET possède un comportement majoritairement caoutchoutique auquel se superpose une composante visqueuse non négligeable [DEL-2006]. Cet état est caractérisé par une forte élasticité (chute du module élastique sur le plateau caoutchoutique), ainsi qu'une dépendance à la vitesse de déformation du fait de la nature visqueuse du PET. De plus, ce comportement est fortement affecté par la température.

b) Influence de la température et de la vitesse de déformation

Le comportement du PET en grandes déformations peut être mis en évidence par le biais d'essais de traction. La FIG. 3.2 illustre des résultats obtenus par [GOR-2001a] à partir d'essais de traction uni-axiale réalisés sur des éprouvettes sablier.

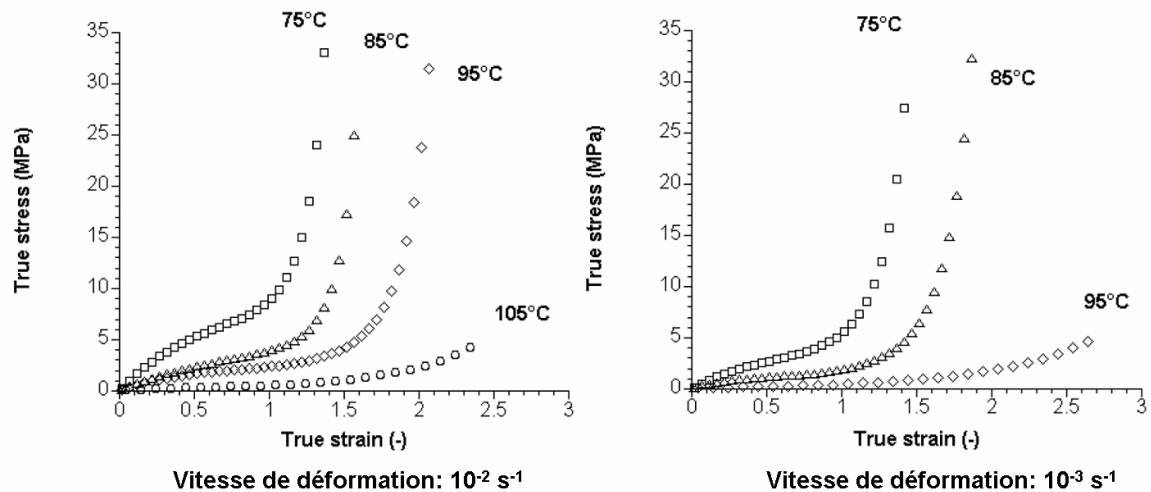


FIG. 3.2 - Courbes expérimentales contrainte vraie – déformation vraie obtenues lors de la déformation uni-axiale d'éprouvettes sablier en PET [GOR-2001a]

L'analyse des ces essais conduit aux observations suivantes :

- Tout d'abord le comportement du PET en grandes déformations est fortement non-linéaire.
- La température, ainsi que la vitesse de déformation, affectent considérablement le comportement du PET.
- Au delà d'une déformation critique, la contrainte augmente brutalement, signe du durcissement structural évoqué précédemment. Ce durcissement est d'autant plus important et il apparaît pour des déformations d'autant plus faibles que la température est faible, ou la vitesse de déformation élevée.

Le couple température/vitesse de déformation joue donc un rôle déterminant sur le comportement du PET. Certains auteurs proposent de distinguer trois types de régimes en fonction des valeurs de ces deux paramètres [MAH-2000], [BIL-2002] :

- Un comportement dit « vitreux », à basse température et/ou haute vitesse. Le comportement est rigide, et le durcissement structural précoce (voir par ex. courbe à 75°C et 10^{-2} s^{-1} FIG. 3.2).
- Un comportement dit « fluide », à haute température et/ou basse vitesse. Le comportement est peu rigide sans durcissement notable (voir par ex. courbe à 105°C et 10^{-2} s^{-1} FIG. 3.2).
- Un comportement intermédiaire dit « caoutchoutique », caractérisé par une faible rigidité initiale et un durcissement structural (voir par ex. courbe à 95°C et 10^{-2} s^{-1} FIG. 3.2).

c) Influence du type de sollicitation

Le comportement mécanique du PET dépend du type de sollicitation. En effet, pour des conditions d'étirage identiques, la réponse sous sollicitation bi-axiale présente un niveau de contrainte plus élevé et un durcissement plus précoce que pour une sollicitation uni-axiale [MAR-2003], [MAR-2005], tel que l'illustre la FIG. 3.3.

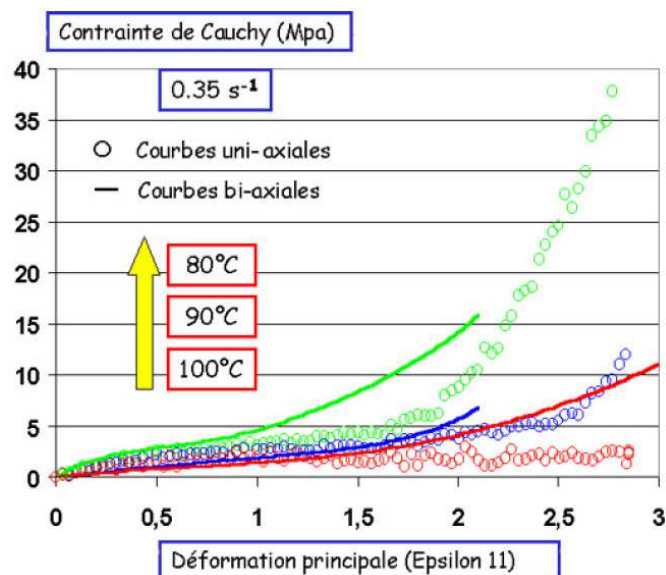


FIG. 3.3 - Comportement du PET en élongation pour des sollicitations uni-axiales et équi-bi-axiales [MAR-2003]

Le comportement du PET est donc anisotrope. Le séquençage utilisé lors de la mise en forme d'une bouteille (i.e. le délai entre l'étirage de la préforme et son présoufflage) a donc un impact direct sur le comportement mécanique du PET.

d) Un comportement visco-hyperélastique

Lors d'un essai de traction, un fort retour élastique est observé après cessation de la contrainte. Pour des vitesses de déformation élevées et des temps courts, la recouvrance de la déformation peut être quasi-totale [SCH-1995]. Cette forte réversibilité est caractéristique du comportement caoutchoutique du PET, et révèle sa nature hyperélastique.

De plus, il a été démontré que la composante viscoélastique du comportement du PET est relativement faible dans les gammes de température et de vitesse de formage [MAT-1997]. Autrement dit, les temps caractéristiques de mise en forme du procédé d'injection-soufflage sont suffisamment faibles pour que la viscoélasticité du PET ne joue pas un rôle significatif. Ceci n'est pas le cas des procédés « plus lents », tels que l'extrusion, pour lesquelles la viscoélasticité des polymères à l'état fondu joue un rôle fondamental [AGA-1996].

Par conséquent, le comportement du PET peut être qualifié de visco-hyperélastique, du fait de sa dépendance à la vitesse de déformation et de son hyperélasticité.

En résumé, les principaux paramètres affectant le comportement du PET dans son état caoutchoutique sont les suivants :

- La vitesse de déformation (nature visqueuse du PET).
- La température.
- La déformation (durcissement structural).
- Le type de sollicitation (anisotropie).
- Le temps (visco-élasticité) lorsque les vitesses de déformation sont faibles et les durées de sollicitation élevés.

De plus, le comportement du PET varie sensiblement en fonction du type de résine (i.e. du grade de PET) [DEL-2006].

3.1.3 Modélisation du comportement du PET pour l'injection-soufflage

La grande diversité des approches existantes pour modéliser le comportement rhéologique du PET révèle qu'il est difficile d'établir une loi de comportement adaptée à un large spectre de conditions de mise en œuvre (température, vitesse de déformation, type de sollicitation etc...). De manière synthétique, les approches adoptées peuvent être regroupées en quatre catégories : les modèles de type *viscoélastique*, *hyperélastique*, *viscoplastique*, et enfin les modèles *hybrides visco-hyperélastique*. Dans le paragraphe suivant, nous présentons les grandes caractéristiques de ces familles de lois de comportement, en mettant l'accent sur leurs avantages et inconvénients. Une synthèse est présentée dans la TAB. 3.1 (p. 69). Soulignons que notre objectif n'est pas de réaliser une revue exhaustive des modèles existants, mais de présenter un état de l'art des lois mises en œuvre pour simuler le procédé d'injection-soufflage.

a) Lois de type viscoélastique

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le durcissement structural du PET est relativement faible pour des températures élevées et des vitesses de déformation faibles. Dans ce cas, le comportement du PET s'apparente à celui d'un liquide élastique (régime d'écoulement). Pour cette raison, certains auteurs proposent d'utiliser des lois de comportement de type liquide-élastique (viscoélastique). Une revue détaillée des lois de comportement viscoélastiques les plus répandues est présentée par [SCH-1995].

Parmi elles, nous pouvons citer la loi K-BKZ, utilisée par [PAR-2003] afin de simuler l'étirage-soufflage d'une préforme. F. Schmidt, quant à lui, a implémenté les lois de Johnson-Segalman, et d'Oldroyd dans le logiciel Forge2® [SCH-1998]. Les résultats démontrent que ces lois sont capables de prédire correctement l'état de contrainte dans la préforme, et permettent d'aboutir à des répartitions d'épaisseurs conformes à celles obtenues expérimentalement. Cependant, les cinématiques de mise en forme ne sont pas représentatives de la réalité, de même que les simulations de soufflage libre (i.e. sans canne d'étirage, ni moule).

Ceci met en évidence la principale lacune de ce type de lois, qui demeure la mauvaise prise en compte du durcissement structural. Pour pallier ce problème, certains auteurs proposent de modifier la viscosité au cours de l'étirage, en la rendant par exemple dépendante de la déformation [SCH-1995], [MAR-2003].

b) Lois de type hyperélastique

Généralement utilisées pour les matériaux élastomères, les modèles hyperélastiques se sont naturellement imposés pour décrire le comportement caoutchoutique du PET. Ce choix se justifie par la recouvrance importante observée après cessation de contrainte (lors d'un essai de traction par ex.), qui laisse présager une influence prépondérante de l'élasticité. Un des atouts de ce type de lois est la bonne représentation du durcissement structural. En revanche, du fait de leur nature purement élastique, elles ne prennent pas en compte l'influence de la vitesse de déformation. Leur caractère non-dissipatif rend impossible la prise en compte du phénomène de dissipation visqueuse (i.e. auto-échauffement du matériau lors de sa déformation). Du point de vue numérique, les lois hyperélastiques sont généralement moins stables que les lois à composante visqueuse, notamment en présence de fortes non-linéarités [VER-1997], [MEN-2001], [CHE-2002], [MER-2006], [CHA-2007]. Des revues détaillées des modèles hyperélastiques les plus répandus sont présentées par [SCH-1995] et [CHA-2007].

A ce jour, les lois hyperélastiques les plus couramment utilisées pour la simulation du procédé d'injection-soufflage sont les lois d'Ogden [MAR-1999], [MEN-2001], [LAR-2001], et de Mooney-Rivlin [YUA-2000], [CHA-2005]. Ces lois phénoménologiques possèdent un nombre restreint de paramètres constitutifs, ce qui facilite leur identification. Cependant, leur incapacité à prendre en compte la dépendance temporelle de la déformation rend impossible la description de la cinématique de mise en forme. De plus, elles ne rendent pas compte de la nature visqueuse du PET.

c) Modèles hybrides vitreux-caoutchoutique (visco-hyperélastique)

Afin de prendre en compte l'effet de la vitesse de déformation, il est possible d'ajouter une composante visqueuse dissipative à un modèle hyperélastique. Les modèles hybrides obtenus

par ce biais sont donc visco-hyperélastiques. Ces modèles, développés spécifiquement pour les polymères tels que le PET, sont à ce jour les plus aboutis. Ils permettent de modéliser le comportement du PET amorphe sur une large plage de vitesse et de température, notamment lors de son passage de l'état vitreux à l'état caoutchoutique. Leur identification demeure néanmoins délicate, et leur implantation dans des logiciels de calcul difficile.

Généralement, la contribution hyperélastique est modélisée par des lois issues de la théorie de la dynamique moléculaire. Parmi elles, nous pouvons citer le modèle de Ball [BAL-1981], qui fut par la suite étendu par Edwards et Vilgis [EDW-1986]. Une présentation détaillée de ces modèles est proposée par [GOR-2001a]. Ces approches présentent l'avantage majeur de relier les propriétés mécaniques macroscopiques du PET, à l'évolution de sa microstructure au cours de la mise en forme.

La composante visqueuse, quant à elle, est généralement associée en parallèle avec la composante hyperélastique selon une modélisation de type Zener [BUC-1995], [GOR-2001a], [MAR-2003]. L'association de composantes visqueuses, élastiques, et hyperélastiques donne naissance à différents modèles, notamment celui proposé par [PHA-2004] qui fut mis en œuvre par [THI-2007] pour simuler le procédé d'étirage-soufflage. Un autre exemple est le modèle de Buckley [BUC-1995], dont une représentation analogique est illustrée par la FIG. 3.4.

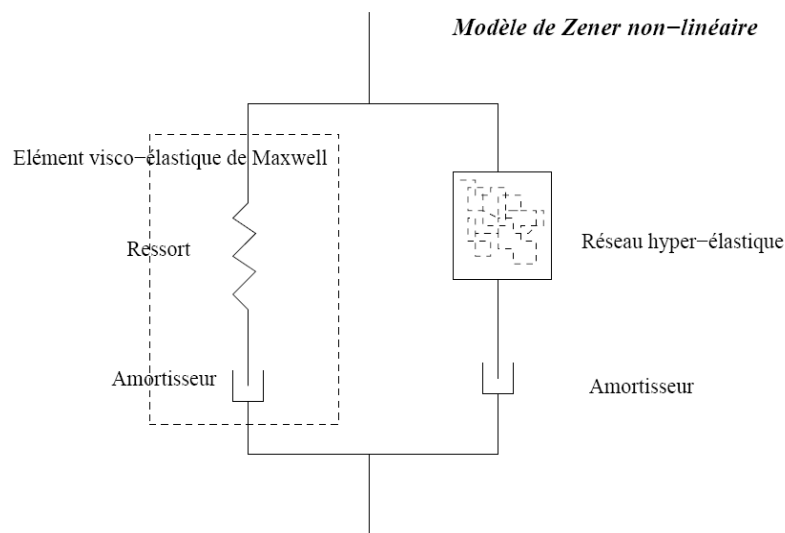


FIG. 3.4 - Représentation analogique du modèle hybride vitreux-caoutchoutique de Buckley – Figure extraite de [GOR-2001a]

Le modèle de Buckley est mis en œuvre par [MCE-1998], [YAN-2004], [TAN-2008] pour simuler le procédé d'étirage-soufflage. [MEN-2001] propose une comparaison de ce modèle avec la loi hyperélastique d'Ogden. Selon ses conclusions, la distribution d'épaisseur de la bouteille est plus conforme aux mesures expérimentales avec le modèle de Buckley. Il souligne

cependant que les temps de calcul avec le modèle de Buckley (environ 48h pour le cas présenté) sont considérablement plus importants que ceux obtenus avec la loi d'Ogden (environ 10 min pour le même cas).

d) Lois de type viscoplastique

Les lois viscoplastiques sont couramment utilisées pour la simulation du procédé d'étirage-soufflage [WAN-2000], [CHE-2006a], [MIR-2007], [BOR-2007a], [COS-2008]. L'origine de ce succès est sans aucun doute leur capacité à prendre en compte à la fois la vitesse de déformation et le durcissement structural du PET, tout en conservant un formalisme simple. Généralement, les lois viscoplastiques s'intègrent plus facilement dans les logiciels de calcul que les modèles hyperélastiques. De plus, elles provoquent moins d'instabilités numériques [CHA-2007], et induisent des temps de calculs intermédiaires entre les lois hyperélastiques et les lois de type vitreux-caoutchoutique telles que la loi de Buckley [MEN-2001]. D'autre part, l'accès à la viscosité offre différentes possibilités d'intégration de modèle de cristallisation. A titre d'exemple, L. Chevalier propose de relier la viscosité au taux de cristallisation du PET [CHE-2006a]. B. Cosson, quant à lui, propose de définir une viscosité orthotrope pour prendre en compte la dépendance du comportement du PET au type de sollicitation [COS-2008].

Par nature, les modèles viscoplastiques ne prennent pas en compte l'élasticité du PET (toute déformation est considérée comme étant irréversible). L'argument généralement avancé pour justifier l'emploi de tels modèles est que le retour élastique observé lors de la mise en forme d'une bouteille par étirage-soufflage est relativement faible. En effet, la préforme, une fois soufflée, est maintenue en contact avec le moule à l'aide d'une pression de maintien. Le but est d'abaisser la température de la bouteille en dessous de la température de transition vitreuse du PET, afin de limiter la recouvrance de la déformation lors de la phase d'éjection.

Une des principales lacunes des modèles viscoplastiques est leur incapacité à représenter le comportement du PET sur une large gamme de températures et de vitesses. Pour élargir la gamme de mise en œuvre, il est possible d'augmenter le nombre de paramètres constitutifs. Cependant, ceci réduit le sens physique du modèle, et rend le processus d'identification plus difficile.

e) Modélisation de la thermodépendance

La thermodépendance est généralement intégrée dans la loi de comportement via un ou plusieurs coefficients correcteurs (appelés facteurs de glissement). Bien que certains auteurs proposent des thermodépendances de type polynomial [WAN-2000], les lois d'Arrhénius [LAR-2001], [THI-2007], [MIR-2007] et de Williams, Landel et Ferry (WLF) [SCH-1995], [MAR-

1999], [PAR-2003], [BOR-2007a] sont les plus couramment adoptées. Nous présenterons ces deux dernières lois ultérieurement.

f) Synthèse

La TAB. 3.1 illustre de manière synthétique les avantages et inconvénients des différentes familles de lois de comportement que nous avons présentées.

Type de loi	Avantages	Inconvénients
Viscoélastique	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prise en compte de la vitesse ▪ Prise en compte de l'élasticité 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Pas de prise en compte du durcissement ▪ Difficulté de mise en œuvre dans un logiciel de calcul
Hyperélastique	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Bonne représentation du durcissement ▪ Prise en compte de l'élasticité ▪ Temps de calcul très faibles (sous réserve d'une bonne convergence) ▪ Nombreuses données matériaux dans la littérature 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Pas de prise en compte de la vitesse ▪ Non-dissipatif : pas d'échauffement par dissipation visqueuse ▪ Difficulté de mise en œuvre dans un logiciel de calcul ▪ Instabilités numériques
Hybride (visco-hyperélastique)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prise en compte de la vitesse ▪ Prise en compte de l'élasticité ▪ Bonne représentation du durcissement ▪ Sens physique : lien avec la microstructure 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Identification difficile ▪ Difficulté de mise en œuvre dans un logiciel de calcul ▪ Temps de calcul très importants
Viscoplastique	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prise en compte de la vitesse ▪ Prise en compte du durcissement ▪ Simplicité de mise en œuvre dans un logiciel de calcul ▪ Stabilité numérique ▪ Accès à la viscosité : possibilité d'intégration de modèle de cristallisation ▪ Nombreuses données matériaux dans la littérature 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Pas de prise en compte de l'élasticité ▪ Difficulté à représenter une large gamme de températures, de vitesses, et de déformations

TAB. 3.1 - Avantages et inconvénients des familles de lois de comportement

3.1.4 Choix d'une loi de comportement

a) Caractéristiques recherchées

Les simulations de soufflage que nous souhaitons mettre en œuvre sont destinées à être intégrées dans une boucle d'optimisation entièrement automatisée. Dans ce contexte particulier, nous recherchons une loi de comportement assurant d'une part des temps de calcul modérés, et d'autre part des simulations robustes. En effet, la divergence d'un des calculs élément-finis aurait un effet dramatique sur la convergence de l'algorithme d'optimisation. D'autre part, une optimisation complète peut nécessiter plusieurs dizaines de simulations directes (i.e. de simulations élément-finis) avant de converger vers une solution. C'est pourquoi il est primordial de limiter les temps de calcul.

Pour les raisons évoquées ci-dessus, nous avons choisi d'écarter les lois de comportement hybrides de type vitreux-caoutchoutique, ainsi que les lois hyperélastiques. Bien qu'ils soient à ce jour les plus aboutis, les modèles hybrides impliquent des temps de calculs très importants [MEN-2001]. Quant aux lois hyperélastiques, il est reconnu qu'elles génèrent plus d'instabilités numériques que les lois possédant une composante visqueuse [VER-1997], [MEN-2001], [CHE-2002], [MER-2006], [CHA-2007].

C'est donc naturellement que notre choix s'est porté sur un modèle viscoplastique. D'après notre étude bibliographique préliminaire, ces modèles semblent fournir un bon compromis entre précision et temps de calcul, tout en assurant une bonne stabilité numérique.

b) Loi de G'Sell modifiée

Les lois viscoplastiques mises en œuvre pour modéliser le comportement du PET sont généralement basées sur la loi de Norton-Hoff (loi puissance), qui sous sa forme tensorielle s'écrit :

$$S = 2K(T, \bar{\epsilon}, \dots) \left(\sqrt{3} \dot{\bar{\epsilon}} \right)^{m-1} \dot{\bar{\epsilon}} \quad (3.1)$$

Cette loi relie le tenseur déviateur des contraintes S à celui des vitesses de déformation $\dot{\bar{\epsilon}}$, au travers de la consistance K , de la sensibilité à la vitesse de déformation m , et de la vitesse de déformation équivalente définie par :

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} \sum_{i,j} \dot{\epsilon}_{ij}^2} \quad (3.2)$$

La consistance K peut être définie en fonction de différents paramètres tels que la température, la déformation, le taux de cristallisation, etc... C'est la définition de cette fonction qui différencie les modèles présentés dans la littérature.

Le durcissement structural peut être pris en compte en rendant la consistance dépendante de la déformation cumulée, via des termes d'écrouissage. De nombreuses approches phénoménologiques sont proposées dans la littérature [TIL-1998], [Wan-2000], [GOR-2001a], [CHE-2006a], [CHA-2007]. Ces approches sont généralement inspirées du modèle proposé par G'Sell [GSE-1979]. A l'image des auteurs référencés ci-dessus, nous proposons de mettre en œuvre une loi de comportement de type G'Sell modifiée. Exprimée en contrainte et déformation équivalente, cette loi s'écrit :

$$\begin{cases} \bar{\sigma} = \sqrt{3}^{m+1} K (\dot{\bar{\epsilon}})^m \\ K = k_0(T) (1 - \exp(-A\bar{\epsilon})) \exp(B\bar{\epsilon}^C) \end{cases} \quad (3.3)$$

où la déformation cumulée est définie par :

$$\bar{\epsilon} = \int_0^t \dot{\bar{\epsilon}} dt \quad (3.4)$$

La contrainte équivalente est définie au sens de Von Mises :

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{3}{2} \sum_{i,j} S_{ij}^2} \quad (3.5)$$

où S représente le tenseur déviateur des contraintes défini par l'équation (3.1).

L'équation (3.3) est une loi viscoplastique isotrope. Elle relie la contrainte équivalente $\bar{\sigma}$ à la vitesse de déformation équivalente $\dot{\bar{\epsilon}}$ par l'intermédiaire des paramètres constitutifs suivants :

- m : indice de sensibilité à la vitesse de déformation
- k_0 : consistance
- A, B, C : termes d'écrouissage

La thermodépendance est prise en compte par le biais d'un facteur de glissement noté a_T , calculé suivant la loi de Williams, Landel et Ferry (WLF) [WIL-1955], valable dans la gamme de température $[T_g, T_g+100^\circ\text{C}]$ [AGA-1996] :

$$k_0(T) = k_0(T_{REF}) a_T = k_0(T_{REF}) \exp\left(-\frac{C_1(T - T_{REF})}{C_2 + T - T_{REF}}\right) \quad (3.6)$$

où les constantes C_1 et C_2 sont identifiées à la température de référence T_{REF} .

Dans le paragraphe suivant, nous exposons la méthode mise en œuvre pour identifier l'ensemble des paramètres constitutifs de la loi de comportement adoptée.

3.1.5 Identification des paramètres constitutifs de la loi de G'Sell modifiée

a) Présentation des essais de traction équi-biaxiale

Afin d'identifier les paramètres constitutifs de la loi de comportement (2.3), nous nous appuyons sur des résultats d'essais de traction équi-biaxiale réalisés par Y. Marco durant ses travaux de thèse [MAR-2003]. Ces essais ont été réalisés à l'aide d'une machine de sollicitation triaxiale ASTREE développée au LMT-Cachan (FIG. 3.5).

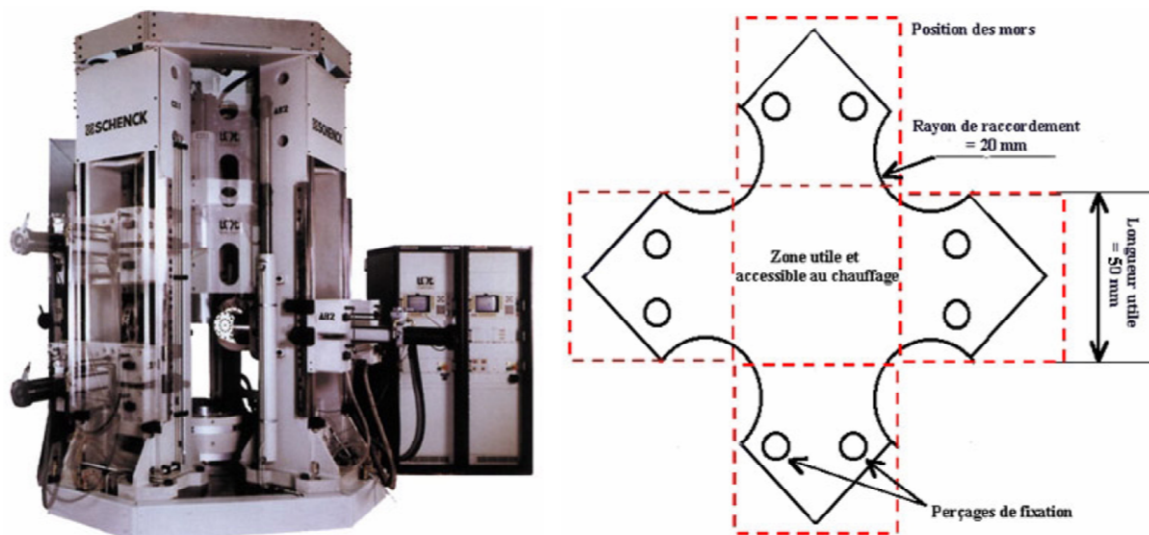


FIG. 3.5 - Vue générale de la machine tri-axiale ASTREE et géométrie des éprouvettes cruciformes – Figure extraite de [MAR-2003]

Les éprouvettes sont injectées sous forme de plaques, puis usinées pour obtenir la forme en croix illustrée par la FIG. 3.5. Elles présentent un taux de cristallinité inférieur à 3%, et possèdent donc un état structural similaire à celui d'une préforme. La dénomination du PET utilisé est le « PET Eastman-Kodak 9921W » ($IV=0.8$).

Le chauffage des éprouvettes est assurée par un four infrarouge muni de lampes quartz Philips 2 kW, et d'un réflecteur. Ce type de chauffage assure d'une part une bonne homogénéité de la température sur la zone utile de l'éprouvette (écart type mesuré sur la température de la zone utile : 1.1°C), et d'autre part des temps de chauffage court, limitant la cristallisation thermique.

Les mesures de champs de déplacement sont réalisées par analyse d'images obtenues à l'aide d'une camera CCD et du logiciel CorrelⁱTM®. La technique d'analyse mise en œuvre permet de mesurer la déformation avec une précision estimée à 5.10^{-2} . Cette technique a permis de mettre en évidence la bonne homogénéité de la déformation sur la diagonale de l'éprouvette. Enfin, il est intéressant de noter qu'un auto-échauffement de 5°C a été mesuré pour les vitesses de traverse les plus élevées.

Les essais ont été réalisés pour trois vitesses de traverse constantes : 15, 30, et 100 mm.s⁻¹, et pour trois températures : 80, 90, et 100 °C. Dans ces conditions, la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ est une fonction décroissante du temps :

$$\dot{\epsilon} = \frac{V}{L} = \frac{V}{L_0 + Vt} \quad (3.7)$$

Où V désigne la vitesse de traverse, L_0 la longueur utile de l'éprouvette à l'instant initial, et L sa longueur au cours du temps. Les vitesses de traverses choisies permettent d'atteindre des vitesses de déformation variant de 0.1 à 4 s⁻¹.

Les résultats bruts des essais réalisés par [MAR-2003] sont illustrés par la FIG. 3.6.

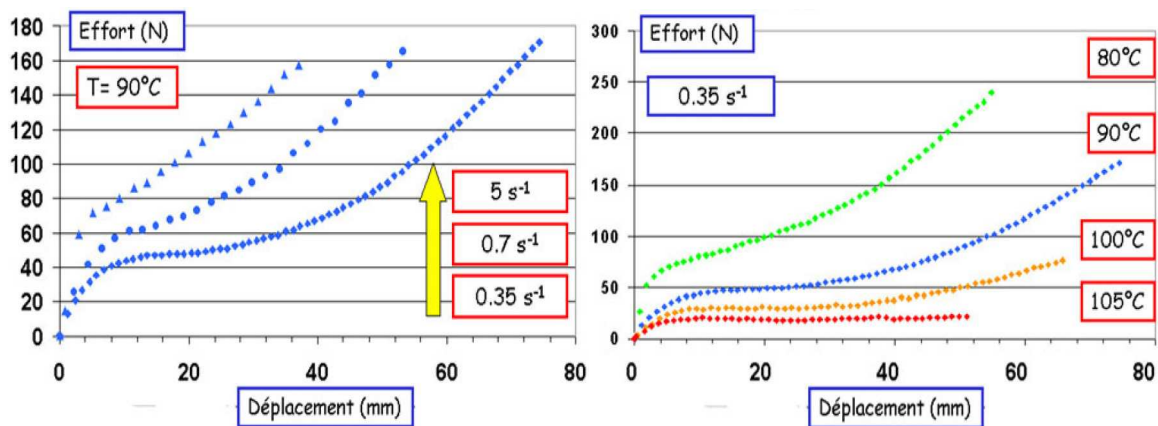


FIG. 3.6 - Courbes effort/déplacement obtenues à partir d'essais de traction équi-biaxiale simultanée – Figure extraite de [MAR-2003]

La procédure d'identification que nous adoptons se décompose en trois étapes :

- Identification de l'indice de sensibilité à la vitesse m par différentiation directe de l'équation (3.3). La valeur identifiée sera conservée dans la suite de la procédure d'identification.
- Identification de la consistance K ($T_{REF} = 90^\circ\text{C}$) (paramètres k_0 , A , B , C) par méthode inverse. Ces paramètres sont déterminés pour une température de référence de 90°C. Leurs valeurs seront alors conservées dans la suite de la procédure.
- Identification de la thermodépendance (paramètres C_1 et C_2) par méthode inverse à partir des essais réalisés à 80-100°C pour une vitesse de traverse de 100 mm.s⁻¹.

b) Identification de l'indice de pseudo-plasticité

D'après l'équation (3.3), le logarithme de la contrainte équivalente s'écrit :

$$\ln(\bar{\sigma}) = \ln(\sqrt{3}K) + m \ln(\sqrt{3}\dot{\bar{\epsilon}}) \quad (3.8)$$

Par conséquent, l'indice de sensibilité à la vitesse de déformation peut être obtenu directement par différentiation de l'équation (3.8) :

$$m = \left. \frac{d \ln(\bar{\sigma})}{d \ln(\sqrt{3}\dot{\bar{\epsilon}})} \right|_{T, \bar{\epsilon} = \text{constante}} \quad (3.9)$$

Pour une température donnée, l'indice m peut être calculé en fonction de la déformation. La FIG. 3.7 illustre les résultats obtenus.

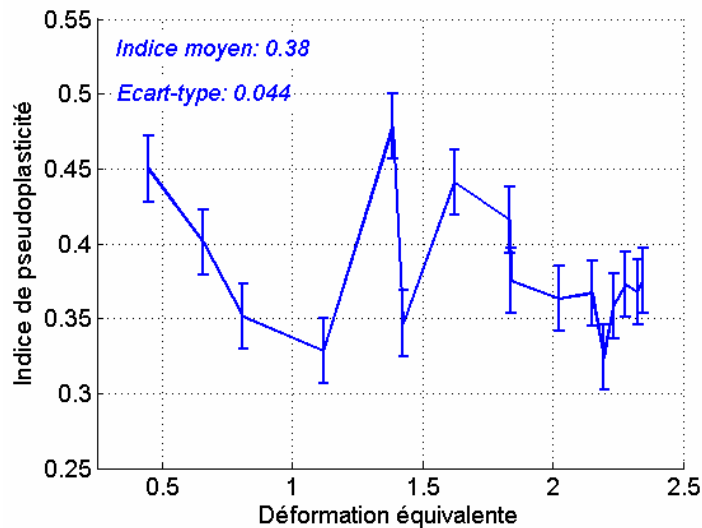


FIG. 3.7 - Identification de l'indice de sensibilité à la vitesse de déformation à 90°C

La valeur de l'indice de sensibilité à la vitesse de déformation fluctue entre 0.35 et 0.45 sur la plage de déformations considérée, avec un écart type de 0.044. Dans la suite de notre étude, nous adoptons une valeur moyenne constante de 0.38.

Nous proposons de vérifier cette valeur en appliquant une méthode alternative proposée par [CHE-2006b]. Cette méthode consiste à rechercher une courbe maitresse pour la fonction consistence $K = f(\bar{\epsilon})$. Pour une sollicitation équi-biaxiale, la consistence s'exprime en fonction de la contrainte équivalente et de la vitesse de déformation équivalente par la relation suivante :

$$K(\bar{\epsilon}) = \frac{\bar{\sigma}(\bar{\epsilon})}{\sqrt{3}^{m+1} \dot{\bar{\epsilon}}^m(\bar{\epsilon})} \quad (3.10)$$

Cette expression fait intervenir l'indice m . La valeur de m affecte la dispersion observée sur la consistance K lorsque l'on modifie la valeur de la vitesse de déformation (FIG. 3.8).

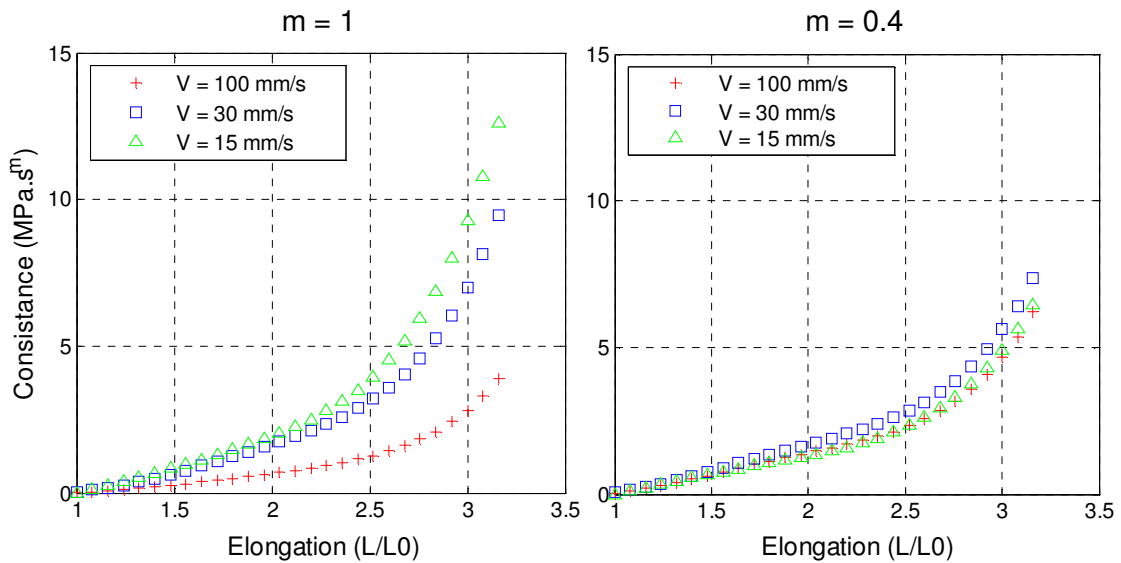


FIG. 3.8 - Influence de l'indice de pseudoplasticité m sur la dispersion de la fonction consistance K à la température de référence $T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$

Le principe de la méthode consiste alors à déterminer la valeur de m minimisant la dispersion sur les courbes $K = f(\bar{\epsilon})$. Tel que l'illustre la FIG. 3.9, la dispersion est minimale lorsque m vaut 0.38, ce qui confirme la valeur calculée par différentiation directe. Cette valeur est aussi en accord avec celle déterminée par [CHE-2006b] à partir des mêmes essais de traction équi-biaxiale.

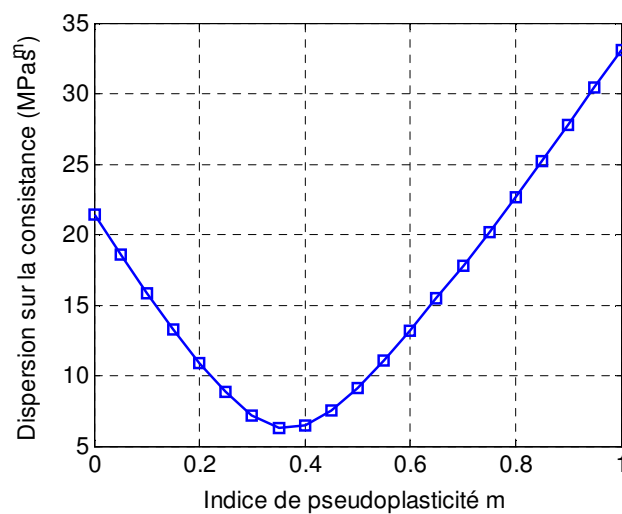


FIG. 3.9 - Optimisation de l'indice de pseudoplasticité par minimisation de la dispersion sur la consistance – Figure extraite de [CHE-2006b]

c) Identification de la consistance K ($T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$) à la température de référence

Les paramètres intervenant dans l'expression de la consistance (k_0 , A , B , C) sont identifiés à la température de référence $T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$. Pour cela, nous adoptons une méthode d'identification inverse dont le principe est illustré par la FIG. 3.10.

Le principe général de cette méthode est de déterminer, à l'aide d'une procédure itérative automatisée, les paramètres de la loi de comportement permettant de minimiser l'erreur entre les résultats analytiques et expérimentaux.

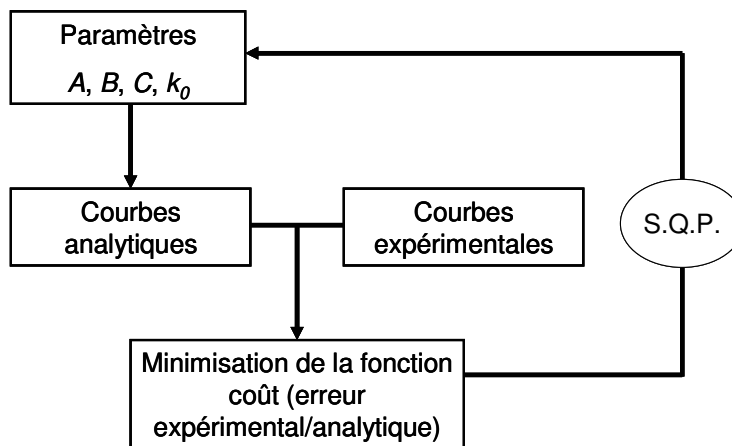


FIG. 3.10 - Principe général de la méthode d'identification inverse

Les principales étapes de cette procédure d'identification sont les suivantes :

1. Choix d'un jeu initial de paramètres constitutifs à identifier.
2. Calcul de la contrainte en fonction de la déformation suivant la loi de G'Sell modifiée (équation (3.3)).
3. Comparaison entre les contraintes calculées analytiquement et les contraintes mesurées. Calcul de l'erreur global au sens des moindres carrés.
4. Mise à jour des paramètres constitutifs par un algorithme d'optimisation.
5. Convergence si le critère d'arrêt est satisfait, sinon retour à l'étape 2.

Cette méthode d'analyse inverse est classiquement adoptée pour l'identification de paramètres rhéologiques. La méthode de dépouillement la plus classique consiste à utiliser des modèles analytiques pour simuler les essais mécaniques. Ces modèles reposent généralement sur des hypothèses simplificatrices (contraintes planes, homogénéité de la déformation, homogénéité de la température, adiabaticité, etc...), et peuvent conduire à des erreurs significatives sur les valeurs des paramètres identifiés, tel que le démontre [BIL-2003]. C'est la raison pour laquelle l'utilisation de logiciels basés sur la méthode des éléments-finis est de plus en plus courante [GAV-1996], [TIL-1998], [LEB-2005], [HMI-2006]. Ces derniers permettent de prendre en compte des phénomènes difficilement calculables analytiquement, tels que l'auto-échauffement

de l'éprouvette au cours de sa déformation, les transferts thermiques entre l'éprouvette et l'environnement, la localisation de la déformation, etc...

Une grande variété d'algorithmes d'optimisation est utilisée pour l'identification par analyse inverse. Nous pouvons citer les algorithmes de Gauss-Newton [GAV-1996], [TIL-1998], les méthodes S.Q.P. ("Sequential Quadratic Programming") [HMI-2006], ou encore la méthode de surface de réponse [LEB-2005]. D. Szeliga [SZE-2004] propose une comparaison entre différents algorithmes d'optimisation utilisés pour identifier une loi de comportement viscoplastique. Il met notamment en œuvre une méthode de type quasi-Newton, une méthode évolutionnaire, ainsi que les algorithmes du gradient conjugué et de Nelder-Mead (simplex non linéaire). Ces algorithmes seront présentés dans le chapitre quatre (consacré à l'optimisation).

Dans notre étude, nous proposons de comparer les contraintes mesurées lors des essais de traction équi-biaxiale avec les contraintes calculées analytiquement à partir de l'équation (3.3).

Les hypothèses adoptées sont donc les suivantes :

- La déformation est homogène sur la zone utile de l'éprouvette.
- La zone utile de l'éprouvette est isotherme, et adiabatique.

L'erreur entre les résultats analytiques et expérimentaux est estimée au sens des moindres carrés d'après la relation suivante :

$$f(X) = \sum_j \sum_i (\bar{\sigma}_{i,j}^c(X) - \bar{\sigma}_{i,j}^m)^2 \quad (3.11)$$

Où $\bar{\sigma}_{i,j}^c$ et $\bar{\sigma}_{i,j}^m$ désignent respectivement les contraintes équivalentes calculées et mesurées. La double somme indique la dépendance de la contrainte à la déformation (somme sur i), ainsi qu'à la vitesse de traverse (somme sur j).

Cette erreur f , appelée fonction coût, dépend du jeu de paramètres constitutifs x que l'on souhaite optimiser. Ces paramètres sont bornés afin de garantir une valeur finie pour la fonction coût. En effet, une valeur très grande du coefficient C engendrerait un durcissement à la fois prématuré et très prononcé. Dans ce cas, la contrainte calculée pourrait atteindre des valeurs infinies aux grandes déformations, et provoquer la divergence de l'algorithme d'optimisation.

Par conséquent, nous cherchons à résoudre le problème d'optimisation suivant :

$$\begin{cases} \min_x f(x), \\ \text{sujet à } x_{\min} \leq x \leq x_{\max} \end{cases} \quad (3.12)$$

Notre problématique est donc de minimiser une fonction non-linéaire, continument différentiable, sous contraintes linéaires. Comme nous le verrons dans le chapitre consacré à l'optimisation, ce type de problèmes peut être résolu par différents algorithmes. Dans notre étude, nous avons opté pour l'algorithme SQP ("Sequential Quadratic Programming") disponible dans le logiciel Matlab®. Selon l'étude réalisée par [SCH-1985], il s'agit d'un des algorithmes les plus performants en programmation mathématique. Basé sur une méthode de type quasi-Newton, cet algorithme du second ordre requiert uniquement le calcul des dérivées premières de la fonction coût (dans notre étude elles sont calculées par différences-finies). Les dérivées secondes (matrice Hessienne) sont estimées par l'algorithme BFGS [FLE-1987].

Nous avons comparé les résultats obtenus avec SQP à ceux obtenus avec l'algorithme de Nelder-Mead (simplex non-linéaire) [NEL-1965]. Ce dernier présente l'avantage de ne pas nécessiter l'évaluation des dérivées de la fonction coût. Ces deux algorithmes seront présentés en détail dans le chapitre quatre (chapitre consacré à l'optimisation).

Les résultats de l'optimisation sont reportés dans la TAB. 3.2.

Paramètres	A	B	C	k_0 (MPa.s ^m)	f (MPa ²)
Initial	1	1	1	1	1292
Final SQP	0.340	0.055	3.890	2.993	38
Final Simplex	0.340	0.055	3.890	2.993	38

TAB. 3.2 - Identification de la consistance : résultat de l'optimisation

La FIG. 3.11 illustre les courbes de convergence obtenues avec les deux algorithmes. Nous pouvons constater que la vitesse de convergence obtenue avec SQP est beaucoup plus importante que celle obtenue avec Nelder-Mead. Après seulement cinq itérations, la valeur de la fonction coût est réduite de plus de 900% avec SQP, tandis qu'elle n'est réduite que de 10% avec Nelder-Mead. Ce résultat est en accord avec les conclusions apportées par [SZE-2004] dans son étude comparative.

Toutefois, le calcul du gradient de la fonction coût (requis par l'algorithme SQP) induit un nombre important d'évaluations du modèle directe. Ceci se traduit par une réduction significative de l'efficacité de l'algorithme si l'on s'intéresse au nombre d'évaluations (FIG. 3.11). Dans le cas présenté ici, l'algorithme du simplex peut devenir aussi efficace que SQP en terme de temps de calcul, tout en conduisant aux mêmes résultats (TAB. 3.2).

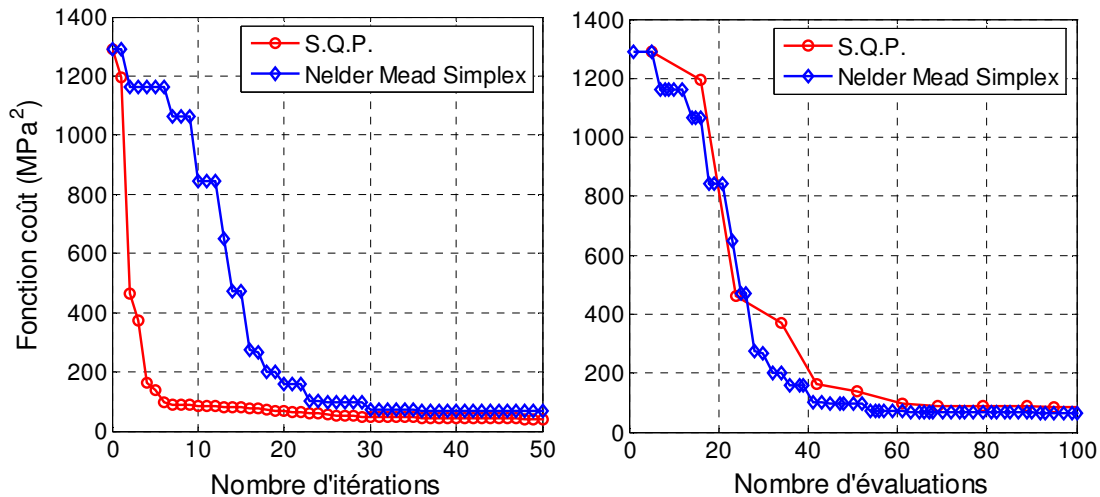


FIG. 3.11 - Identification de la consistance : Courbes de convergence – comparaison des algorithmes SQP et de Nelder-Mead

Le problème d’optimisation (3.12) étant fortement non-linéaire, les résultats de l’identification sont a priori sensibles au choix des conditions initiales. Nous avons étudié l’influence des conditions initiales en réalisant plusieurs séries d’identification. Un échantillon des résultats obtenus est reporté dans la TAB. 3.3.

Paramètres	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	k_0 (MPa.s ^m)	<i>f</i> (MPa ²)	Itérations
Initial (Id. 1)	0.1	0.01	0.1	1	8269	178
Final SQP (Id. 1)	0.340	0.055	3.892	2.996	38	
Initial (Id. 2)	0.5	0.5	0.5	1	6165	179
Final SQP (Id. 2)	0.329	0.054	3.899	3.078	38.15	

TAB. 3.3 - Identification de la consistance : influence des conditions initiales

Nous pouvons constater qu’une modification des paramètres initiaux génère une légère variation des résultats obtenus. Toutefois, cette variation est de l’ordre de 10^{-3} et n’est pas significative. Ce résultat démontre la robustesse de l’algorithme d’optimisation SQP.

La FIG. 3.12 illustre les courbes contraintes/déformations obtenues avec la loi de G’Sell modifiée, pour une température de référence $T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$.

Nous pouvons constater que la loi de comportement fournit une bonne représentation des courbes contrainte/déformation pour des vitesses de déformations comprises entre 0.1 et 4 s^{-1} .

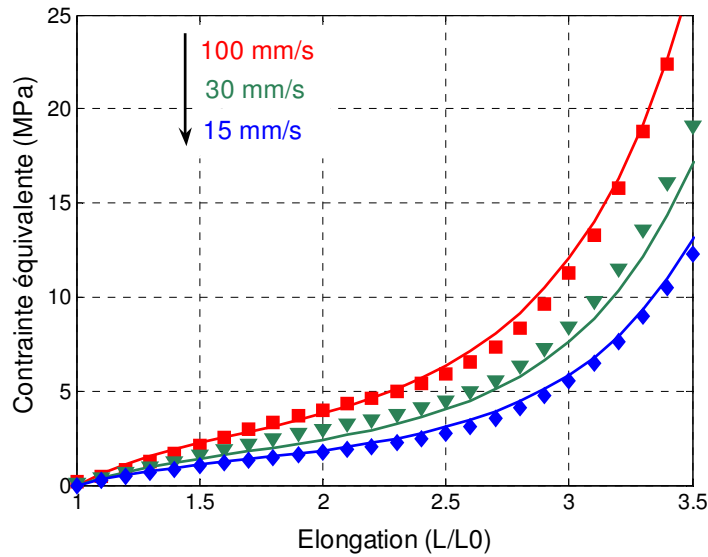


FIG. 3.12 - Courbes contrainte/déformation obtenues avec la loi de G'Sell modifiée pour une température $T_{REF} = 90^{\circ}\text{C}$ – Les marqueurs désignent les points expérimentaux

d) Identification de la thermodépendance

Les paramètres C_1 et C_2 de la loi WLF (équation (3.6)) sont identifiés en appliquant la procédure présentée dans le paragraphe précédent. La base expérimentale utilisée pour l'identification est composée de trois courbes contraintes/déformations mesurées à vitesse de traverse égale à $100 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$, et pour des températures de 80, 90, et 100°C . Les résultats obtenus sont les suivants :

$$\begin{cases} C_1 = 6.7 \\ C_2 = 85^{\circ}\text{C} \end{cases} \quad T_{ref} = 90^{\circ}\text{C} \quad (3.13)$$

Les valeurs des coefficients C_1^g et C_2^g correspondant à la température de transition vitreuse T_g peuvent être obtenues en appliquant les relations suivantes [HAL-1995] :

$$C_2^g = C_2 + T_g - T_{ref} \quad C_1^g = \frac{C_1 C_2}{C_2^g} \quad (3.14)$$

En prenant $T_g = 80^{\circ}\text{C}$ (valeur mesurée pour le PET T74F9 par [DEL-2006]) les coefficients deviennent :

$$\begin{cases} C_1^g = 7.6 \\ C_2^g = 75^{\circ}\text{C} \end{cases} \quad T_g = 80^{\circ}\text{C} \quad (3.15)$$

Ces valeurs sont incluses dans le domaine généralement admis :

$$\begin{cases} 5 \leq C_1^g \leq 30 \\ 25^\circ\text{C} \leq C_2^g \leq 100^\circ\text{C} \end{cases} \quad (3.16)$$

D'autre part nous pouvons comparer les valeurs que nous avons déterminées avec celles reportées dans la littérature (TAB. 3.4).

	[GOR-2001a]	[DEL-2006]	[MAR-1999]	[CHE-2006b]
PET	Tergal Fibre «T74F9»	Tergal Fibre «T74F9»	Eastman-Kodak «Eastapak 9921W»	Eastman-Kodak «Eastapak 9921W»
T_{REF} (°C)	85	90	88	90
C_1	6.8	6.7	11	-1.61
C_2 (°C)	33	45	400	-26.8
Essais	Torsion	Flexion	Traction biaxiale	Traction biaxiale

TAB. 3.4 - Paramètres WLF reportés dans la littérature pour le PET

Soulignons que les méthodes mises en œuvre pour mesurer les facteurs de glissement diffèrent d'une référence à l'autre. L'approche adoptée par [GOR-2001a], et [DEL-2006] est d'appliquer le principe d'équivalence temps-température afin d'obtenir une courbe maitresse à partir d'essais de torsion, ou de flexion réalisés à différentes fréquences et différentes températures. L'approche adoptée par [MAR-1999] et [CHE-2006a] est similaire à celle présentée dans cette étude.

Les valeurs reportées dans la TAB. 3.4 n'étant pas strictement comparables du fait du choix de la température de référence, nous avons représenté graphiquement l'évolution du facteur de glissement a_T (équation (3.6)) en fonction de la température pour chacune des références citées ci-dessus (FIG. 3.13).

La FIG. 3.13 révèle qu'il existe des différences significatives entre les coefficients reportés dans la littérature, et ce y compris lorsque le grade de PET est identique. Ces différences ne sont donc pas uniquement dues au type de PET mis en œuvre pour les mesures. Le manque d'information rend difficile l'interprétation de ces différences. Il est probable que le type d'essais affecte les résultats obtenus, de même que la méthode adoptée pour le traitement des mesures expérimentales (par ex. : prise en compte ou non de l'auto-échauffement du matériau durant l'essai).

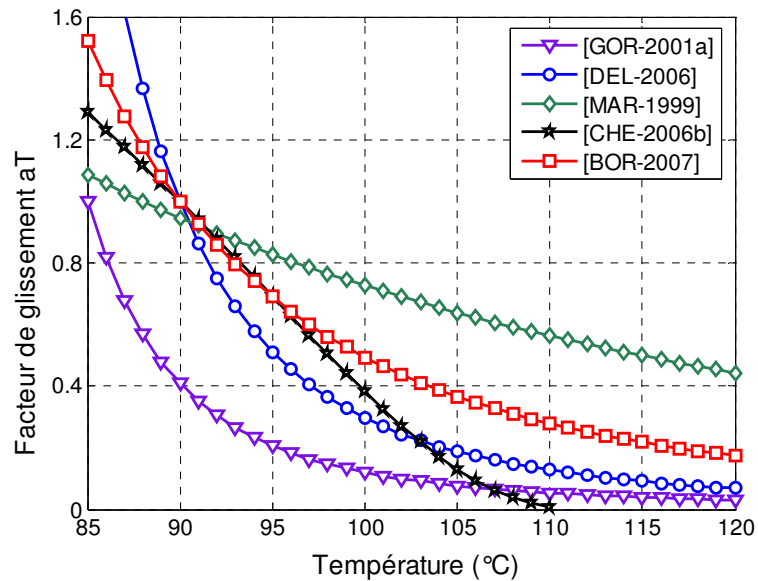


FIG. 3.13 - Facteurs de glissement WLF reportés dans la littérature pour le PET – Évolution en fonction de la température

La FIG. 3.14 illustre les courbes contraintes/déformations obtenues avec la loi de G'Sell modifiée, pour une vitesse de traverse de 100 mm.s^{-1} .

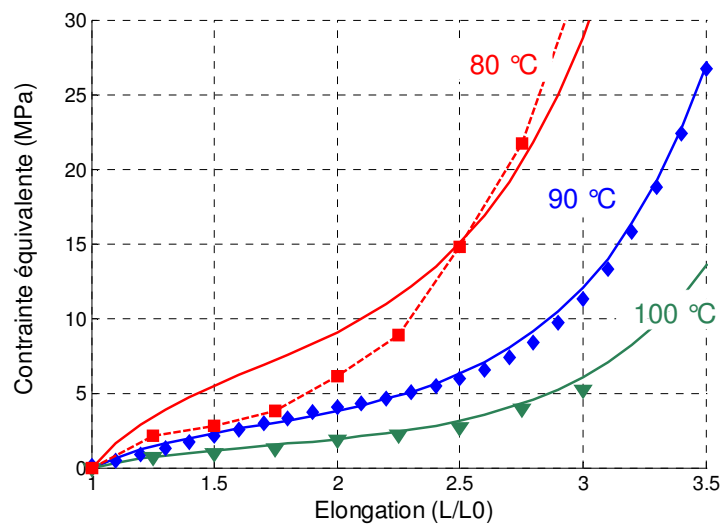


FIG. 3.14 - Identification des paramètres WLF – Essais de traction équi-biaxiale à 100 mm.s^{-1} . Les marqueurs désignent les points expérimentaux

Nous pouvons constater que la loi de comportement fournit une bonne représentation des courbes contraintes/déformations pour des températures comprises entre 90 et 100°C. En revanche, l'écart avec les mesures expérimentales est plus important aux alentours de la température de transition vitreuse, et pour des vitesses élevées. Ceci met en évidence l'incapacité du modèle à décrire le comportement du PET sur une large gamme de vitesses et de

températures, notamment lorsque le PET adopte un comportement de type vitreux (basse température et/ou vitesses élevées).

Toutefois, compte tenu des résultats présentés par les FIG. 3.12 et FIG. 3.14, la loi de G'Sell modifiée que nous avons adoptée permet de modéliser de manière satisfaisante le comportement du PET sur la gamme de température de mise en forme.

Bien que l'approche présentée ci-dessus soit celle retenue dans la suite de notre étude, nous avons étudié différentes alternatives afin d'améliorer les résultats illustrés par la FIG. 3.14. La première est d'affecter à la consistance une thermodépendance de type Arrhenius, qui se substitue à la loi WLF. La loi d'Arrhenius s'exprime ainsi :

$$k_0(T) = k_0(T_{REF}) a_T = k_0(T_{REF}) \exp\left(\beta\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{REF}}\right)\right) \quad (3.17)$$

En appliquant la procédure d'identification par analyse inverse au paramètre β , nous obtenons : $\beta = 630$ pour $T_{REF} = 90$ °C. Cependant nous n'avons observé aucune amélioration des résultats. Comme l'illustre la FIG. 3.15, la substitution de la loi WLF par la loi d'Arrhenius n'a aucune influence sur la gamme de température de mise en œuvre.

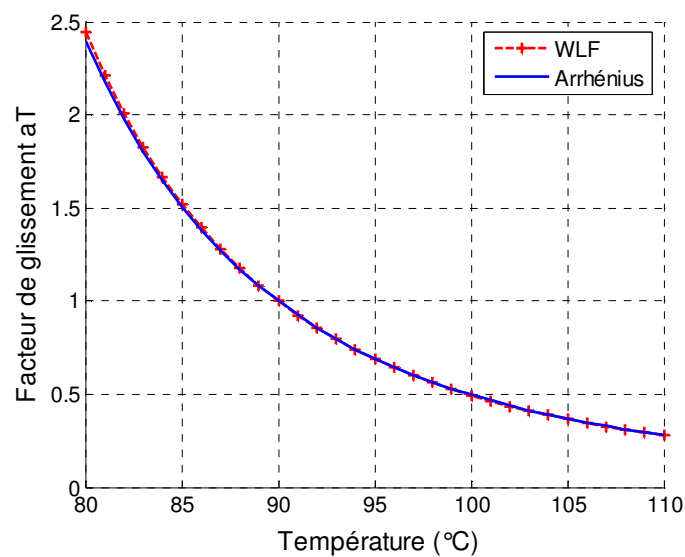


FIG. 3.15 - Identification des facteurs de glissement WLF et Arrhenius –Évolution en fonction de la température

La seconde alternative est de complexifier le modèle en incorporant un second facteur de glissement affecté à un terme d'écroissage. La nouvelle thermodépendance devient :

$$\begin{cases} k_0(T) = k_0(T_{REF}) a_{T1} = k_0(T_{REF}) \exp\left(\beta_1\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{REF}}\right)\right) \\ B(T) = B(T_{REF}) a_{T2} = B(T_{REF}) \exp\left(\beta_2\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{REF}}\right)\right) \end{cases} \quad (3.18)$$

Après identification, nous obtenons : $\beta_1 = 329$; $\beta_2 = 306$, pour $T_{REF} = 90$ °C. Comme l'illustre la FIG. 3.16, nous obtenons de meilleurs résultats aux basses températures, tout en limitant l'erreur pour les températures plus élevées.

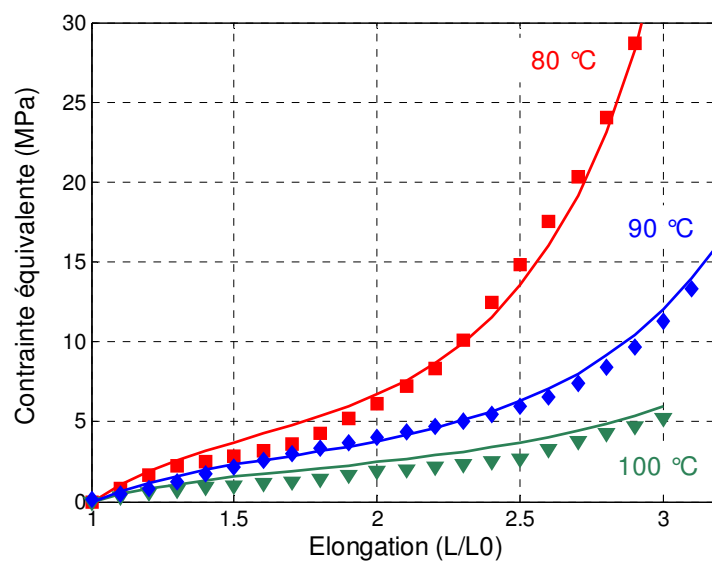


FIG. 3.16 - Identification des thermodépendances de type Arrhénus – Essais de traction équi-biaxiale à 100 mm.s^{-1} . Les marqueurs désignent les points expérimentaux

Comme nous l'avons évoqué, la loi WLF sera adoptée dans la suite de notre étude. Nous ne présenterons pas d'étude sur l'influence de la thermodépendance adoptée sur les résultats des simulations de soufflage. Cependant, ce point est d'un intérêt majeur et fait partie intégrante de nos perspectives.

3.1.6 Validation de l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®

L'implantation de la loi de comportement dans le logiciel ABAQUS® est réalisée par le biais d'un sous-programme développée en FORTRAN. Afin de valider l'implantation, nous avons procédé à des comparaisons entre les résultats obtenus numériquement, et ceux obtenus avec des modèles analytiques de référence.

Notre choix s'est porté sur deux types de sollicitation :

- L'essai de traction uniaxiale
- Le soufflage d'une membrane hémisphérique (élongation équi-biaxiale)

Ces deux types de sollicitation sont simples, mais demeurent néanmoins représentatives de l'étirage-soufflage d'une préforme. Une étude paramétrique a été menée afin de mettre en évidence l'influence des principaux paramètres sur la précision ainsi que sur le temps de calcul.

a) Traction uniaxiale à vitesse de traverse constante

Positionnement du problème :

Considérons une éprouvette plane de longueur utile initiale L_0 . Une vitesse de déplacement constante V est appliquée à une des extrémités de cette éprouvette dans la direction longitudinale, tandis que l'autre extrémité est bloquée dans la direction d'élongation (FIG. 3.17). En notant $L(t)$ la longueur utile de l'éprouvette au cours du temps, le tenseur des vitesses de déformation s'exprime comme suit (hypothèse d'incompressibilité) :

$$\dot{\epsilon} = \begin{pmatrix} \dot{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\dot{\alpha}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\dot{\alpha}}{2} \end{pmatrix}_{xyz} \quad \text{avec} \quad \dot{\alpha} = \frac{V}{L(t)} \quad (3.19)$$

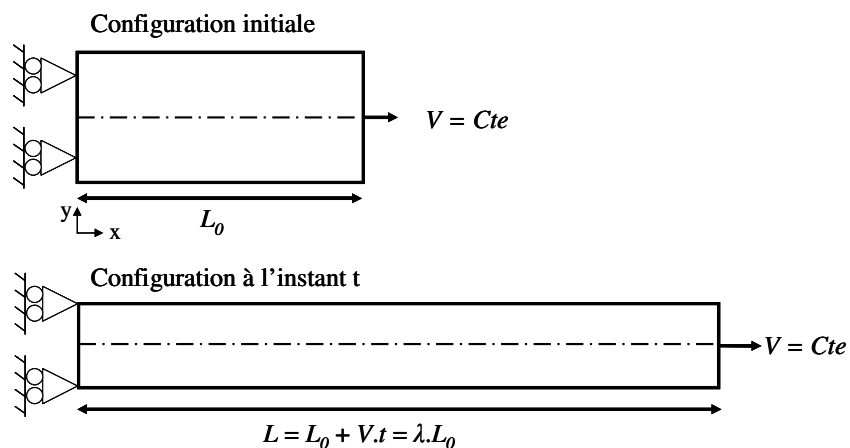


FIG. 3.17 - Illustration schématique du test de traction uniaxiale

La vitesse de déformation équivalente s'écrit alors :

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \sqrt{\frac{2}{3} \sum_{i,j} \dot{\epsilon}_{ij}^2} = \sqrt{\frac{2}{3} \left(\dot{\alpha}^2 + \frac{\dot{\alpha}^2}{4} + \frac{\dot{\alpha}^2}{4} \right)} = \dot{\alpha} \quad (3.20)$$

D'autre part, la déformation cumulée s'exprime en fonction de l'élongation :

$$\bar{\epsilon} = \int_{L_0}^L \frac{dL}{L} = \ln \left(\frac{L}{L_0} \right) \quad (3.21)$$

En considérant que le matériau se comporte suivant la loi de G'Sell, le problème est alors entièrement défini par l'expression de la contrainte équivalente :

$$\bar{\sigma} = (\sqrt{3})^{m+1} k_0 (1 - \exp(-A\bar{\epsilon})) \exp(B\bar{\epsilon}^C) \dot{\bar{\epsilon}}^m \quad (3.22)$$

Configuration adoptée et résultats :

Les simulations sont réalisées pour trois valeurs différentes de vitesses de traverse : 15, 50, et 100 mm.s⁻¹. Elles correspondent aux mesures réalisées par [MAR-2003], et permettent d'atteindre des vitesses de déformation de l'ordre de 1 s⁻¹. Les paramètres constitutifs de la loi de comportement que nous avons adoptés sont reportés dans la TAB. 3.5. Ces paramètres ont été identifiés à partir des essais de traction uniaxiale réalisés par [MAR-2003].

Paramètres	k_0 (MPa.s ^m)	m	A	B	C
Valeurs	5.8	0.57	0.7	0.2	6.6

TAB. 3.5 - Paramètres constitutifs de la loi de comportement adoptés pour les simulations d'essais de traction uniaxiale

La précision des résultats numériques est évaluée en calculant l'erreur globale suivante :

$$E = \frac{\|\bar{\sigma}_{num} - \bar{\sigma}_{an}\|_2}{\|\bar{\sigma}_{an}\|_2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\bar{\sigma}_{num}(i) - \bar{\sigma}_{an}(i))^2}{\sum_{i=1}^N \bar{\sigma}_{an}(i)^2}} \quad (3.23)$$

Où $\bar{\sigma}_{num}$ représente la contrainte estimée numériquement, $\bar{\sigma}_{an}$ la contrainte calculée analytiquement, et N le nombre de points de calculs. Ce critère est en réalité le rapport entre la norme L² (norme Euclidienne) de l'erreur, et la norme L² des valeurs de référence. Il s'agit donc de la norme euclidienne relative de l'erreur. Le choix de ce critère se justifie par le fait qu'une

norme L^1 relative (moyenne des écarts relatifs) conduirait à des valeurs infinies pour des contraintes nulles (dénominateur nul).

Il est possible de jouer sur la précision du calcul via un paramètre que nous noterons $\Delta\varepsilon$. Ce paramètre représente la variation maximale autorisée pour la déformation à chaque incrément de temps. Par conséquent, c'est un moyen indirect d'imposer une limite sur le pas de temps. Dans cette étude, nous proposons d'étudier l'influence de ce paramètre sur la précision et les temps de calculs.

La configuration adoptée pour chaque simulation, ainsi que les résultats obtenus sont reportés dans la TAB. 3.6.

	V (mm.s ⁻¹)	$\Delta\varepsilon$	Temps CPU (s)	Erreur (%)
Simulation 1	100	1.10^{-2}	0.5	9.1
Simulation 2	50	1.10^{-2}	0.6	9.1
Simulation 3	15	1.10^{-2}	0.5	9.1
Simulation 4	100	5.10^{-4}	1.9	3.7
Simulation 5	50	5.10^{-4}	2.1	3.0
Simulation 6	15	5.10^{-4}	1.9	3.3

TAB. 3.6 - Résultats des simulations d'essai de traction uniaxiale

En résumé, deux séries de simulations ont été réalisées. Pour chacune d'elles, trois simulations correspondant aux différentes vitesses de traverse sont mises en œuvres. La différence entre les deux séries est la valeur de la tolérance imposée pour le calcul du pas de temps (paramètre $\Delta\varepsilon$).

Analyse des résultats :

Les FIG. 3.18 et FIG. 3.19 illustrent les variations de la contrainte équivalente et de la vitesse de déformation équivalente en fonction du taux d'élongation. Nous observons un très bon accord entre les résultats numériques et analytiques. En effet, l'erreur cumulée est de l'ordre de 3.3% pour une valeur de $\Delta\varepsilon$ égale à 5.10^{-4} (FIG. 3.19). En fin de traction (après une déformation de 400%), l'erreur relative sur la contrainte est inférieure à 2%.

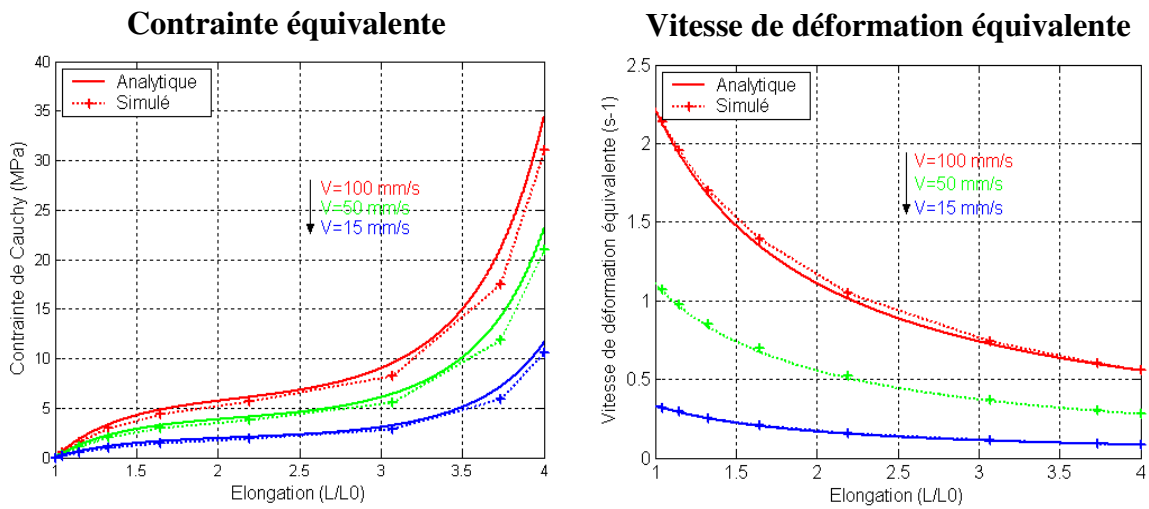


FIG. 3.18 - Comparaison des résultats analytiques et numériques pour un essai de traction – Variation maximale de déformation autorisée : $\Delta\varepsilon = 1.10^{-2}$

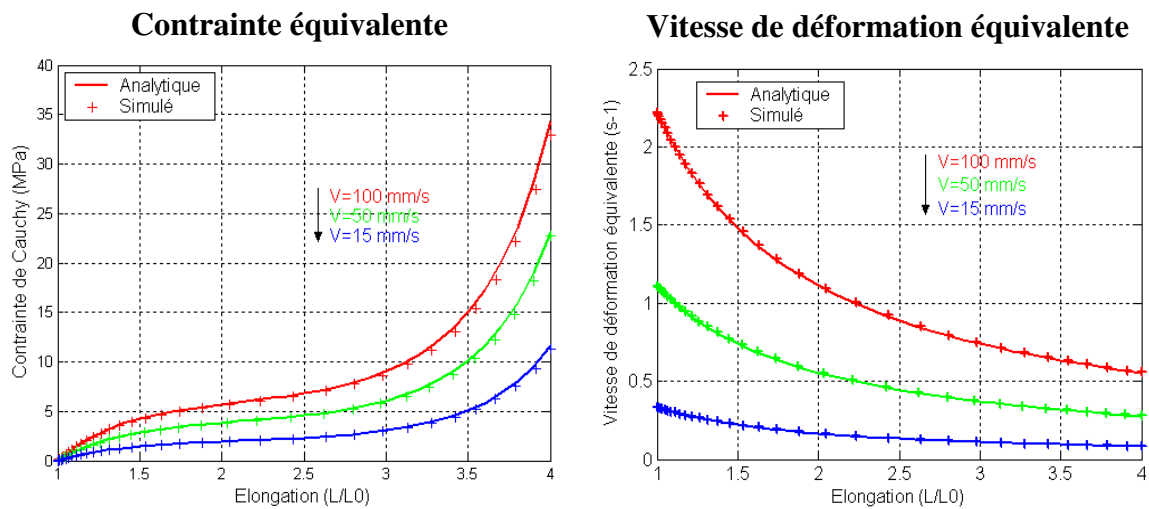


FIG. 3.19 - Comparaison des résultats analytiques et numériques pour un essai de traction – Variation maximale de déformation autorisée : $\Delta\varepsilon = 5.10^{-4}$

L'influence du paramètre $\Delta\varepsilon$ sur la précision et le temps de calcul est illustrée par la FIG. 3.20.

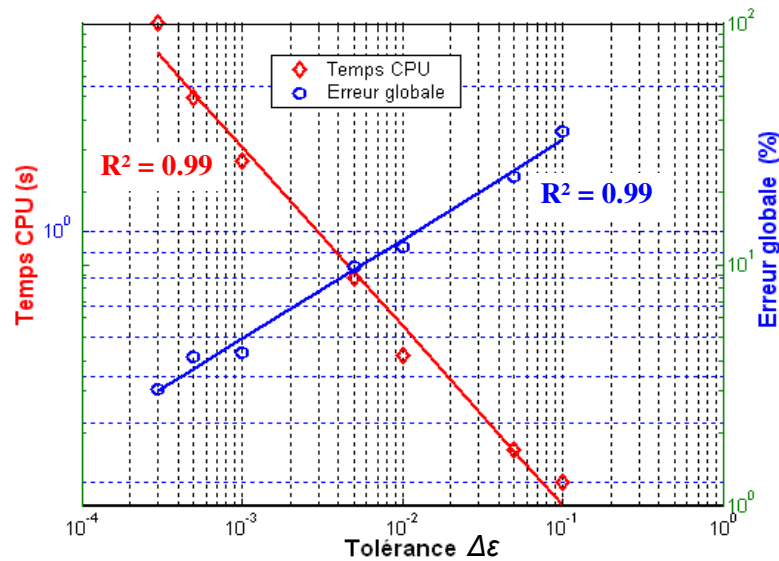


FIG. 3.20 - Simulation de l'essai de traction - Influence du paramètre $\Delta\varepsilon$ sur le temps de calcul et la précision

Cette figure révèle que le temps de calcul croît exponentiellement avec la tolérance $\Delta\varepsilon$ (courbes représentée en valeurs logarithmiques). De même, la précision décroît exponentiellement.

Cette première analyse comparative a permis de valider l'implantation de la loi de comportement dans le logiciel ABAQUS® dans le cadre de la simulation d'un essai de traction simple. L'objet du paragraphe suivant est de valider l'implantation du modèle dans le cas d'une sollicitation équi-biaxiale, plus représentative du procédé d'injection-soufflage.

b) Soufflage d'une membrane hémisphérique

Positionnement du problème :

Considérons une membrane hémisphérique de rayon et d'épaisseur initiaux respectivement : $R_0 = 50$ mm, et $e_0 = 3$ mm. Une surpression ΔP est appliquée sur la surface interne de la membrane (FIG. 3.21). Nous supposons que le polymère adopte un comportement viscoplastique avec durcissement dont la loi constitutive s'exprime par :

$$\sigma = -pI + 2k_0 \exp(B\bar{\varepsilon})^{m-1} \dot{\varepsilon} \quad (3.24)$$

En adoptant les hypothèses d'incompressibilité et de coque mince, ce problème mécanique possède une solution analytique. L'évolution du rayon interne de la membrane s'exprime d'après la relation suivante (démonstration en Annexe B) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{R}{R_0} = \left(1 - \frac{3-2B}{2m(\sqrt{3})^{\frac{1}{m+1}}} \frac{t}{\tau^{\frac{1}{m}}} \right)^{\frac{-m}{3-2B}} \\ \tau = \frac{2k_0 e_0}{\Delta P R_0} \end{array} \right. \quad \text{avec } t \neq \frac{2m\tau^{\frac{1}{m}}(\sqrt{3})^{\frac{1}{m+1}}}{3-2B} \quad (3.25)$$

Cette solution n'a de sens que pour des temps inférieurs à une valeur limite, pour lequel le rayon tend vers une valeur finie. De plus, pour que cette expression mathématique soit définie, le paramètre B , qui conditionne le durcissement, doit être différent de 1.5.

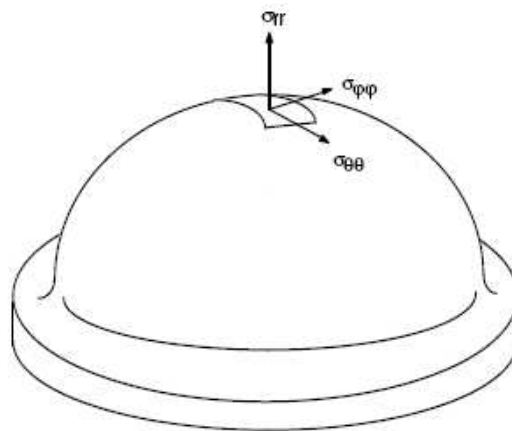


FIG. 3.21 - Illustration du soufflage d'une membrane hémisphérique

Configuration adoptée :

Tout comme pour l'essai de traction simple, nous avons réalisé une étude comparative entre le modèle numérique et la solution de référence présentée ci-dessus. Les paramètres constitutifs de la loi de comportement que nous avons arbitrairement choisis pour les calculs sont reportés dans la TAB. 3.7.

Paramètres	k_0 (MPa.s ^m)	B	m	ΔP (bar)
Valeurs	4	0.1	0.6	2, puis 3

TAB. 3.7 - Paramètres constitutifs de la loi de comportement adoptés pour les simulations de soufflage de membrane hémisphérique

Les simulations sont réalisées en deux dimensions axisymétrique, avec un maillage de type coque. Nous proposons d'étudier l'influence du nombre de nœuds sur le temps de calcul. Pour cela trois maillages sont adoptés, composés respectivement de 20, 80, et 160 nœuds.

L'erreur entre les deux modèles est évaluée selon le même critère utilisé pour la traction simple, mais portant cette fois-ci sur l'évolution du rayon interne de la membrane au cours du temps. Nous proposons à nouveau d'étudier l'influence du paramètre $\Delta\varepsilon$ sur la précision et le temps de calcul.

Résultats et discussion :

La FIG. 3.22 illustre une comparaison des résultats numériques et analytiques. Les courbes représentent l'évolution du rayon interne de la membrane au cours du temps pour deux valeurs de pression différentes. Un très bon accord peut être observé entre les résultats de la simulation et la solution de référence : l'erreur cumulée est de l'ordre de 1% pour $\Delta\varepsilon = 1.10^{-5}$, et ce, quelle que soit la pression imposée.

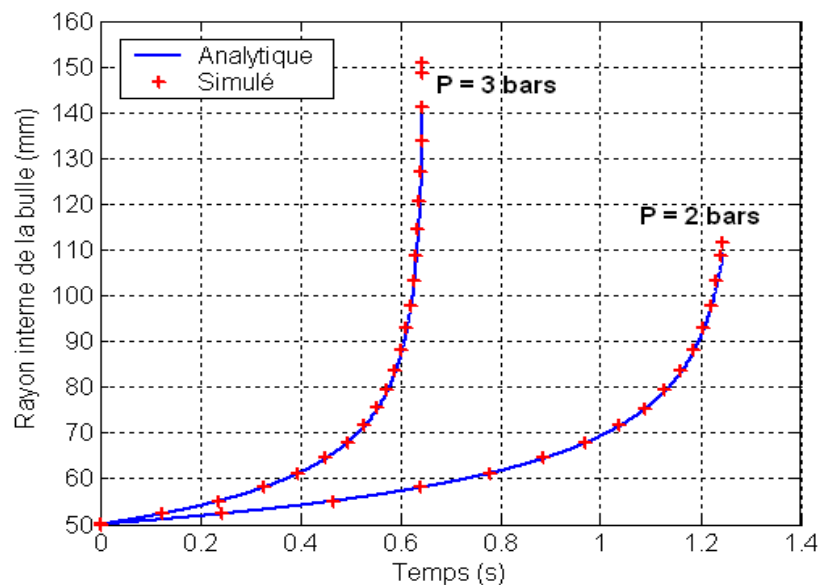


FIG. 3.22 - Comparaison des résultats analytiques et numériques pour le soufflage d'une membrane hémisphérique

Tout comme pour l'essai de traction, la précision des résultats numériques est dépendante de la valeur du paramètre $\Delta\varepsilon$. La FIG. 3.23a révèle le même type de résultats obtenus en traction : le temps de calcul croît exponentiellement avec la tolérance $\Delta\varepsilon$, tandis que la précision décroît exponentiellement.

Enfin, la FIG. 3.23b met en évidence que le temps de calcul croît linéairement avec le nombre de nœuds. Pour les maillages adoptés (entre 20 et 160 nœuds), nous n'avons pas observé d'influence significative du nombre de nœuds sur la précision. Le maillage le plus grossier est suffisant pour simuler correctement un problème aussi simple, et l'ajout d'éléments n'améliore pas la précision du résultat.

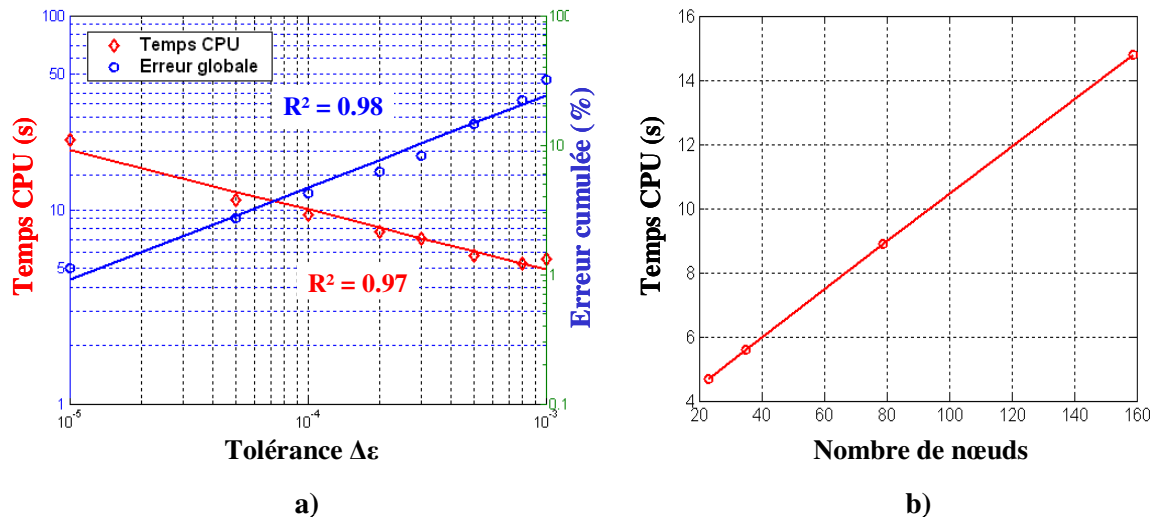


FIG. 3.23 - Simulation du soufflage d'une membrane hémisphérique – a) Influence du paramètre $\Delta\epsilon$ sur le temps de calcul et la précision - b) Influence du nombre de nœuds sur le temps de calcul

c) Conclusion sur la validation de l'implantation de la loi de comportement

Le bon accord observé entre les résultats des simulations et les solutions analytiques nous permet de valider l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®. Nous avons profité de cette étude pour mettre en évidence l'influence du paramètre $\Delta\epsilon$. Cette étude révèle que le temps de calcul et la précision varient tout deux de manière exponentielle avec $\Delta\epsilon$. Par conséquent, ce paramètre devra être choisi judicieusement afin de garantir une précision convenable tout en limitant les temps de calcul. Ce point est particulièrement important étant donné notre objectif qui est de coupler le modèle de soufflage à un algorithme d'optimisation.

3.1.7 Conclusion sur l'implantation de la loi de comportement dans ABAQUS®

L'étude du comportement mécanique du PET apparaît clairement comme un point majeur de la modélisation du procédé d'injection-soufflage. Toutefois, il ne s'agit pas du cœur de ce travail de thèse. C'est pourquoi nous avons adopté une approche pragmatique, qui consiste à nous appuyer sur des résultats bibliographiques afin de choisir, d'identifier, et d'implanter une loi de comportement répondant à nos critères de recherche. Un des objectifs principaux de notre étude est de coupler le modèle de soufflage que nous développons à un algorithme d'optimisation. Compte tenu de cet application particulière, la loi de G'Sell modifiée présente des caractéristiques intéressantes. Il est clair que cette loi phénoménologique reste limitée. Par exemple, elle ne permet pas de modéliser le comportement anisotrope du PET, ni de prédire l'évolution de sa microstructure au cours de la déformation. Toutefois, elle possède de multiples atouts. Elle permet notamment d'obtenir un bon compromis entre précision et temps de calcul,

tout en assurant une simplicité de mise en œuvre et une bonne stabilité numérique. Ces conditions sont cruciales pour l'optimisation.

D'autre part, la loi de comportement n'est pas le seul élément affectant la précision des simulations. Le choix des conditions aux limites thermiques et mécaniques joue aussi un rôle déterminant. C'est pourquoi nous avons accordé un intérêt tout particulier à la mesure de ces conditions aux limites. La présentation de ces mesures fait l'objet de la partie suivante.

3.2 Mesure des conditions aux limites

3.2.1 Introduction : présentation du pilote de soufflage

Les conditions aux limites thermiques et mécaniques sont mesurées sur le pilote de soufflage du CROMeP. Il s'agit d'un pilote instrumenté permettant de souffler des bouteilles de géométrie simple, avec une bonne reproductibilité. Il se différencie d'une machine de soufflage industrielle par les points suivants :

- Le pilote n'est muni d'aucune canne d'étirage. Par conséquent, il est réservé aux bouteilles d'un volume réduit (par ex. 50 cl).
- La géométrie du moule est simple. Ce dernier est conçu pour la fabrication de bouteilles 50 cl à fond plat. L'éjection de la bouteille étant manuelle, le pilote n'est en aucun cas prévu pour la fabrication en série.
- Le moule n'est pas régulé en température.
- La pression d'air nominale est limitée à 12 bars. Soulignons que le pilote a été modifié au cours de cette étude par ajout d'un compresseur et d'un ballon de stockage. Ces deux éléments ont permis d'augmenter la pression nominale de 7 à 12 bars tout en renforçant la reproductibilité des essais par réduction des fluctuations de pression.

La FIG. 3.24 illustre le pilote de soufflage (module de chauffage IR et module de soufflage), ainsi que la géométrie de la bouteille utilisée dans cette étude.

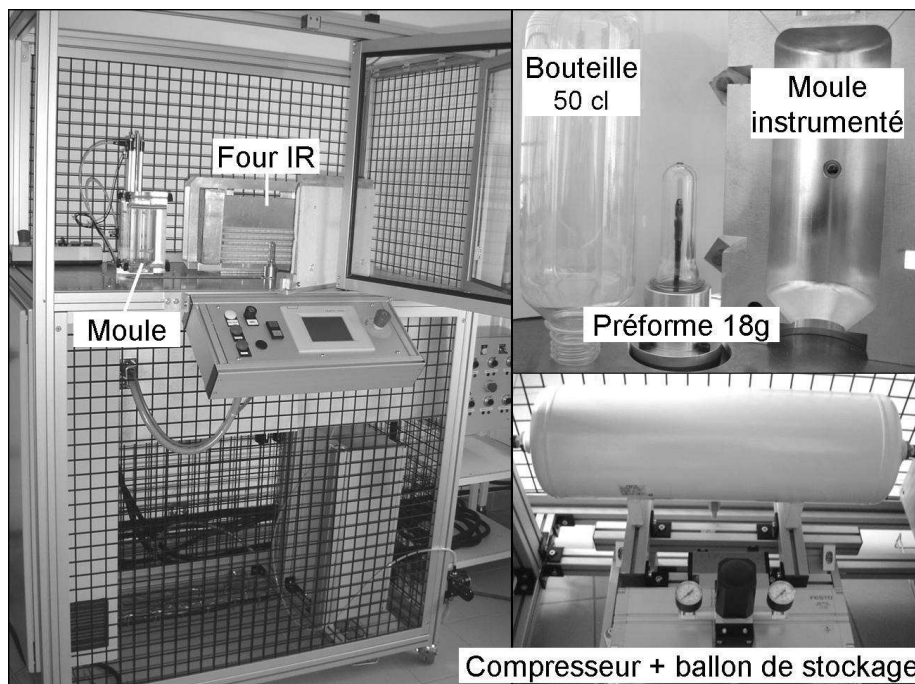


FIG. 3.24 - Pilote de soufflage du CROMeP / géométrie de la bouteille de l'étude

Contrairement aux machines de soufflage industrielles pour lesquelles le nombre de paramètres de réglage est très important (pression de soufflage, retard au pré-soufflage, vitesse de la canne d'étirage, etc...), le pilote de soufflage a été conçu dans l'optique de réduire au maximum le nombre de paramètres de mise en forme. C'est la raison pour laquelle il est dépourvu de canne d'étirage. Ainsi, les seuls paramètres modifiables par l'utilisateur (en plus des paramètres de réglage du four IR) sont :

- La pression nominale de soufflage.
- Le temps de maintien de la pression de soufflage.

Toutefois, le temps de maintien étant généralement choisi très grand afin d'optimiser le refroidissement de la bouteille, le seul véritable paramètre de réglage demeure la pression nominale de soufflage. L'objectif d'une telle conception est de découpler au maximum l'effet des paramètres de chauffage de celui des paramètres de soufflage. Ainsi, il est plus facile d'étudier l'influence de la température de la préforme sur sa mise en forme.

Par conséquent, si nous adoptons la configuration du pilote de soufflage, les seules conditions aux limites requises pour les simulations numériques du soufflage sont les suivantes :

- La variation de la pression d'air (ou du débit d'air) en fonction du temps à l'intérieur de la préforme.
- La distribution de température de la préforme.
- Le coefficient d'échange entre la préforme et le moule (ou résistance thermique de contact).

Dans les paragraphes suivants, nous présentons les dispositifs expérimentaux mis en œuvre pour mesurer ces différentes conditions aux limites.

3.2.2 Mesure de la pression et du débit de soufflage

Lors de la mise en forme d'une bouteille, la pression de l'air situé à l'intérieur de la préforme est sensiblement différente de la pression de soufflage nominale imposée par l'utilisateur. D'une part, la pression mesurée est globalement plus faible que la pression nominale, et d'autre part, elle subit de fortes variations au cours du temps. Comme l'a montré [SCH-1995], la surpression interne mesurée lors d'un essai de soufflage libre (i.e. sans canne d'étirage) suit une évolution typique. Cette évolution est étroitement liée à la variation du volume de la préforme au cours de la déformation. Des résultats similaires sont obtenus par [PIC-2008] à partir d'essais de soufflage libre réalisés au CEMEF dans le cadre du projet APT_PACK. Ces essais sont réalisés sur le prototype instrumenté du CEMEF avec des préformes identiques à celle de notre étude (préforme 18g - PET T74F9 - injectée par la société Logoplaste). La FIG. 3.25 illustre l'évolution de la surpression interne mesurée lors d'un essai de soufflage libre à 7 bars nominal, ainsi que l'évolution de la forme de la préforme correspondante.

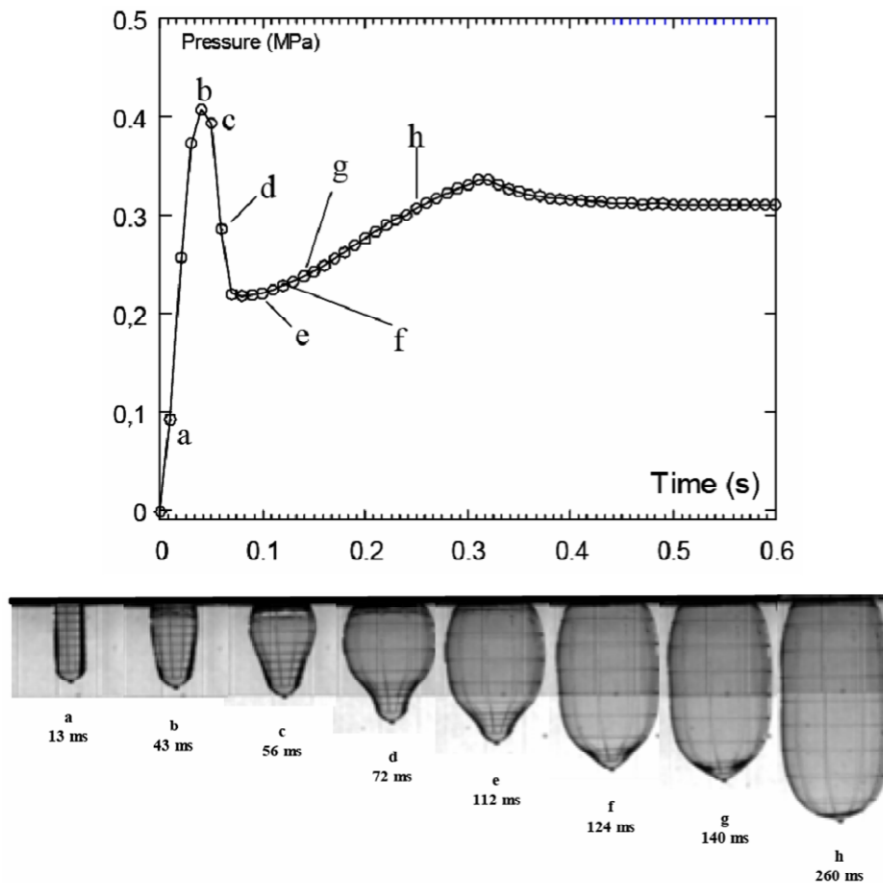


FIG. 3.25 - Courbe de pression et évolution de la forme de la préforme au cours d'un essai de soufflage libre – Figure extraite de [MEN-2007]

Nous pouvons constater que la pression mesurée est inférieure à la pression nominale (7 bars) durant toute la durée de l'essai. D'autre part, l'évolution de la surpression interne peut être mise en relation avec la variation du volume de la préforme au cours du temps :

- Initialement, la pression augmente jusqu'à atteindre une valeur suffisante pour amorcer la déformation (points a-b). Le point d'inflexion b est donc représentatif de la rigidité initiale de la structure.
- L'augmentation brutale du volume de la préforme coïncide avec une chute de pression (points b-e) : l'air situé dans la cavité délimitée par la paroi interne de la préforme est détendu. A cet instant, les vitesses de déformations sont très élevées. C'est pourquoi il est probable que la chute de pression soit fortement dépendante de la sensibilité du comportement du PET à la vitesse de déformation.
- Enfin, la pression croît à nouveau progressivement (points e-h). La pression augmente afin de « vaincre » la résistance du matériau. Son augmentation est donc d'autant plus faible que le durcissement structural est faible.

Ces résultats démontrent d'une part que l'évolution de la surpression interne est représentative de la cinématique de la déformation, et d'autre part que la cinématique de mise en forme est représentative du comportement rhéologique du PET*.

Dans la plupart des travaux portant sur la simulation numérique du procédé d'injection-soufflage, l'approche adoptée est d'appliquer la pression mesurée directement en tant que conditions aux limites. Dans une étude récente, [MEN-2007] démontre que cette approche ne permet pas d'obtenir des cinématiques de mise en forme conformes à la réalité. En effet, la chute de pression mesurée expérimentalement engendre un ralentissement de la déformation de la structure, alors qu'elle coïncide en réalité à une brusque augmentation du volume de la bouteille (FIG. 3.25).

C'est pourquoi la tendance actuelle est d'appliquer non plus une pression, mais un débit en tant que donnée d'entrée. La surpression interne est alors calculée automatiquement au cours de la simulation, par le biais de modèles thermodynamiques généralement basés sur la loi des gaz parfait [BOR-2007a], [MIR-2007], [TAN-2008]. Les résultats présentés démontrent que cette méthode permet d'aboutir à des cinématiques de mise en forme plus conformes à la réalité.

Plusieurs approches sont proposées afin d'estimer le débit d'air injecté dans la préforme. [SCH-1995] propose de mesurer la variation de la pression au cours du temps dans une préforme non chauffée (i.e. rigide). Il démontre à l'aide d'un modèle thermodynamique qu'il est possible d'estimer le débit d'air en calculant la pente à l'origine de la courbe de pression. [TAN-2008] propose d'appliquer ce même modèle aux essais de soufflage libre réalisés par [PIC-2008]. Il relie alors le débit à la variation de pression en fonction du temps, ainsi qu'à la variation du volume de la préforme en fonction du temps. La variation du volume de la bouteille au cours du soufflage est estimée à partir d'images obtenues par le biais d'une caméra rapide (résultats présentés FIG. 3.25). Soulignons que dans ces approches, le débit d'air est considéré comme étant constant durant toute la durée de la mise en forme.

Dans notre étude, nous proposons de mesurer les variations du débit massique d'air en fonction du temps. Pour cela nous utilisons un débitmètre à tube chaud Bronkhorst EL-FLOW® (FIG. 3.26). Le débit d'air est appliqué en tant que condition aux limites dans les simulations. La pression est alors automatiquement calculée à l'aide d'un modèle thermodynamique que nous présenterons ultérieurement. Afin de valider le calcul de la surpression interne, l'évolution de la

* Les courbes de pression étant représentatives du comportement mécanique du PET, elles pourraient servir de base expérimentale dans le but d'identifier les paramètres constitutifs d'une loi de comportement.

pression de soufflage est mesurée à l'aide d'un capteur de pression pelliculaire Kulite LE 125, introduit à l'intérieur de la préforme (FIG. 3.26). Un exemple de résultat obtenu lors d'un essai de soufflage confiné est illustré par la FIG. 3.27.

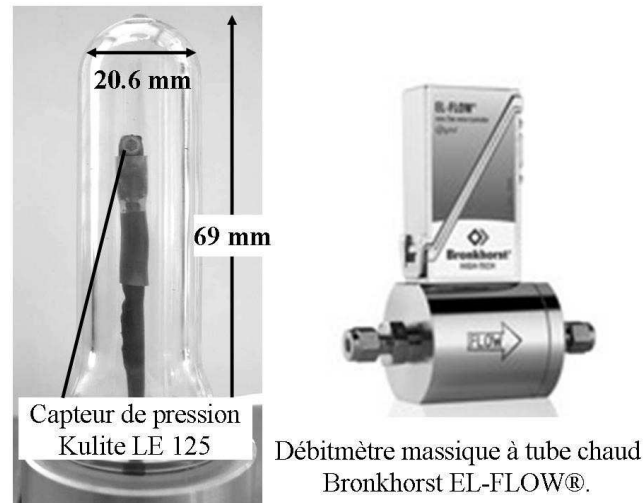


FIG. 3.26 - Capteur de pression et débitmètre massique

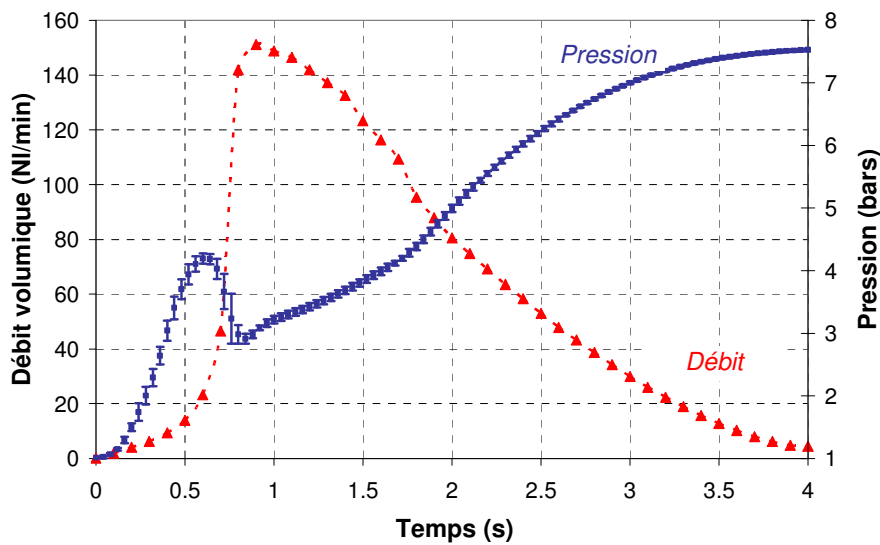


FIG. 3.27 - Mesure de la pression et du débit de soufflage

- Nous constatons une nette similitude entre l'allure de la courbe de pression mesurée sur le pilote du CROMeP et celle mesurée par [PIC-2008] sur le prototype du CEMEF (FIG. 3.25). Dans les deux cas, la valeur de la pression nécessaire à l'amorçage de la déformation est de 4 bars. Cette valeur dépend bien entendu de la température de la

préforme. En revanche, le temps de soufflage est beaucoup plus court sur le prototype du CEMEF, ce qui semble indiquer que le débit d'air est plus important.

- Lorsque la bouteille atteint sa forme finale, la pression tend progressivement vers la valeur de la pression nominale de soufflage, soit 7.5 bars dans l'exemple présenté ici. Ceci implique que le débit d'air s'annule. Ce phénomène ne peut donc pas être pris en compte si l'on considère le débit constant.
- La valeur maximale du débit mesuré est de 150 Nl.min^{-1} , soit 3.25 g.s^{-1} . Cette valeur est sensiblement inférieure à celle mesurée par [TAN-2008], soit 15 g.s^{-1} . Cet écart explique les différences observées sur les vitesses de soufflage.

Nous allons à présent présenter les mesures des conditions aux limites thermiques. Il s'agit d'une part de la température de la préforme, et d'autre part du coefficient d'échange préforme/moule.

3.2.3 Mesure de la distribution de température de la préforme

La température de la paroi externe de la préforme est mesurée à l'aide d'une caméra infrarouge AGEMA 880 LW fonctionnant dans la gamme $[8-12] \mu\text{m}$. Comme nous l'avons démontré dans le chapitre 2, la préforme est suffisamment épaisse pour être considérée comme opaque dans cette bande spectrale. Par conséquent, la caméra IR mesure bien une température de surface. Le profil de température dans l'épaisseur de la préforme est quant à lui calculé numériquement à l'aide du logiciel présenté au chapitre 2. Un exemple de résultat est illustré par la FIG. 3.28.

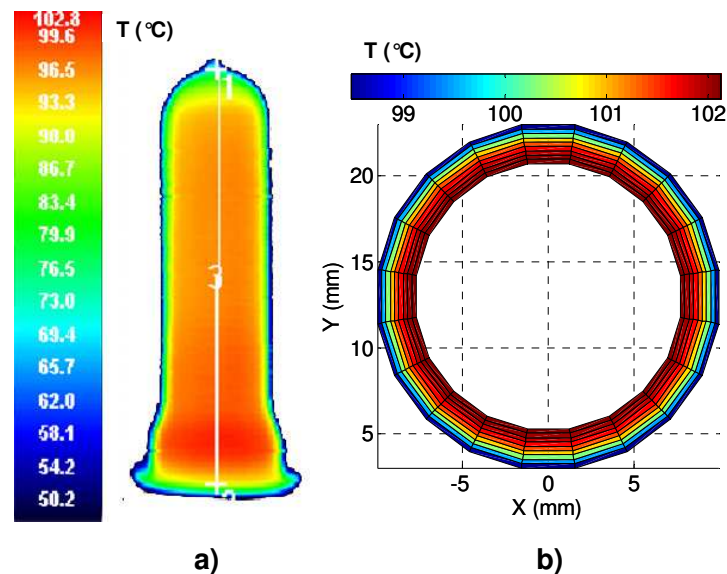


FIG. 3.28 - Distribution de température de la préforme – a) Mesure de la température externe – b) Calcul de la distribution de température dans l'épaisseur

3.2.4 Mesure de la Résistance Thermique de Contact (RTC) préforme/moule

a) Définition de la RTC

Lors de la mise en forme d'une bouteille, la préforme entre progressivement en contact avec la paroi interne du moule contre laquelle elle se refroidit. La densité de flux de chaleur φ à l'interface polymère/moule a pour expression :

$$\varphi = \frac{(T_{PET} - T_M)}{R_{Th}} \quad (3.26)$$

La densité de flux de chaleur est donc proportionnelle à l'écart de température entre le polymère (T_{PET}) et le moule (T_M). Le coefficient noté R_{th} est appelé Résistance Thermique de Contact (RTC). Sa dimension est l'inverse de celle d'un coefficient d'échange, il s'exprime donc en $K.m^2.W^{-1}$. La RTC permet de prendre en compte la nature imparfaite du contact. Pour un contact parfait (i.e. surfaces non rugueuses) la résistance de contact est nulle, ce qui implique que la différence de température entre les deux matériaux est nulle. Par conséquent, un contact imparfait est caractérisé par un « saut de température » à l'interface (il n'existe donc pas de température d'interface).

b) Revue bibliographique sommaire

A ce jour, il existe extrêmement peu de valeurs de RTC publiées dans la littérature pour le procédé d'injection-soufflage. D'une manière générale, la valeur de ce paramètre est choisie sans justification préalable. En revanche, des mesures de coefficients d'échange ont été réalisées pour d'autres procédés de mise en forme de matières plastiques, tels que l'injection [YU-1990], [DEL-2000], [SRI-2000], [BEN-2004], ou le thermoformage [CHO-2008]. L'ordre de grandeur des coefficients d'échange mesurés varie sensiblement d'un procédé à l'autre. Les valeurs reportées pour l'injection varient entre 600 et 1500 $W.m^{-2}.K^{-1}$, alors qu'elles sont de l'ordre de 30 $W.m^{-2}.K^{-1}$ pour le thermoformage. Ces écarts importants se justifient entre autres par :

- La nature du contact polymère/métal : ce contact est de type solide/solide pour le thermoformage. Pour le procédé d'injection, il est successivement de type liquide/solide (écoulement du polymère à l'état fondu) puis solide/solide (création d'une gaine froide, solidification du polymère).
- Les conditions de mise en œuvre : notamment la pression de contact, qui semble être un des paramètres les plus importants. Une augmentation de la pression a tendance à réduire la valeur de la RTC [NAR-1997]. Or la pression est beaucoup plus importante en injection (typiquement plusieurs centaines de bars) qu'en thermoformage (quelques bars).

Une autre approche consiste à modéliser le contact à l'échelle microscopique afin d'établir un modèle mathématique permettant de calculer la RTC. Un exemple de modélisation de la RTC est proposé par [HAM-2007]. Le modèle analytique présenté fait intervenir diverses grandeurs : pression de contact, tensions superficielles des matériaux, paramètres de rugosité des surfaces en contact, etc... Ce modèle est développé pour le procédé de fonderie sous pression, et n'a à ce jour jamais été validé dans des conditions opératoires correspondant au procédé d'injection-soufflage.

Pour les raisons évoquées ci-dessus, il est difficile d'estimer a priori la valeur de la RTC dans le cadre de l'injection-soufflage. C'est pourquoi nous proposons de mettre en œuvre un dispositif de mesure que nous allons présenter.

c) Principe général de la mesure

Le principe de la mesure repose sur l'utilisation simultanée de deux capteurs intégrés dans la paroi du moule à mi-hauteur (FIG. 3.29). Le premier capteur est un pyromètre destiné à mesurer la température de surface de la préforme. Le second est un capteur de flux permettant de mesurer à la fois la densité de flux de chaleur à l'interface préforme/moule, et la température de la paroi interne du moule. La résistance thermique de contact (ou le coefficient d'échange) peut alors être déduite à partir de la relation (3.26). Cette technique de mesure est identique à celle mise en œuvre par [BEN-2004] et [DOU-2005], pour les procédés d'injection plastique et de fonderie sous pression.

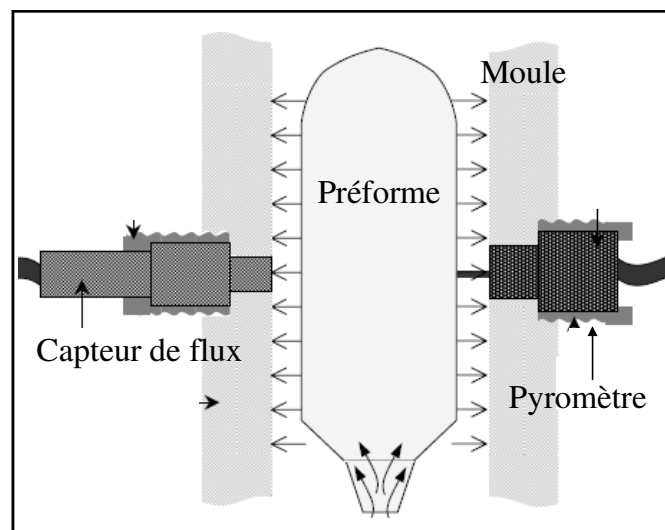


FIG. 3.29 - Principe général de la mesure du coefficient d'échange préforme/moule

Les principales problématiques liées à ce type de mesure sont :

- La rapidité du phénomène : le temps caractéristique est de l'ordre de 0.5 s.

- La faible élévation de température à détecter : l'élévation de température du moule est de l'ordre de 1 °C à la température ambiante.

d) Mesure de la température de surface de la préforme

Grâce aux mesures spectrométriques présentées au chapitre 2 (paragraphe 2.1.1), nous avons démontré que le PET se comporte comme un corps opaque sur la bande spectrale [8-14] μm . Toutefois, l'épaisseur de l'échantillon doit être supérieure à 200 μm pour que cette propriété soit vérifiée (FIG. 2.14). Cette condition est généralement remplie puisque les bouteilles de 50 cl soufflées à partir de préformes 18 g présentent des épaisseurs de l'ordre de 250-300 μm (nous sommes toutefois à la limite d'opacité du matériau). Autrement dit, un pyromètre fonctionnant dans la gamme [8-14] μm permet de mesurer une température de surface, y compris en fin de soufflage lorsque l'épaisseur de la bouteille est réduite.

Notre choix s'est porté sur un pyromètre Optris® CTfast fonctionnant dans la bande spectrale [8-14] μm . Son temps de réponse (donnée constructeur) est de 17 ms, ce qui est satisfaisant compte tenu du temps caractéristique du procédé de l'ordre de 0.5 s. Ce capteur, ainsi que sa position réelle d'implantation dans le moule sont illustrés par la FIG. 3.30.

L'acquisition des données est réalisée à l'aide d'une centrale Nimtech. Cette centrale permet d'acquérir simultanément l'ensemble des données nécessaires à l'estimation de la résistance thermique de contact, de même que la pression de soufflage. L'acquisition simultanée de toutes les données permet de réduire les erreurs dues à des éventuels offset.

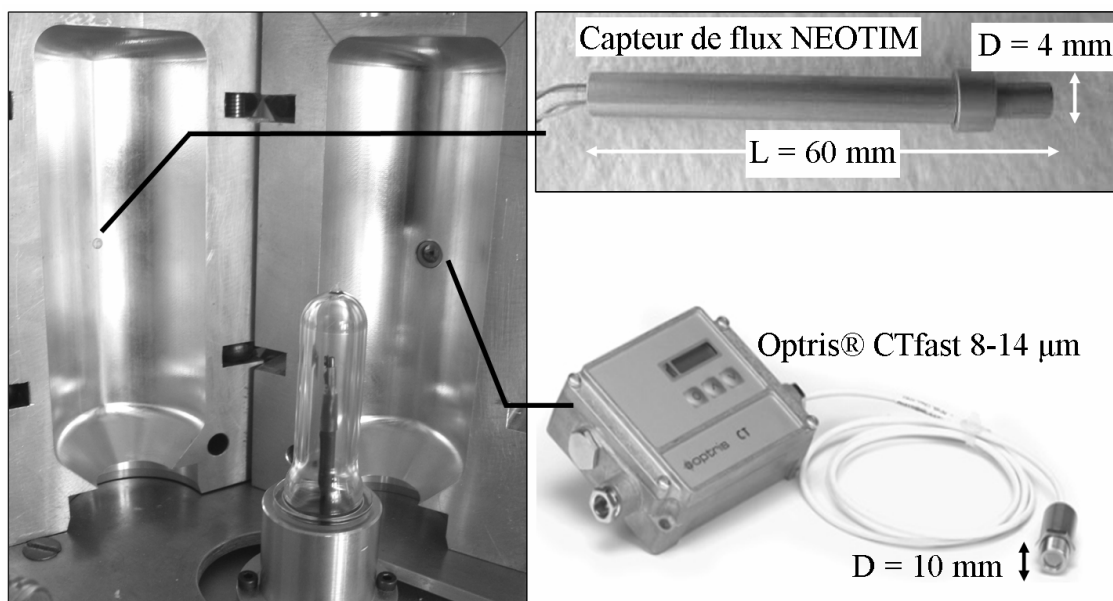


FIG. 3.30 - Illustration des capteurs de température et de flux de chaleur

Nous avons procédé à une série de neuf essais afin d'étudier leur reproductibilité. La FIG. 3.31 illustre l'évolution de la température de surface de la préforme au cours du temps. Afin de décrire les variations de la courbe de température, nous avons superposé la courbe de pression d'air, ainsi que l'allure schématique de la préforme à différents instants.

- Comme l'indiquent les barres d'erreurs, la dispersion sur les mesures est faible, ce qui démontre la bonne reproductibilité des essais. A titre indicatif, la température maximale mesurée est de 114 °C avec un écart type de 1.5 °C.
- Le signal mesuré par le pyromètre augmente avant même que la préforme n'entre en contact avec le moule (point 1 à 3). Ceci s'explique simplement par le fait que la préforme, dès son entrée dans le moule, émet un rayonnement thermique. Après de multiples réflexions dans la cavité délimitée par les parois interne du moule, une fraction du rayonnement est reçue par le pyromètre, augmentant ainsi le signal mesuré.

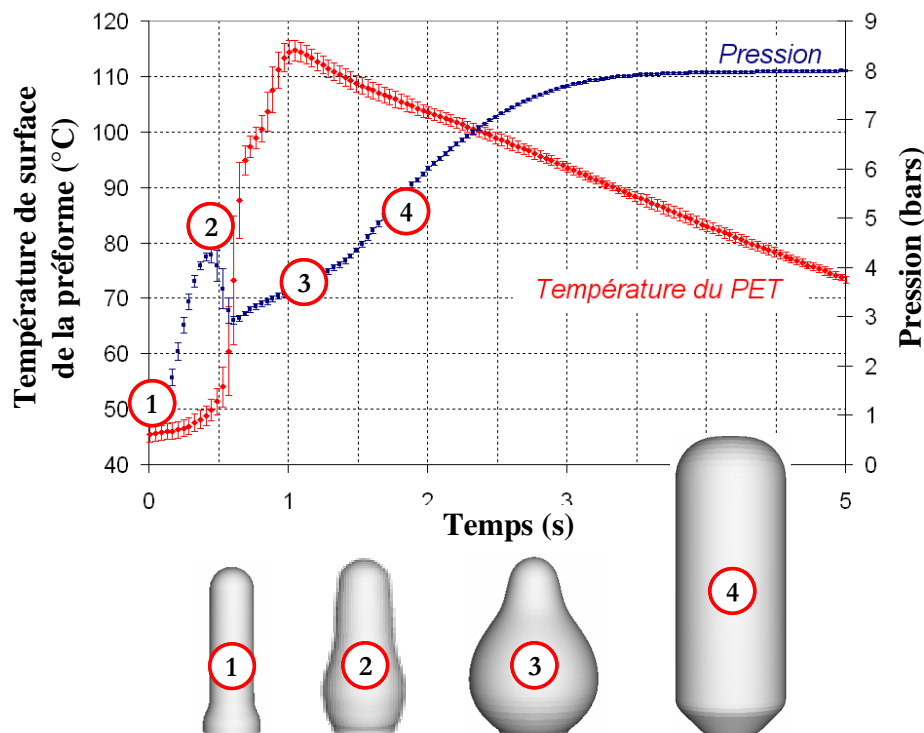


FIG. 3.31 - Température de surface de la préforme et pression d'air au cours du temps – Illustration schématique de l'évolution de la forme de la bouteille – Les barres d'erreurs représentent +/- l'écart type calculé sur neuf essais

- Enfin, une fois le contact avec le moule établi (point 3), la température de la préforme décroît avec une vitesse constante d'environ 10 °C/s. Il est probable que cette valeur sous-estime la vitesse de refroidissement réelle. En effet, l'échange de chaleur à l'interface préforme/pyromètre est différent de celui ayant lieu à l'interface préforme/moule. L'aluminium dont est constitué le moule étant plus effusif que la lentille du pyromètre, il a

tendance à imposer sa température à la préforme plus facilement, et donc à augmenter la vitesse de refroidissement.

En toute rigueur, il est donc nécessaire de traiter les données mesurées en appliquant un modèle correctif lors du post-traitement. Cependant, dans le cadre de notre étude, nous nous intéressons uniquement à la valeur du coefficient d'échange à l'instant précis du contact. Les valeurs mesurées lors du refroidissement ne seront donc pas exploitées.

e) Mesure de la densité de flux de chaleur à l'interface préforme/moule

Le second capteur est destiné à mesurer à la fois la température de surface du moule, et la densité de flux de chaleur à l'interface. *L'étude, la conception, et la fabrication de ce capteur ont été sous-traitées à la société NEOTIM, bureau d'étude spécialisé dans la métrologie thermique.* Comme l'illustre la FIG. 3.30, ce capteur possède les mêmes dimensions qu'un capteur de pression Kistler. Son temps de réponse (donnée constructeur) est estimé à 0.1 s.

Le capteur est composé de deux micro-thermocouples de type K, insérés dans un enrobage cylindrique en aluminium. Afin de limiter les perturbations thermiques (i.e. limiter l'intrusivité de la mesure), l'aluminium utilisé est le même que celui dont est constitué le moule. Les deux thermocouples sont soudés à différentes épaisseurs, perpendiculairement à l'axe longitudinal du capteur (FIG. 3.32). Les thermocouples sont donc perpendiculaires au flux de chaleur si on considère que celui-ci se propage de manière unidirectionnelle à travers l'épaisseur du moule. Les points critiques liés à la conception de ce capteur, notamment la position des thermocouples par rapport à la surface du moule, sont discutés par [DOU-2005].

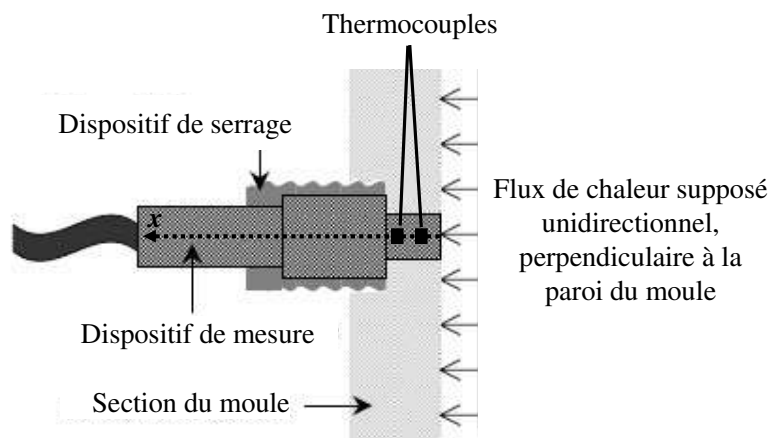


FIG. 3.32 - Illustration du capteur de flux NEOTIM

La conception de ce capteur est similaire à celle des capteurs développés par [DEL-2000], [BEN-2004], [DOU-2005], ou encore [HAM-2008]. Son fonctionnement repose sur une méthode

inverse développée par Beck, basée sur la méthode des fonctions spécifiques et sur le concept des pas de temps futurs. Cette méthode est présentée en détail par [BEC-1986].

Les FIG. 3.33 et FIG. 3.34 illustrent respectivement la variation de la densité de flux de chaleur et la variation de la température de surface du moule au cours du temps.

- Nous pouvons constater que la dispersion des mesures est assez faible. La valeur maximale mesurée pour la densité de flux thermique est de $32 \text{ kW.m}^{-2} \pm 0.4 \text{ kW.m}^{-2}$.
- L'élévation de température du moule est de l'ordre de $1.5 \text{ }^\circ\text{C}$, pour un seul cycle de soufflage. Par conséquent, le moule pourra être considéré comme étant isotherme dans les simulations que nous mettrons en œuvre.
- En toute logique, le flux de chaleur diminue au fur et à mesure que l'écart de température entre la préforme et le moule décroît. Cependant la décroissance du flux n'est pas constante (la pente diminue au cours du temps), contrairement à la décroissance de la température de la préforme (FIG. 3.31). Ceci implique que le coefficient d'échange décroît en fonction du temps.

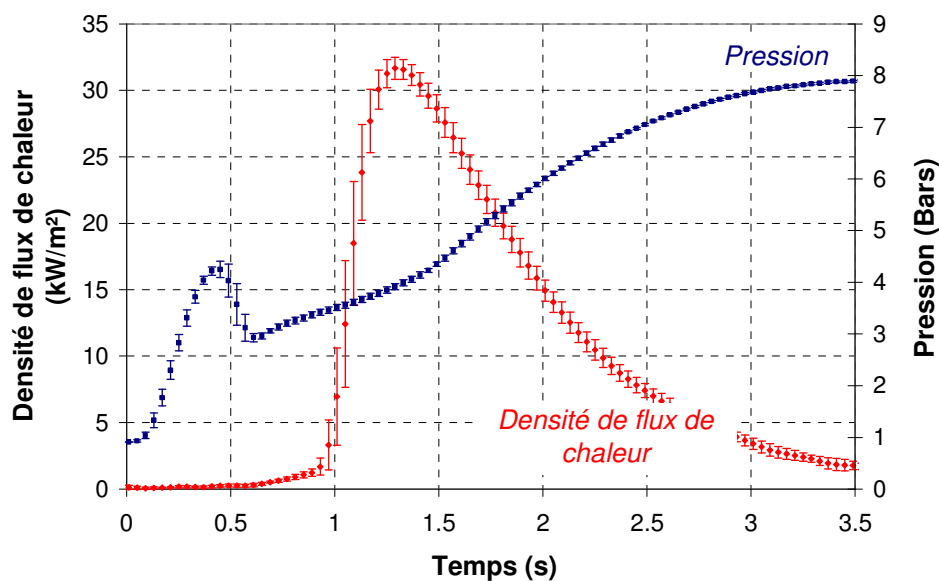


FIG. 3.33 - Mesure de la densité de flux de chaleur à l'interface préforme/moule

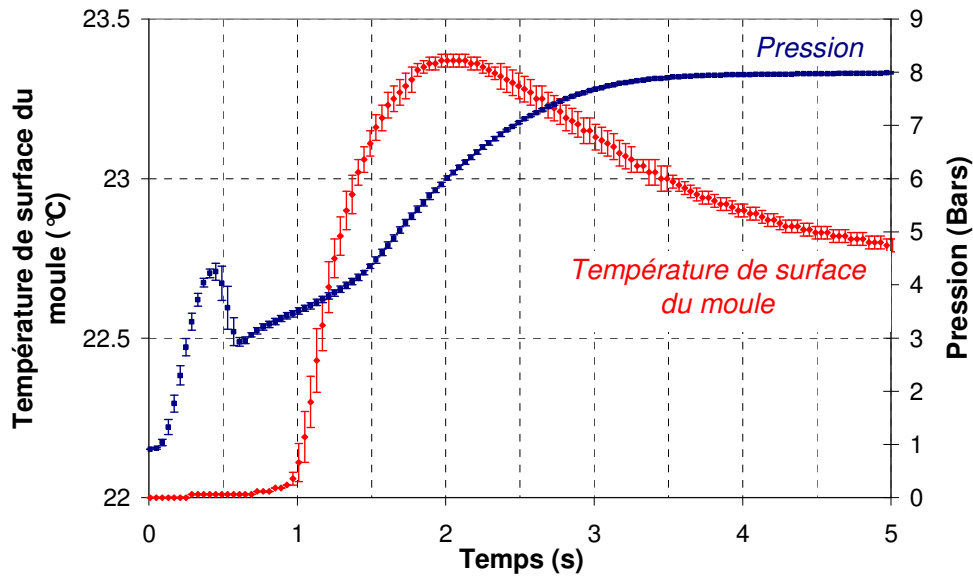


FIG. 3.34 - Mesure de la température du moule au niveau de la paroi interne

f) **Calcul du coefficient d'échange / influence de la pression de soufflage nominale**

La FIG. 3.35 illustre l'évolution du coefficient d'échange en fonction du temps. La valeur maximale mesurée lorsque la préforme entre en contact avec le moule est égale à $287 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1} \pm 6 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, ce qui correspond à une résistance thermique de contact de $3.48 \times 10^{-3} \text{ K.m}^2.\text{W}^{-1}$.

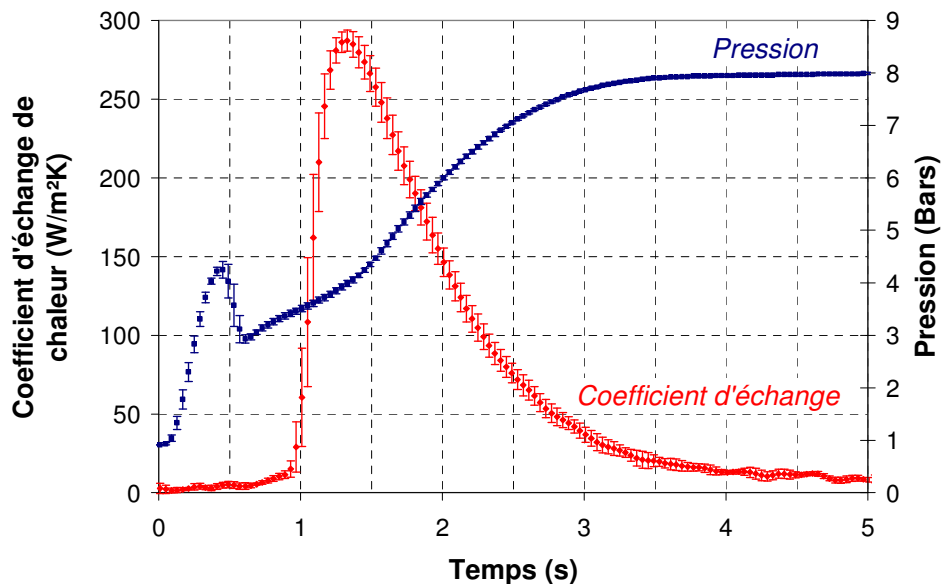


FIG. 3.35 - Mesure du coefficient d'échange thermique préforme/moule

La diminution du coefficient d'échange au cours du temps est difficilement justifiable. Comme l'indique la FIG. 3.35, la pression ne cesse de croître une fois le contact entre la préforme et le

moule établi, ce qui devrait avoir tendance à augmenter le coefficient d'échange. De plus, l'air compris entre la préforme et le moule est évacué par les événements, ce qui devrait aussi améliorer l'échange thermique. Il est vrai que le refroidissement de la préforme provoque une solidification du PET qui épouserait alors moins bien les rugosités du moule, détériorant ainsi la qualité du contact et de l'échange thermique. Cependant il est peu probable que ce phénomène explique à lui seul la chute du coefficient d'échange. Une explication plus vraisemblable est l'erreur de mesure réalisée sur la température de surface du polymère, que nous avons évoqué précédemment. Par conséquent, il semble plus judicieux de ne considérer que la valeur maximale du coefficient d'échange. Cette valeur correspond à l'instant précis de la mise en contact de la préforme avec le moule, elle n'est donc pas entachée de l'erreur de mesure sur la température du PET.

La FIG. 3.36 illustre l'évolution de la valeur maximale du coefficient d'échange en fonction de la pression de soufflage nominale. Cette figure révèle que le coefficient d'échange augmente de manière quadratique avec la pression de soufflage nominale. Ce résultat doit toutefois être nuancé. En effet, les variations du coefficient d'échange sont relativement faibles : doubler la pression induit une augmentation du coefficient d'échange de 12%. Or la dispersion moyenne observée sur les mesures est de $\pm 6.5\%$. Autrement dit, l'amplitude des variations du coefficient d'échange est du même ordre de grandeur que la dispersion des mesures expérimentales. Dans ces conditions, il est difficile de conclure quand à l'allure réelle de la courbe. Il serait préférable de réaliser d'autres essais, notamment en adoptant des pressions plus élevées (pour des pressions inférieures à 5 bars le soufflage de la bouteille est incomplet).

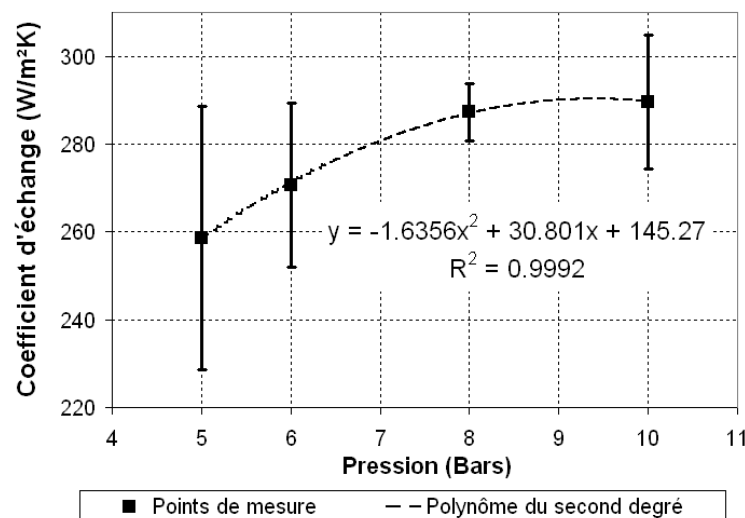


FIG. 3.36 - Influence de la pression de soufflage nominale sur la valeur maximale du coefficient d'échange préforme/moule

3.2.5 Conclusion sur les mesures des conditions aux limites

Les mesures de pression et de débit réalisées sur le pilote de soufflage du CROMeP nous ont d'ores et déjà fourni des informations très riches concernant la cinématique de mise en forme d'une bouteille en soufflage confiné (sans canne d'étirage). Ces mesures vont à présent être exploitées pour réaliser des simulations de soufflage par éléments-finis. L'objet de la partie suivante est de présenter la modélisation adoptée.

3.3 Simulation numérique de l'étape de soufflage

3.3.1 État de l'art

La dernière décennie a vu croître le nombre de modèles numériques développés pour simuler la phase de mise en forme du procédé d'injection-soufflage. En règle générale, les modèles présentés dans la littérature reposent sur la méthode des éléments-finis. Toutefois, une étude récente a démontré que la méthode des éléments naturels C-NEM ("Constrained Natural Element Method") permettait de simuler l'étirage-soufflage d'une préforme en s'affranchissant de certains problèmes propres aux éléments-finis, tels que la distorsion des éléments ou le remaillage [COS-2008]. Bien que certains auteurs proposent des simulations en trois dimensions [WAN-2000], [THI-2007], [CHA-2007], l'usage de maillages axisymétriques en deux dimensions demeure l'approche la plus courante. Les éléments adoptés sont alors de type membrane, coque, ou alors de type solide (quadrangle bi-quadratique à huit nœuds par exemple).

Une des principales différences entre les modèles présentés dans la littérature demeure le choix de la loi de comportement adoptée. Ce point ayant déjà été abordé dans le paragraphe 3.1.3 nous n'y reviendrons pas. Soulignons toutefois que certains travaux intègrent des modèles rhéologiques permettant de prédire l'évolution du taux de cristallinité du PET durant la mise en forme [CHE-2006a], l'orientation moléculaire [LAR-2001], ou encore les propriétés mécaniques de la bouteille [PAR-2003]. D'autres travaux intègrent des modèles qui prennent en compte l'anisotropie du comportement du PET [MIR-2007], [COS-2008].

Comme nous l'avons évoqué au paragraphe 3.2.2, l'application d'une pression en tant que donnée d'entrée du modèle ne permet pas d'obtenir des cinématiques de mise en forme conformes à la réalité [MEN-2007]. C'est pourquoi la tendance actuelle est d'utiliser des modèles thermodynamiques afin de calculer automatiquement la pression de soufflage au cours de la simulation éléments-finis. La pression est calculée à partir du débit d'air injecté dans la préforme, puis appliquée en tant que condition aux limites. Les résultats présentés par [SCH-1995], [BOR-2007a], [MIR-2007], [TAN-2008] démontrent les potentialités de cette approche.

Enfin, des études récentes portent sur le couplage entre des simulations éléments-finis et des algorithmes d'optimisation. L'objectif d'un tel couplage est de déterminer les meilleurs paramètres de réglage de la machine de soufflage [THI-2007], ou encore d'optimiser la distribution de température de la préforme [BOR-2007a], en vue d'uniformiser la répartition d'épaisseur de la bouteille par exemple.

Une revue bibliographique plus complète est présentée sous forme de tableau de synthèse en Annexe B.

Dans cette étude, nous proposons de simuler la phase de soufflage par la méthode des éléments finis, à l'aide du logiciel ABAQUS®. Il serait fastidieux de présenter en détail les méthodes numériques implémentées dans ce logiciel, cependant il convient d'en présenter les points clefs. Cette présentation fait l'objet du paragraphe suivant.

3.3.2 Points clefs du modèle développé avec le logiciel ABAQUS®

a) Le problème thermomécanique

Soit Ω_e un domaine de \mathcal{R}^2 dont la frontière est notée Γ . Le problème thermomécanique est traduit mathématiquement par le système suivant :

$$\begin{cases} \text{(a)} & \nabla \cdot \sigma + f_v = 0 \\ \text{(b)} & \nabla \cdot v = 0 \\ \text{(c)} & \rho c p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \sigma : \dot{\epsilon} \\ \text{(d)} & \sigma = -pI + 2k_0(T) (1 - \exp(-A\bar{\epsilon})) \exp(B\bar{\epsilon}^C) (\sqrt{3}\dot{\epsilon})^{m-1} \dot{\epsilon} \end{cases} \quad (3.27)$$

où f_v désigne les forces volumiques, et v le vecteur vitesse d'un point matériel du domaine Ω_e . La première équation (3.27a), appelée équation d'équilibre dynamique local, traduit la conservation de la quantité de mouvement dans Ω_e . La seconde équation (3.27b) est l'équation de continuité écrite en adoptant l'hypothèse d'incompressibilité du milieu. Elle traduit la conservation de la matière dans Ω_e . L'équation de la chaleur (3.27c) traduit la conservation de l'énergie interne de Ω_e . Le produit contracté $\sigma : \dot{\epsilon}$ représente l'énergie volumique dissipée par frottement visqueux. Enfin, la dernière équation est la loi viscoplastique adoptée pour modéliser le comportement mécanique du PET.

✓ Conditions initiales

Les conditions initiales associées à ce problème sont les suivantes :

$$\begin{cases} \sigma(s, t) = 0 \\ v(s, t) = 0 \\ T(s, t) = T_0(s) \end{cases} \quad (3.28)$$

où $T_0(s)$ désigne la distribution de température initiale en tout point s dans Ω_e (distribution de température de la préforme à l'issue de l'étape de conditionnement thermique).

✓ Conditions aux limites

La frontière du domaine Ω_e peut être décomposée comme suit :

$$\Gamma = \Gamma_{int}^l \cup \Gamma_{ext}^l \cup \Gamma^c \quad (3.29)$$

où Γ_{int}^l désigne la surface libre, de normale sortante n_{pi} , correspondant à la paroi interne de la préforme, Γ_{ext}^l la surface libre, de normale sortante n_{pe} , correspondant à la paroi externe de la préforme, et Γ^c la surface, de normale sortant n_c , en contact avec le moule. La FIG. 3.37 illustre les notations adoptées.

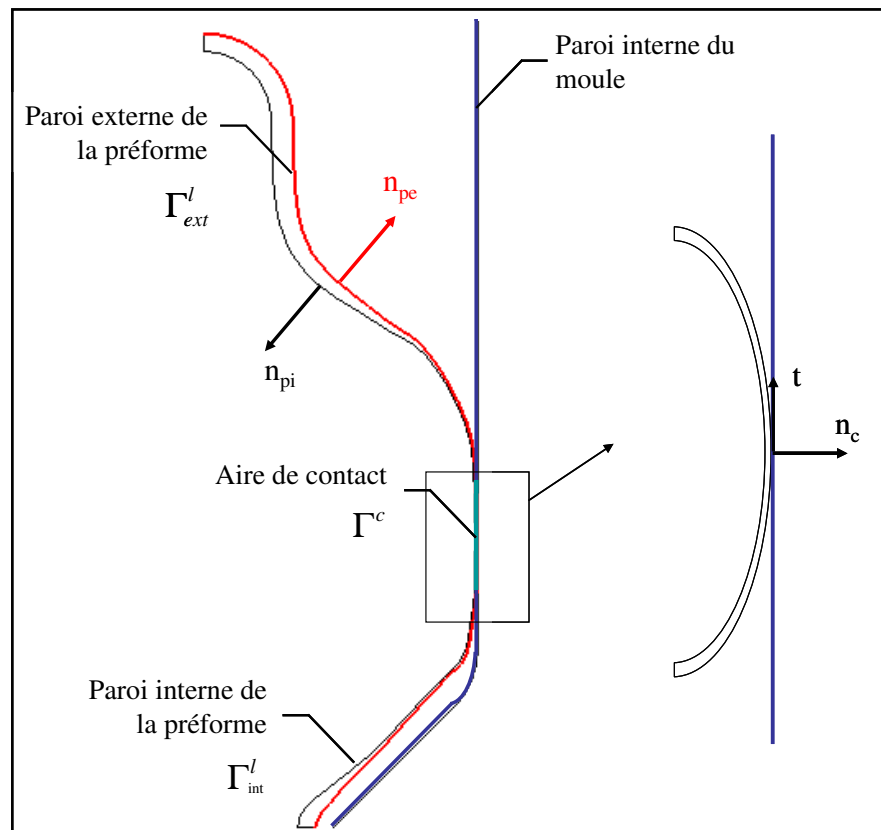


FIG. 3.37 - Notations adoptées pour l'expression des conditions aux limites

- Conditions aux limites thermiques

Tout d'abord, la densité de flux de chaleur à l'interface préforme/moule s'exprime comme suit :

$$-k \frac{\partial T}{\partial n_c} \Big|_{\Gamma^c} = \frac{(T - T_M)}{R_{Th}} \quad (3.30)$$

où R_{Th} désigne la résistance thermique de contact entre la préforme et le moule, et T_M la température de la paroi interne du moule. Comme l'illustre la FIG. 3.34, l'augmentation de la température de la paroi interne du moule, pour un cycle de soufflage, est inférieure à 1.5 °C. Par conséquent, nous supposons que la température du moule est constante : $T_M = 22$ °C. La

valeur adoptée pour la résistance thermique de contact est : $R_{Th} = 3.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{KW}^{-1}$. Tel que l'illustre la FIG. 3.36, cette valeur a été mesurée pour une pression nominale de 8 bars. Elle est équivalente à un coefficient d'échange égal à $285 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$.

La paroi interne de la préforme est soumise à des transferts de chaleur convectifs avec l'air insufflé sous pression. Ces transferts thermiques sont pris en compte grâce à une condition aux limites de type Fourier :

$$-k \frac{\partial T}{\partial n_{pi}} \Big|_{\Gamma_{int}^l} = h_a (T - T_a) \quad (3.31)$$

où h_a désigne le coefficient d'échange convectif moyen entre l'air et la paroi interne de la préforme. La valeur du coefficient d'échange adoptée par [SCH-1995] et [YAN-2004] est égale à $10 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$. Ce coefficient d'échange est environ trente fois inférieur au coefficient d'échange entre la préforme et le moule. Par conséquent, les transferts convectifs sont négligeables devant les échanges de chaleur générés au niveau de l'interface préforme/moule. De plus, [SCH-1995] démontre, à l'aide d'un modèle analytique, que le refroidissement de la préforme par convection est négligeable durant la phase de soufflage précédant la mise en contact de la préforme avec le moule. La diminution de température de la préforme est inférieure à $1 \text{ }^\circ\text{C}$ pour un temps de soufflage de 1.5 s et un coefficient d'échange égal à $40 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$. Par conséquent, les transferts de chaleur convectifs seront négligés dans notre modèle.

- Conditions aux limites mécaniques

La paroi interne de la préforme (frontière Γ_{int}^l) est soumise à une surpression ΔP :

$$\sigma \cdot n_i = -\Delta P \cdot n_i \quad (3.32)$$

La surface libre de la paroi externe de la préforme (frontière Γ_{ext}^l) est soumise à une surpression nulle :

$$\sigma \cdot n_e = 0 \quad (3.33)$$

Enfin, les conditions aux limites imposées sur l'aire de contact (frontière Γ^c) sont les suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} \text{(a)} \quad u \cdot n = 0 \\ \text{(b)} \quad F_n \leq 0 \\ \text{(c)} \quad F_t = 0 \\ \text{(d)} \quad (u \cdot n) F_n = 0 \end{array} \right\} \quad (3.34)$$

où F_n et F_t désignent respectivement les efforts normaux et les efforts tangentiels, et u désigne le vecteur déplacement. L'équation 3.34a traduit la condition de non pénétration du corps déformable (la préforme) dans le corps rigide (le moule). L'équation 3.34b indique que les efforts normaux ne peuvent correspondre qu'à de la compression. L'équation 3.34c traduit l'absence de forces tangentielles de frottement. Enfin, l'équation 3.34d, appelée condition de complémentarité, indique qu'en un point il y a soit contact, soit décollement.

Ces équations forment les *conditions de contact unilatéral sans frottement*. L'hypothèse simplificatrice du contact collant unilatéral entre le moule et la préforme est adoptée dans la quasi-totalité des études répertoriées en Annexe B (état de l'art sur la simulation numérique du procédé d'injection-soufflage). Toutefois, le frottement entre la préforme et le moule pourrait avoir une influence non-négligeable sur la distribution d'épaisseur de la bouteille. Une des perspectives de ce travail serait d'étudier l'influence du glissement en adoptant, par exemple, la loi de frottement de Coulomb. Cette étude requiert toutefois la mesure du coefficient de frottement.

b) Options choisies pour la résolution numérique

Le problème thermomécanique est résolu par la méthode des éléments-finis, en utilisant le logiciel ABAQUS[®] standard 6.4. Nous avons choisi de résoudre le problème en deux dimensions, en adoptant l'hypothèse d'axisymétrie. Une présentation détaillée de la discrétisation des équations du problème thermomécanique est proposée par [ABA-2003]. Le solveur implémenté dans ABAQUS[®] considère un couplage thermomécanique fort. Le problème thermique et le problème mécanique sont alors résolus simultanément. L'intégration temporelle est réalisée par un schéma implicite qui, bien qu'étant inconditionnellement stable, requiert la résolution d'un problème non linéaire par la méthode itérative de Newton [MIN-1983]. Le pas de temps est automatiquement calculé suivant la méthode proposée par Hilber, Hughes, et Taylor [HIL-1977]. Enfin, la méthode du Lagrangien augmenté est utilisée pour la résolution numérique du problème de contact [FOR-1982].

c) Calcul de la pression de soufflage

Le calcul automatique de la pression de soufflage est réalisé à l'aide d'éléments spéciaux dénommés "hydrostatic fluid elements", disponibles dans le logiciel ABAQUS[®] [ABA-2003]. La mise en œuvre de ces éléments consiste à mailler la paroi interne de la préforme, afin de délimiter le contour de la cavité dans laquelle la pression sera calculée. La FIG. 3.38 illustre un exemple de maillage. Un nœud de référence, situé sur le point d'origine du repère global, sert à construire des éléments de surface dont les aires respectives (notées A_i sur la FIG. 3.38) sont calculées à partir des coordonnées des nœuds du maillage. Les volumes correspondant sont alors calculés par intégration. La somme des volumes est égale au volume total de la cavité

délimitée par la paroi interne de la préforme. Cette procédure est appliquée à chaque incrément de temps, afin de réactualiser le volume d'air situé à l'intérieur de la préforme. Les hypothèses adoptées pour le calcul de la pression sont les suivantes :

- La température de l'air, ainsi que sa pression, sont considérées comme étant uniformes dans tout le volume de la cavité.
- Les variations de température de l'air au cours du temps sont négligées. Il s'agit d'une hypothèse simplificatrice forte que nous n'avons pas validée expérimentalement. En réalité, la détente de l'air, générée par l'augmentation brutale du volume de la préforme, est susceptible d'induire un refroidissement de l'air non négligeable. Toutefois, ce refroidissement est limité par l'apport de chaleur de l'air injecté au cours du temps, ainsi que par les transferts convectifs avec la paroi interne de la préforme.
- La cavité, dont la frontière est délimitée par la paroi interne de la préforme, constitue un système fermé à chaque incrément de temps infinitésimal.

La surpression imposée sur la paroi interne de la préforme est alors directement reliée au volume de la cavité de la préforme V_a , et peut être calculée suivant la loi des gaz parfaits :

$$\Delta P(t) = \frac{m_a(t)rT_a}{V_a(t)} \quad (3.35)$$

où r désigne la constante des gaz parfait, T_a la température de l'air injecté dans la cavité, et $m_a(t)$ la masse d'air située dans la cavité de la préforme à l'instant t .

A chaque incrément de temps, la masse d'air comprise dans la cavité est réactualisée en prenant en compte la variation du débit de soufflage au cours du temps :

$$m_a(t + dt) = m_a(t) + \int_t^{t+dt} q(t)dt \quad (3.36)$$

où $q(t)$ désigne le débit massique d'air injecté dans la cavité de la préforme à l'instant t .

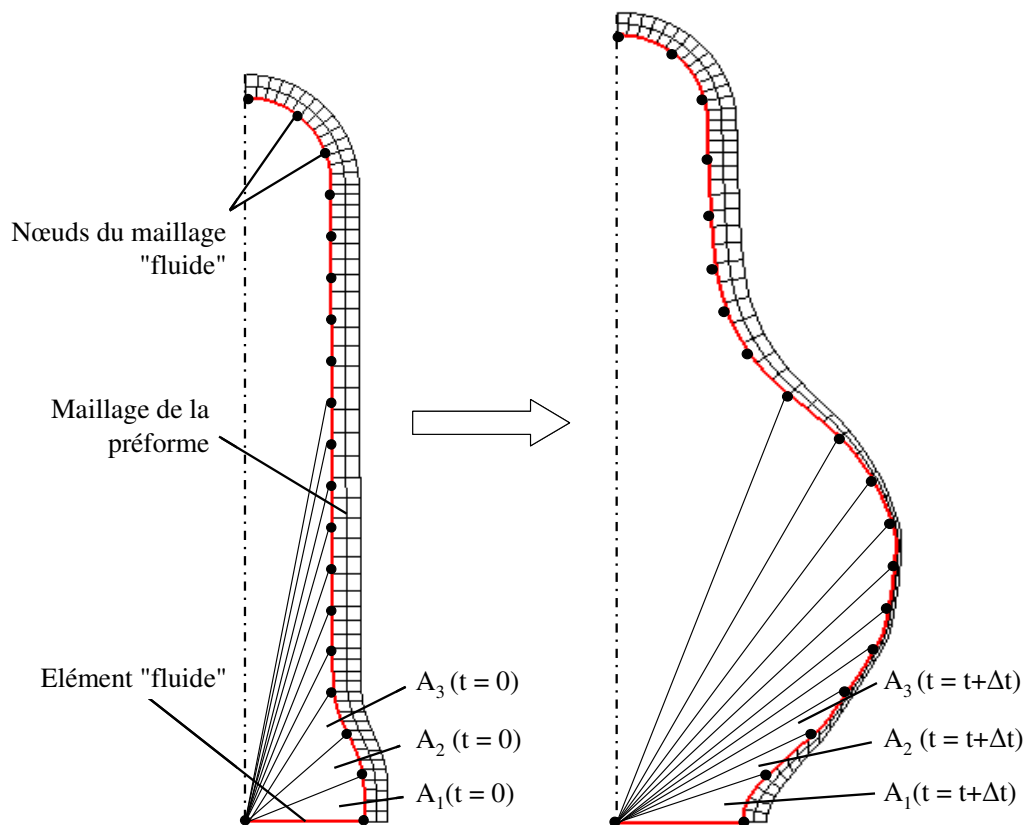


FIG. 3.38 - Maillage de la cavité délimitée par la paroi interne de la préforme pour le calcul automatique de la pression de soufflage

d) Maillage de la préforme

Une étude paramétrique présentée par [MEN-2001] démontre que l'emploi d'éléments de type membrane ou coque permet de calculer l'épaisseur de la bouteille avec une précision similaire à celle obtenue avec des éléments de type quadrangle à 8 nœuds. De plus, les éléments coques ou membranes réduisent sensiblement les temps de calcul et limitent les problèmes de distorsion. Toutefois, ces éléments requiert de mailler la paroi médiane de la préforme (ligne médiane entre la paroi interne et la paroi externe). Le maillage de la paroi interne conduirait à des erreurs importantes. Malheureusement, le maillage de la paroi médiane induit une erreur sur le calcul du volume de la préforme supérieure à 30 %, ce qui génère une erreur inacceptable sur le calcul de la pression de soufflage. C'est pourquoi nous avons opté pour un maillage composé d'éléments quadrangulaires axisymétriques bi-quadratiques, désignés par la dénomination CAX8T dans le logiciel ABAQUS®. La FIG. 3.38 illustre un exemple de maillage.

3.3.3 Simulation numérique du soufflage d'une bouteille 50 cl à fond plat

a) Configuration adoptée

Afin de valider le modèle numérique, nous avons simulé la mise en forme d'une bouteille dans les mêmes conditions opératoires que celles utilisées sur le pilote instrumenté du CROMeP. La bouteille de l'étude est illustrée par la FIG. 3.24. Ses dimensions sont illustrées par la Fig. 3.39. Il s'agit d'une bouteille de géométrie simple (50 cl à fond plat) mise en forme sans canne d'étrépage. La préforme est identique à celle présentée au paragraphe 3.2.2 (FIG. 3.26). Il s'agit d'une préforme 18 g injectée par la société Logoplaste à partir de PET T74F9.

Le maillage adopté pour la préforme est réalisé avec le logiciel IDEAS[®]. Il s'agit d'un maillage structuré, composé de 100 éléments (405 nœuds) quadrangulaires bi-quadratiques. Le moule est modélisé par une surface rigide maillée à l'aide de 410 éléments linéaires. La Fig. 3.39 illustre la géométrie du problème ainsi que les conditions aux limites appliquées. Le temps de calcul obtenu avec cette configuration est de 26 min CPU (Pentium 4 2.8 GHz 512 Mo RAM). L'influence du maillage sur les temps de calcul et sur la précision n'a pas été étudiée. Ce point fait toutefois partie des perspectives de ce travail.

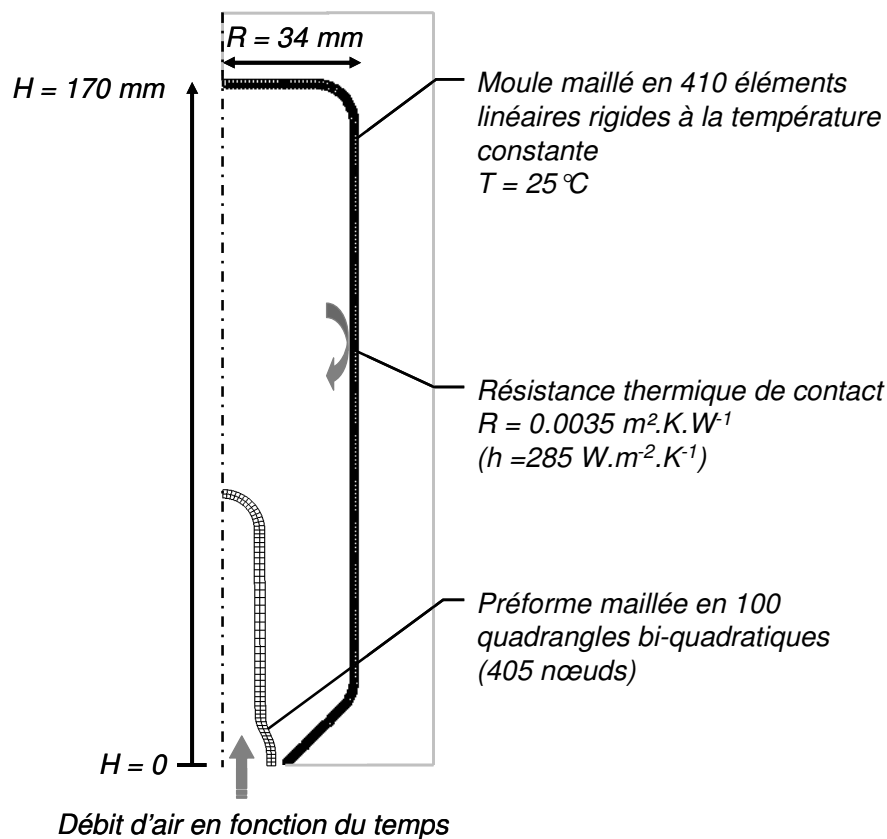


Fig. 3.39 - Illustration des maillages et des conditions aux limites adoptés

b) Validation des résultats numériques

Le premier critère utilisé pour valider les résultats numériques est la distribution d'épaisseur de la bouteille. Expérimentalement, l'épaisseur de la bouteille est mesurée avec une sonde magnétique. Cette sonde est appliquée sur la paroi externe de la bouteille, tandis qu'une bille en acier est placée sur la face opposée. Un capteur à effet Hall intégré mesure la distance entre l'extrémité de la sonde et la bille, donnant ainsi la valeur de l'épaisseur avec une précision de $\pm 3\%$. La Fig. 3.40 illustre le principe de la mesure.



Fig. 3.40 - Principe de la mesure d'épaisseur

La Fig. 3.41 illustre la distribution d'épaisseur de la bouteille. Les barres d'erreur associées à la courbe expérimentale représentent la dispersion sur les mesures (± 1 écart type basé sur une série de 6 essais). Nous pouvons constater un bon accord, tant qualitatif que quantitatif, entre les épaisseurs calculées et celles mesurées expérimentalement. Tel que l'illustre la Fig. 3.42, l'erreur relative entre l'épaisseur calculée et l'épaisseur mesurée varie entre 2 % et 41 %. L'erreur relative moyenne est égale à 16 %.

A mi-hauteur de la bouteille ($60 < H < 90$ mm), l'épaisseur calculée est légèrement supérieure à l'épaisseur mesurée. Ce phénomène est inversé vers le fond de la bouteille ($H > 120$ mm) où le modèle sous-estime l'épaisseur réelle. C'est dans cette zone que l'erreur relative atteint son maximum. L'explication la plus plausible est l'erreur numérique générée par la distorsion du maillage. Les éléments du maillage qui présentent le plus de distorsion sont ceux situés au niveau de la calotte de la préforme, autrement dit ceux situés au niveau du fond de la bouteille à la fin de la simulation. Ce phénomène pourrait être limité en utilisant des techniques de remaillage. Malheureusement, la version d'ABAQUS[®] que nous avons utilisée (ABAQUS[®] 6.4 standard) ne le permet pas. Une perspective intéressante serait d'utiliser la version explicite d'ABAQUS[®] qui dispose, quant à elle, d'un remaillageur automatique.

Les conditions de contact adoptées pourraient elles aussi avoir une influence sur l'erreur observée au niveau du fond de la bouteille. En effet, nous avons considéré un contact collant unilatéral pour lequel tout glissement de la matière au contact du moule est interdit. En réalité, l'existence d'un léger glissement du PET au niveau de la paroi du moule pourrait affecter la répartition de la matière.

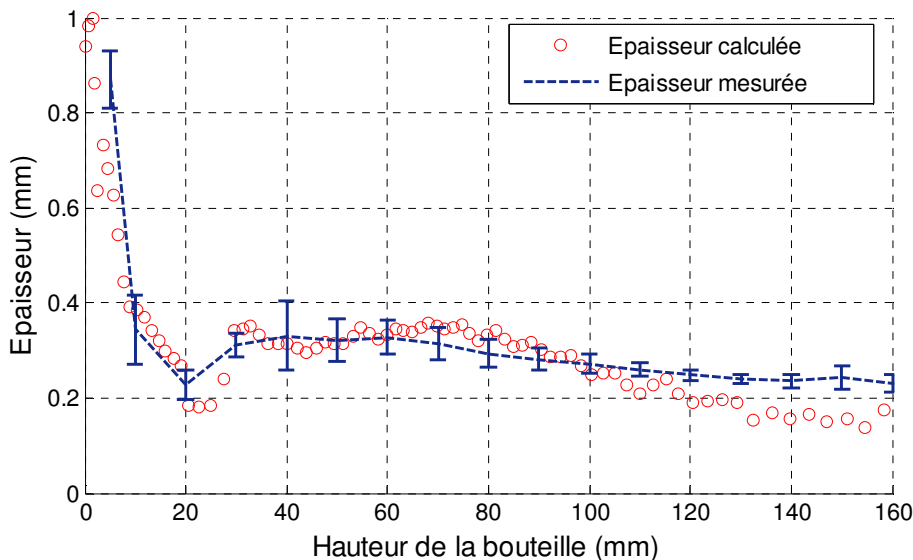


Fig. 3.41 - Distribution d'épaisseur de la bouteille – Comparaison des résultats numériques et expérimentaux

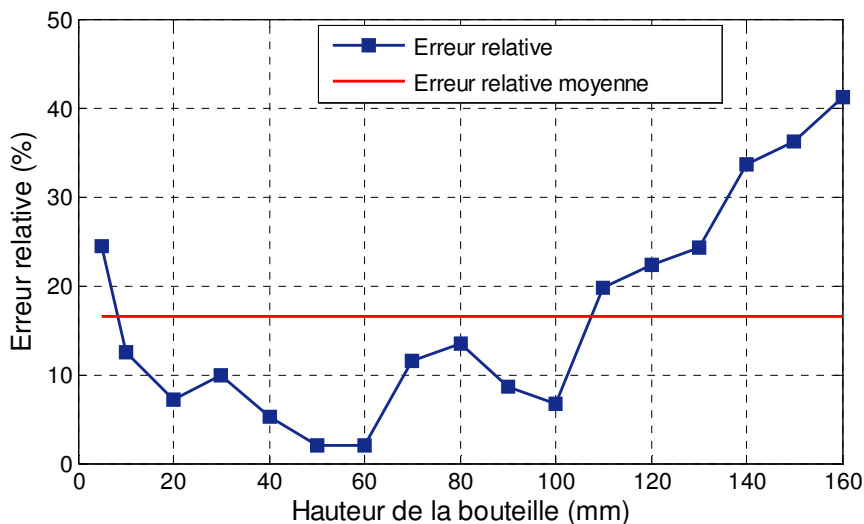


Fig. 3.42 - Erreur relative entre l'épaisseur calculée et l'épaisseur mesurée

Le second critère utilisé pour valider les résultats numériques est l'évolution de la pression de soufflage au cours du temps. La FIG. 3.43 illustre les résultats obtenus. Cette figure présente aussi les variations du volume de la bouteille calculé à chaque incrément de temps. Nous

pouvons constater un bon accord qualitatif entre la pression mesurée expérimentalement et la pression calculée par le modèle thermodynamique.

- L'application d'un débit d'air variable au cours du temps permet d'obtenir une courbe de pression qui converge vers une pression nominale. L'erreur relative sur cette pression nominale, calculée en fin de soufflage (à $t = 4$ s), est de 16 %.
- La pression requise pour amorcer la déformation (à $t = 0.6$ s) est bien estimée. Cependant la chute de pression qui succède cet instant est surestimée par le modèle.
- Numériquement, la bouteille atteint son volume final après 1.25 s de soufflage, tel que l'indique la courbe de volume. Cet instant coïncide avec une rupture de pente de la courbe de pression calculée. La courbe de pression expérimentale présente une rupture de pente similaire à $t = 1.75$ s, bien qu'elle soit moins prononcée (FIG. 3.43). Nous pouvons raisonnablement supposer que c'est à cet instant que la bouteille est réellement formée (cependant nous ne l'avons pas vérifié expérimentalement). Ceci indique que le modèle sous-estime le temps nécessaire à la mise en forme de la bouteille.

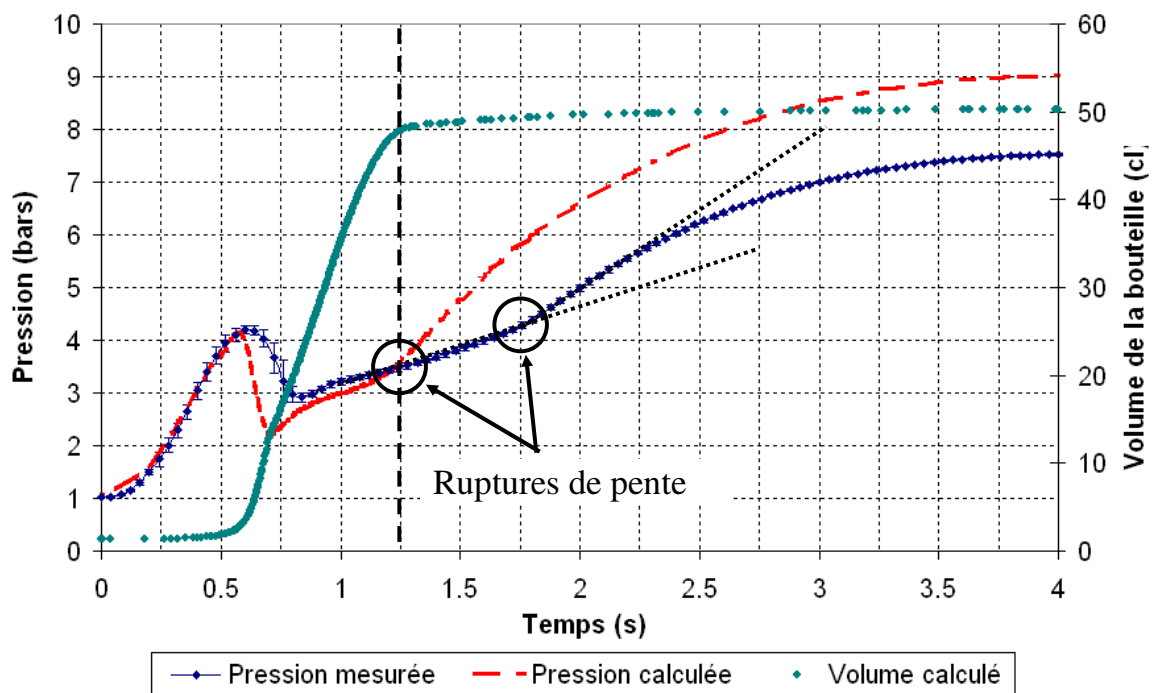


FIG. 3.43 - Variations de la pression de soufflage et du volume de la bouteille au cours du temps – Comparaison entre la pression mesurée et la pression calculée

- Enfin, la chute de pression observée à $t = 0.6$ s correspond bien à une brusque augmentation du volume de la bouteille. Ceci est confirmé par la courbe de volume calculée par le modèle (FIG. 3.43), mais aussi par l'évolution de la forme de la bouteille, illustrée par la FIG. 3.44. Ce résultat est en accord avec les résultats expérimentaux présentés par [TAN-2008].

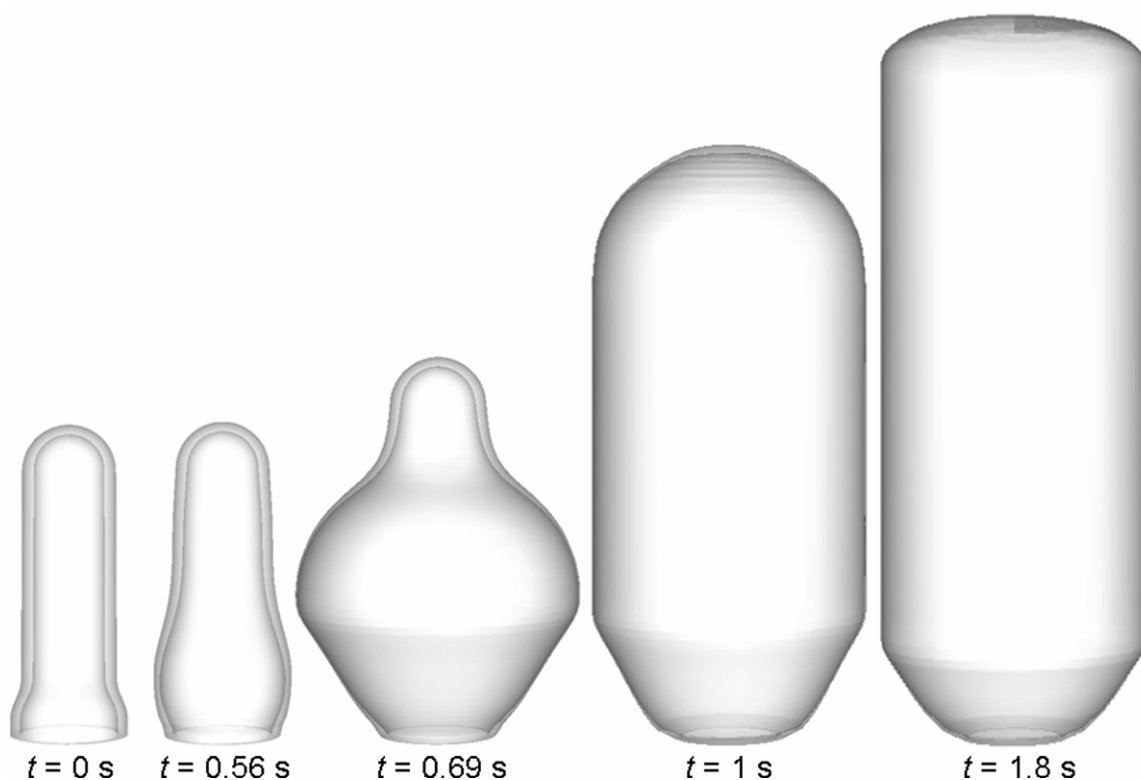


FIG. 3.44 - Évolution de la forme de la bouteille au cours du soufflage

3.3.4 Conclusion sur la validation des résultats numériques

Les essais expérimentaux réalisés sur le pilote de soufflage du CROMeP nous ont permis de valider le modèle numérique. Cette étude révèle que le modèle est capable de calculer la distribution d'épaisseur de la bouteille avec une erreur relative moyenne égale à 16 %. De plus, nous avons observé un accord qualitatif entre la pression d'air de soufflage, calculée par le modèle, et celle mesurée expérimentalement. Ceci indique que le modèle est capable de prédire convenablement la cinématique de mise en forme. Afin de confirmer ce résultat, il serait intéressant de valider expérimentalement le calcul de l'évolution de la forme de la bouteille au cours du temps. Le pilote de soufflage du CROMeP étant disposé d'un moule transparent (dont les dimensions sont identiques à celles du moule utilisé dans le cadre de notre étude), cette validation pourrait être réalisée avec une caméra rapide.

3.4 Conclusion partielle

La simulation de l'étape de soufflage fait appel à des disciplines transverses parmi lesquelles la rhéologie joue un rôle majeur. La modélisation du comportement mécanique du PET apparaît clairement comme un point critique du modèle. Il est évident que la loi de comportement de G'Sell que nous avons choisi de mettre en œuvre reste limitée. Elle ne permet pas de représenter le comportement du PET sur une large gamme de températures et de vitesses de déformation. Cependant, compte tenu de notre objectif qui consiste à coupler les simulations à un algorithme d'optimisation, cette loi de comportement présente de nombreux atouts. Tout d'abord elle fournit un bon compromis entre précision et temps de calcul. De plus, du fait de sa nature visqueuse, elle contribue à la robustesse des simulations éléments-finis. Enfin, elle demeure relativement simple à implanter dans un logiciel de calcul tel qu'ABAQUS®.

Les perspectives concernant l'amélioration du modèle rhéologique sont nombreuses. Tout d'abord, nous avons proposé différentes alternatives pour améliorer la thermodépendance du modèle. Il serait intéressant d'étudier leurs influences sur la simulation du soufflage. D'autre part, l'ajout d'une consistance orthotrope, ou d'une consistance dépendante de taux de cristallinité pourrait avoir un impact majeur sur la qualité des résultats sans altérer la stabilité du calcul.

La rhéologie du PET n'est pas le seul élément affectant la précision des simulations. Le choix des conditions aux limites thermiques et mécaniques joue aussi un rôle déterminant. C'est pourquoi nous avons développé des dispositifs expérimentaux afin de mesurer des conditions aux limites telles que le débit d'air injecté dans la préforme, ou encore la résistance thermique de contact entre la préforme et le moule.

Nous avons mis en évidence que la mesure de la température de la préforme était entachée d'une erreur, du fait que l'aluminium dont est composé le moule est plus effusif que la lentille du pyromètre. Par conséquent, une perspective importante serait d'ajouter un modèle correctif à ce protocole expérimentale afin de corriger les données mesurées lors du post-traitement. Il serait alors possible de mesurer les variations du coefficient d'échange au cours du temps avec une plus grande fiabilité.

Un des principaux atouts du modèle numérique que nous avons présenté est probablement le calcul automatique de la pression de soufflage. Nous avons démontré que cette méthode permet d'obtenir des cinématiques de mise en forme conformes à la réalité, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on applique la pression de soufflage en tant que donnée d'entrée du modèle. De plus, pour un débit d'air donné, les variations de la pression au cours du temps seront recalculées automatiquement si l'on modifie la distribution de température de la préforme. Ce point est particulièrement important compte tenu de notre objectif qui est d'optimiser la distribution de

température de la préforme à l'aide d'une procédure automatique. D'autre part nous avons montré que le modèle est capable de calculer la distribution d'épaisseur de la bouteille avec une erreur relative de 16 %.

En dépit des bons résultats que fournit le modèle, différentes améliorations pourraient être envisagées. Tout d'abord la procédure utilisée pour calculer le volume de la bouteille requiert l'utilisation d'un maillage volumique. Il serait préférable d'utiliser des éléments de type membrane ou coque afin de réduire les temps de calcul et d'éliminer les problèmes de distorsion d'éléments. Pour cela, il est nécessaire de modifier le modèle afin de corriger le calcul du volume de la bouteille. D'autre part le modèle thermodynamique d'ABAQUS[®] est en toute rigueur réservé aux systèmes fermés. Il serait intéressant d'étudier la possibilité de généraliser ce modèle aux systèmes ouverts, ou encore d'ajouter l'effet de l'inertie de l'air qui pourrait avoir un effet non négligeable lorsque les débits sont élevés.

En conclusion, bien que le modèle numérique que nous avons présenté possède des lacunes évidentes, notamment au niveau de la loi de comportement adoptée, nous avons démontré sa validité dans le cas du soufflage d'une bouteille de géométrie simple. Sa robustesse, ainsi que les temps de calcul modérés qu'il induit permettent d'envisager un couplage avec un algorithme d'optimisation. Toute la problématique consiste à présent à déterminer une distribution de température optimale pour la préforme permettant, par exemple, d'obtenir une bouteille d'épaisseur uniforme. L'objectif ultime de l'étude sera alors d'identifier les paramètres de réglage du four IR permettant d'obtenir cette distribution de température optimale. Pour atteindre ces deux objectifs, nous allons mettre en œuvre une stratégie d'optimisation que nous présentons dans le chapitre suivant.

Chapitre 4

Optimisation du chauffage infrarouge

Dans les chapitres précédents, nous avons présenté les modèles mis en œuvre pour simuler les deux principales étapes du procédé d'injection-soufflage en cycle froid : le conditionnement thermique de la préforme, et le soufflage de la bouteille. Dans ce chapitre, nous proposons de coupler ces modèles numériques avec des algorithmes d'optimisation dans le but d'optimiser l'étape de chauffage IR.

La stratégie adoptée se décompose en deux étapes. Dans un premier temps, nous optimisons la distribution de température de la préforme à la sortie du four IR. L'objectif est d'obtenir une bouteille dont l'épaisseur est la plus uniforme possible. La seconde étape consiste à optimiser les paramètres de réglage du four IR afin d'obtenir la distribution de température identifiée dans la première étape. En résumé, notre problématique générale est la suivante : comment obtenir une bouteille d'épaisseur la plus uniforme possible, en modifiant uniquement les paramètres de réglage du four IR ?

Ce chapitre s'articule autour de trois parties. Tout d'abord, nous proposons un état de l'art des algorithmes d'optimisation non-linéaire, continue. Après avoir présenté les avantages et inconvénients propres à chacune des familles de méthodes, nous proposons des critères permettant de choisir un algorithme d'optimisation adapté. Nous présentons ensuite les deux algorithmes mis en œuvre dans cette étude. Dans une seconde partie, nous mettons en œuvre le modèle de soufflage présenté dans le troisième chapitre afin d'optimiser la distribution de température de la préforme. Enfin, la dernière partie de ce chapitre est consacrée à l'optimisation des paramètres de chauffage du four IR. Les résultats sont comparés avec ceux obtenus lors d'une campagne d'essais menée par la société Logoplaste dans le cadre du projet APT_PACK.

Table des matières

4.1	Les méthodes d'optimisation non-linéaires.....	127
4.1.1	Introduction : terminologie.....	127
a)	Définition d'un problème d'optimisation.....	127
b)	Minimum global et minimum local.....	128
4.1.2	Classification des méthodes d'optimisation non-linéaire	129
a)	Les méthodes d'optimisation globale.....	129
b)	Les méthodes d'optimisation locale.....	131
c)	Les méthodes d'optimisation hybrides.....	133
d)	Synthèse : critères utilisés pour le choix d'un algorithme	134
e)	Choix des algorithmes	136
4.1.3	L'algorithme SQP ("Sequential Quadratic Programming") Matlab®.....	138
a)	Conditions d'optimalité de Karush-Kuhn-Tucker (KKT).....	138
b)	Principe de base des méthodes SQP : approximation quadratique du PG.....	139
c)	Approximation du Hessien par une méthode quasi-Newton.....	140
d)	Résolution du sous problème quadratique.....	140
e)	Calcul du pas par optimisation unidimensionnelle.....	141
f)	Critères d'arrêt	142
g)	Propriétés de l'algorithme SQP Matlab®.....	143
4.1.4	L'algorithme de Nelder-Mead.....	144
a)	Présentation de l'algorithme	144
b)	Ajout des contraintes linéaires d'inégalités par la méthode de pénalité.....	147
c)	Ajout des contraintes de type borne par la méthode de changement de variable ..	152
d)	Application de la méthode de Nelder-Mead à la minimisation d'une fonction bruitée – comparaison avec l'algorithme SQP	153
4.1.5	Conclusion de l'étude bibliographique	156
4.2	Optimisation de la distribution de température de la préforme.....	157
4.2.1	Positionnement du problème	157
a)	Objectifs et démarche adoptée	157
b)	Paramétrisation.....	157
c)	Définition des contraintes.....	159
d)	Définition de la fonction coût.....	159
4.2.2	Résultats et discussion	160
4.2.3	Conclusion sur l'optimisation de la distribution de température de la préforme	164
4.3	Optimisation des paramètres de réglage du four IR	165
4.3.1	Positionnement du problème	165
a)	Objectif de l'optimisation	165

b)	Configuration du four IR.....	165
c)	Conditions aux limites adoptées pour les simulations.....	166
d)	Maillage de la préforme	167
e)	Variables d'optimisation, contraintes, et fonction coût.....	167
4.3.2	Résultats et discussion	168
4.3.3	Conclusion sur l'optimisation des paramètres de réglage du four IR.....	171
4.4	Conclusion partielle.....	172

4.1 Les méthodes d'optimisation non-linéaires

4.1.1 Introduction : terminologie

a) Définition d'un problème d'optimisation

Le principe général des méthodes d'optimisation présentées dans ce chapitre est illustré par la FIG. 4.1.

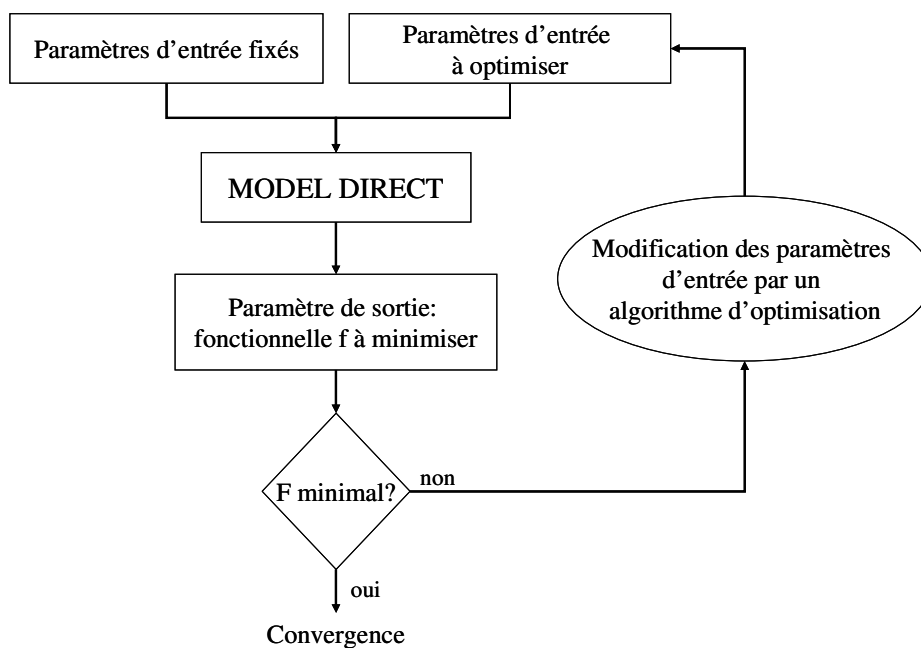


FIG. 4.1 - Principe générale des méthodes d'optimisation présentées

L'optimisation repose sur la minimisation d'une fonctionnelle f , appelée *fonction coût*, ou *fonction objectif*. Cette fonction, calculée par le biais d'un *modèle direct*, admet comme données d'entrées les variables d'optimisation x . Le rôle de l'algorithme d'optimisation est de modifier itérativement les variables x jusqu'à convergence. Pour un modèle direct non-linéaire et des variables contraintes, le problème d'optimisation est dit non-linéaire sous contraintes. La traduction mathématique de ce type de problème est la suivante :

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathfrak{R}^n} f(x) \\ g(x) \leq 0 \\ h(x) = 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

où les fonctions $g : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}^m$ et $h : \mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}^p$ désignent respectivement les contraintes d'inégalités et d'égalités. Ces fonctions peuvent être linéaires ou non-linéaires.

b) Minimum global et minimum local

En notant $\mathcal{E} = \{x \in \mathfrak{R}^n / g(x) \leq 0; h(x) = 0\}$ l'ensemble des solutions réalisables, une solution x^* du problème (3.1) est appelée *minimum global* si elle vérifie la relation :

$$\forall x \in \mathcal{E}, \quad f(x) \geq f(x^*) \quad \text{et } x^* \in \mathcal{E} \quad (4.2)$$

Un minimum global est donc un point minimisant la fonction coût sur l'ensemble du domaine réalisable \mathcal{E} . En pratique, déterminer un minimum global est généralement très délicat, notamment à cause de la présence de *minima locaux*. Ces derniers désignent les minima de la fonction coût sur un sous-domaine de l'ensemble réalisable. Les minima locaux sont donc les points x^* de \mathcal{E} , tels que, dans un voisinage $\mathcal{V}(x^*) = \{x \in \mathcal{E} / \|x - x^*\| < \varepsilon\}$ de taille ε , on ait :

$$\forall x \in \mathcal{V}(x^*), \quad f(x) \geq f(x^*) \quad (4.3)$$

Tout optimum global possède les propriétés d'un optimum local alors que la réciproque est fautive : un optimum local ne peut pas être un optimum global. La FIG. 4.2 illustre à titre d'exemple un minimum local de la fonction $f : x \rightarrow x^2 \cos(x)$ sur l'intervalle [6 ; 18].

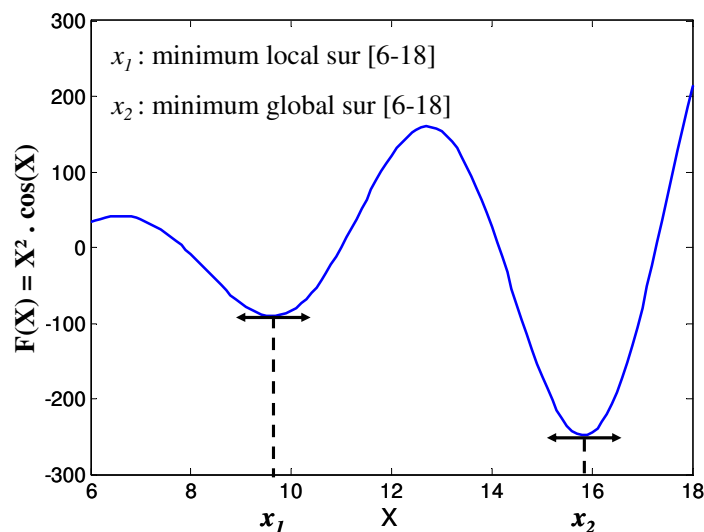


FIG. 4.2 - Minimum global versus minimum local

A partir de cette définition, nous pouvons distinguer deux types de problèmes d'optimisation. L'optimisation globale fait référence à la recherche des optima globaux de la fonction objectif en évitant le piègeage dans l'un de ses optima locaux. L'optimisation locale vise quant à elle à déterminer un optimum local. Cette dénomination présente néanmoins une certaine ambiguïté avec le terme de "méthode locale" fréquemment employé dans la littérature. Ce terme fait en réalité référence au mécanisme de recherche qui repose sur la notion de voisinage (exploration de proche en proche de l'espace de recherche). A titre d'exemple, l'algorithme du recuit simulé

est une méthode d'optimisation globale (la méthode est en principe capable de déterminer les optima globaux de la fonction objectif), basée sur un processus de recherche local (la solution testée est une voisine de la solution courante).

Enfin, précisons que la convergence globale désigne la capacité d'un algorithme itératif à converger vers un optimum local, quelles que soient les conditions initiales adoptées.

4.1.2 Classification des méthodes d'optimisation non-linéaire

Tout d'abord précisons que cette étude non-exhaustive se limite aux *problèmes d'optimisation non-linéaire, mono-objectif, et continue*. Le terme mono-objectif indique que la fonction coût est définie de $\mathfrak{R}^n \rightarrow \mathfrak{R}$. Autrement dit, nous ne traiterons pas le cas de l'optimisation multi-objectifs. D'autre part, l'optimisation est considérée continue par opposition à l'optimisation combinatoire (ou discrète) pour laquelle l'espace de recherche est fini, mais non "énumérable".

Nous proposons une classification des méthodes d'optimisation en trois familles principales : les méthodes d'optimisation globale, les méthodes d'optimisation locale, et enfin les méthodes hybrides. Chaque classe peut être subdivisée en différentes sous-familles en fonction des mécanismes de recherche adoptés.

a) Les méthodes d'optimisation globale

Les algorithmes d'optimisation globale les plus répandus sont de type stochastique. La recherche de l'optimum est alors guidée par un processus pseudo-aléatoire permettant de favoriser l'exploration de l'espace des solutions. Cette classe de méthodes peut être subdivisée en deux sous-familles, selon le type de mécanisme de recherche utilisé :

- *Les méthodes de voisinage* : il s'agit de méthodes basées sur un mécanisme de recherche local. Citons par exemple les algorithmes de type recuit simulé, la méthode de recherche tabou, ou encore la méthode de Monte Carlo.
- *Les méthodes distribuées* : elles sont basées sur l'exploration simultanée de différentes zones de l'espace de recherche. Après une phase de diversification, une phase d'intensification permet de favoriser la recherche dans les zones les plus prometteuses. Les algorithmes les plus utilisés sont les algorithmes génétiques ou encore l'algorithme de colonie de fourmis.

✓ Avantages :

Originellement, ces algorithmes furent conçus pour l'optimisation combinatoire, pour laquelle ils prennent la dénomination de méthodes méta-heuristiques. C'est pourquoi ils ne requièrent généralement pas d'information sur les dérivées de la fonction coût. Par conséquent, ces méthodes s'appliquent parfaitement aux fonctions non-différentiables, ou encore bruitées. Un de leurs principaux attraits réside dans leur capacité à éviter le piègeage dans les minima locaux. De plus, elles sont généralement simples à mettre en œuvre, et très robustes. Enfin, la plupart de ces méthodes sont adaptées à la parallélisation du calcul.

✓ Inconvénients :

En contre partie, ces méthodes sont coûteuses en temps de calcul du fait de leurs faibles vitesses de convergence. Le nombre de paramètres de réglage est généralement très important et affecte directement la vitesse de convergence, de même que la capacité de la méthode à converger vers un optimum global. D'autre part, il existe à ce jour très peu de démonstration mathématique concernant la convergence de ces algorithmes. La prise en compte des contraintes, notamment des contraintes non-linéaires, reste problématique pour de nombreux algorithmes. Enfin, ces méthodes ne tirent pas profit des différentes propriétés de la fonction coût.

Une synthèse des avantages et inconvénients relatifs à cette classe de méthodes est reportée dans la TAB. 4.1

Méthodes d'optimisation globale	
Avantages	Inconvénients
Capables d'éviter les minima locaux	Faible vitesse de convergence
Adaptées aux fonctions non-différentiables	Peu de démonstration mathématique
Adaptées à la parallélisation	Nombreux paramètres de réglage
Simple à mettre en œuvre	Ne tirent pas profit des propriétés de la fonction coût
Robustes	Contraintes pas toujours prises en compte

TAB. 4.1 - Avantages et inconvénients des méthodes d'optimisation globale

b) Les méthodes d'optimisation locale

Ces méthodes visent à déterminer un optimum local du problème. Par conséquent, elles sont utilisées afin d'obtenir une amélioration de la solution initiale, sans toutefois garantir l'optimalité du résultat. L'exploration de l'espace de recherche n'étant pas l'objectif principal, ces méthodes sont pour la plupart démunies de phase de diversification. C'est pourquoi l'optimisation locale fait souvent appel à des méthodes déterministes de recherche locale.

Cette classe de méthodes d'optimisation peut être subdivisée en deux sous-familles :

- *Les méthodes déterministes d'ordre zéro* : elles ne requièrent aucune information sur les dérivées de la fonction coût, et s'appliquent par conséquent aux fonctions non différentiables. L'algorithme de Nelder-Mead et la méthode des surfaces de réponse sont des exemples d'algorithmes à recherche locale et globale respectivement.
- *Les méthodes déterministes du premier ou du second ordre* issues de la théorie de la programmation mathématique : elles utilisent les informations fournies par les dérivées premières ou secondes de la fonction coût pour définir une direction de descente. La méthode de la plus forte pente ou encore la méthode de Fletcher-Reeves sont des exemples d'algorithmes du premier ordre. L'algorithme du gradient conjugué et l'algorithme SQP ("Sequential Quadratic Programming") sont deux exemples de méthodes du second ordre pour des problèmes respectivement non contraints et contraints.

✓ Avantages des méthodes d'ordre zéro :

Par nature, les méthodes d'ordre zéro sont particulièrement adaptées aux fonctions non-différentiables ou bruitées. Elles sont généralement simples à mettre en œuvre et permettent d'obtenir une amélioration significative de la solution en un faible nombre d'itérations, sans toutefois garantir la convergence vers un minimum local.

✓ Inconvénients des méthodes d'ordre zéro :

En dépit de l'amélioration significative apportée à la solution dans les premières itérations, ce type d'algorithme présente une faible vitesse de convergence du fait des possibles stagnations de la solution au cours du processus itératif. Pour les méthodes de recherche locale, la capacité de l'algorithme à converger vers un minimum dépend fortement du choix des conditions initiales. Par nature, ces méthodes ne tirent pas profit des différentes propriétés de la fonction coût. D'autre part, il existe à ce jour très peu de démonstration mathématique concernant la convergence de ces algorithmes. Enfin, la prise en compte des contraintes demeure souvent problématique.

✓ Avantages des méthodes de programmation mathématique du premier et second ordre :
Ces algorithmes exploitent toute la richesse des informations fournies par les dérivées premières et/ou secondes de la fonction coût. Par conséquent, ils sont les plus performants lorsque la fonction coût est différentiable. Certains algorithmes sont spécifiquement conçus afin de tirer profit des propriétés de fonctions coût particulières (des fonctions quadratiques par exemple). Il est donc possible d'exploiter au maximum les spécificités du problème. D'autre part, il existe de nombreuses démonstrations mathématiques concernant la convergence de ces algorithmes. Enfin, certaines méthodes permettent la prise en compte de tous les types de contraintes (linéaires ou non, d'égalités ou d'inégalités).

✓ Inconvénients des méthodes de programmation mathématique du premier et second ordre :
Lorsque les dérivées de la fonction coût ne peuvent être directement explicitées, ces dernières doivent être calculées (généralement par différences-finies). Ce calcul induit de nombreuses évaluations de la fonction coût, et génère une augmentation des temps de calcul. De plus, les erreurs commises sur les calculs des dérivées partielles peuvent altérer la performance de l'algorithme. Ces erreurs sont évidemment d'autant plus importantes que la fonction coût est bruitée. Enfin, le choix des conditions initiales peut affecter considérablement la solution obtenue.

Une synthèse des avantages et inconvénients relatifs à cette classe de méthodes est reportée dans la TAB. 4.2.

Méthodes d'optimisation locale			
Méthodes d'ordre zéro		Méthodes du 1^{er} et 2nd ordre	
Avantages	Inconvénients	Avantages	Inconvénients
Adaptées aux fonctions non-différentiables	Faible vitesse de convergence	Généralement bonne vitesse de convergence	Inadaptées aux fonctions non-différentiables
Simples à mettre en œuvre	Peu de démonstrations mathématiques	Nombreuses démonstrations mathématiques	Parfois difficiles à mettre en œuvre
Amélioration importante en peu d'itérations	Contraintes pas toujours prises en compte	Prise en compte des contraintes possible	Forte dépendance aux conditions initiales
	Forte dépendance aux conditions initiales		

TAB. 4.2 - Avantages et inconvénients des méthodes d'optimisation locale

c) Les méthodes d'optimisation hybrides

Le principe général des méthodes d'optimisation hybrides est de combiner un algorithme d'optimisation globale à un algorithme d'optimisation locale, afin de tirer profit des avantages propres à chacune de ces méthodes. De multiples approches sont envisageables, parmi lesquelles nous retiendrons :

- *L'hybridation "en série"* entre un algorithme évolutionnaire (un algorithme génétique par exemple) et une méthode à direction de descente (algorithme d'optimisation locale à recherche locale).
- *L'hybridation "en parallèle"* entre un algorithme évolutionnaire et une méthode d'approximation de type surface de réponse.

La première approche consiste à réaliser une recherche au niveau global, avec un algorithme génétique par exemple, afin de localiser la zone la plus prometteuse de l'espace de recherche. Un algorithme de recherche local prend alors le relais afin d'affiner le résultat en convergeant plus rapidement vers une solution.

✓ Avantages et inconvénients :

En principe, cette méthode d'hybridation permet de jouir des avantages des algorithmes d'optimisation globale, tout en s'affranchissant d'un certain nombre de leurs inconvénients, tel que leur faible vitesse de convergence.

Une des problématiques propre à cette méthode d'hybridation demeure le choix de l'instant de transition entre les méthodes de recherche. Une transition trop précoce augmente le risque de convergence vers un minimum local. Une transition trop tardive a pour conséquence d'augmenter le temps de calcul puisque l'algorithme de descente n'est pas pleinement exploité.

La seconde approche consiste à utiliser une fonction d'approximation de la fonction coût, appelée métamodèle, à chaque itération de la méthode d'optimisation globale. Par ce biais, il est possible de réduire le nombre d'évaluations exactes de la fonction coût, en les remplaçant par des évaluations de la fonction approchée. Certains métamodèles, basés sur la méthode du krigeage, permettent d'estimer l'erreur commise sur l'approximation de la fonction coût. D'autres métamodèles utilisent le gradient de la fonction coût afin d'enrichir son approximation, ainsi que des techniques de classification permettant de sélectionner uniquement certains points, dit maîtres, pour effectuer les calculs de dérivées. A titre d'exemple, citons les algorithmes SE-Métamodèle, et AG-MGA présentés par [DO-2006].

✓ Avantages et inconvénients :

L'avantage majeur de ce type de méthodes hybrides est la réduction du nombre d'évaluations de la fonction coût par rapport à un algorithme d'optimisation global traditionnel. D'autre part, ces méthodes permettent de choisir a priori le nombre exact de calculs directs réalisés. Par conséquent, elles permettent de maîtriser le coût de l'optimisation tout en conservant une bonne exploration de l'espace de recherche grâce à l'approximation fournie par le métamodèle. Une des problématiques de cette approche est la forte augmentation du coût de l'interpolation de la fonction objectif avec le nombre de variables d'optimisation.

d) Synthèse : critères utilisés pour le choix d'un algorithme

La FIG. 4.3 illustre la classification proposée dans cette étude pour les méthodes d'optimisation non-linéaire, continue, mono-objectif.

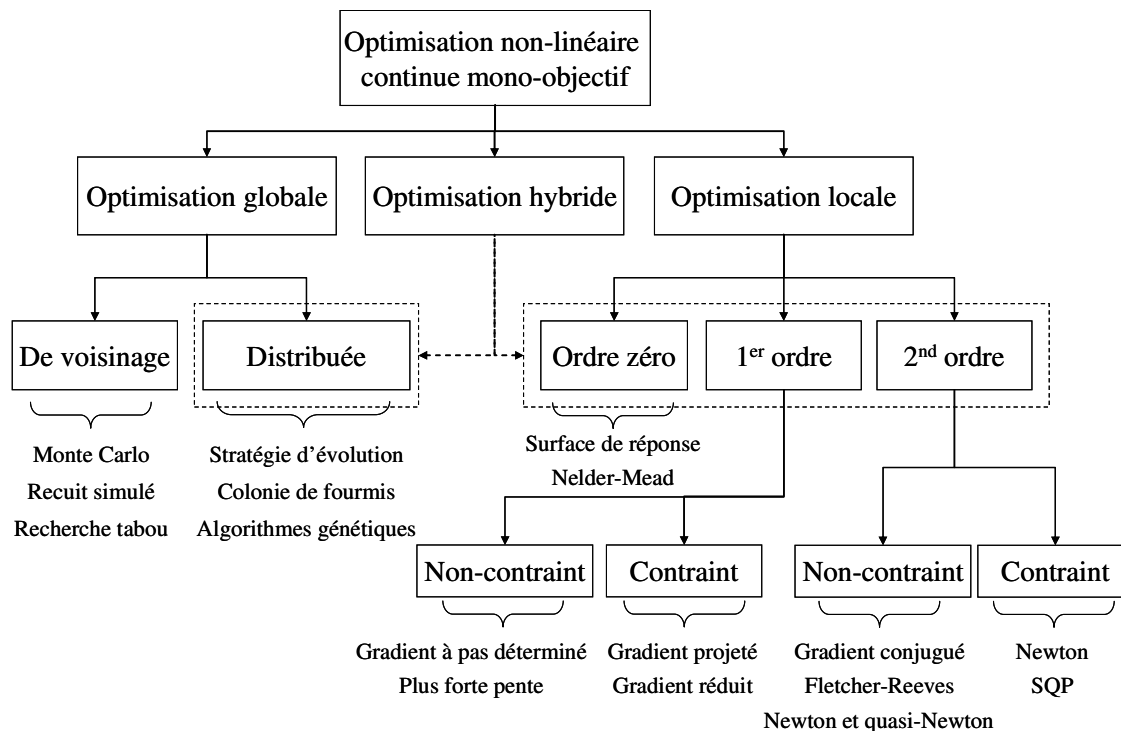


FIG. 4.3 - Classification des méthodes dédiées à l'optimisation non-linéaire continue mono-objectif

Pour une présentation détaillée des différents algorithmes d'optimisation évoqués, nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de Minoux [MIN-1983], ou Fletcher [FLE-1987]. D'autre part, des revues bibliographiques exhaustives sont présentées par [DO-2006] pour les méthodes d'optimisation globale, et par [MAT-2004] pour les méthodes de programmation mathématique.

A travers cette étude préliminaire, nous avons mis en évidence les principales caractéristiques des familles de méthodes d'optimisation en insistant sur leurs avantages et inconvénients. La classification proposée est bien sûr très synthétique, et les nombreuses problématiques relatives à chacune des méthodes citées n'ont pas été abordées. Toutefois, nous sommes à présent en mesure de définir des critères permettant de nous guider dans le choix d'un algorithme adapté. Ces critères sont les suivants :

✓ **La définition de l'espace de recherche :**

- Quel est le nombre de variables d'optimisation ?

Les performances des méthodes d'optimisation varient plus ou moins en fonction du nombre de variables. A titre d'exemple, la méthode de Nelder-Mead, ou encore les méthodes de type surface de réponse sont réputées pour être peu efficaces (en terme de temps de calcul) lorsque le nombre de variables est élevé.

- Existe-t-il des contraintes ? De quels types ?

Le type de contraintes, ainsi que leur nombre, peut aussi conditionner le choix de l'algorithme. Par exemple, la méthode de l'espace nul, dédiée à la résolution des problèmes quadratiques, est plus efficace lorsque le nombre de contraintes est grand par rapport au nombre de variables [ESB-2007].

- Peut-on avoir une idée, a priori, d'une zone de recherche prometteuse afin de guider l'optimisation en choisissant des conditions initiales adaptées ?

Si tel est le cas, il n'est pas nécessaire de favoriser l'exploration de l'espace des solutions. Les méthodes d'optimisation locale s'avèrent suffisantes.

✓ **Le modèle directe :**

- Le modèle est-il robuste ?

D'éventuelles divergences du calcul direct peuvent avoir une répercussion dramatique sur le calcul des dérivées de la fonction coût, et par conséquent sur la convergence des algorithmes de descente.

- Quel est le temps de calcul moyen nécessaire à une évaluation du modèle ?

Pour les modèles directs dont les temps de calcul sont importants, les méthodes d'optimisation globale sont généralement beaucoup trop coûteuses. En effet, ces méthodes requièrent typiquement plusieurs centaines d'évaluations de la fonction coût.

✓ **La définition de la fonction coût :**

- Est-elle différentiable, bruitée ?

Pour les fonctions très bruitées, les méthodes d'ordre zéro sont plus efficaces que les algorithmes du 1^{er} ou 2nd ordre.

- Possède-t-elle de nombreux minima locaux ?
Si c'est le cas, il est préférable de recourir à une méthode d'optimisation globale.
- Peut-on expliciter ses dérivées premières et/ou secondes, ou doit-on avoir recours à un calcul de type différences-finies ?
Etre en mesure d'expliquer les dérivées de la fonction coût est un atout majeur en vue d'utiliser des méthodes du 1^{er} ou 2nd ordre. Ces dernières deviennent plus coûteuses lorsque le calcul des dérivées est réalisé par différences-finies.

e) Choix des algorithmes

Nous proposons de nous appuyer sur les critères établis précédemment afin de choisir les algorithmes que nous mettrons en œuvre. Rappelons que les trois problèmes d'optimisation traités dans cette étude sont les suivants :

1. L'identification des paramètres constitutifs de la loi de comportement de G'sell présentée au chapitre 3.
2. L'optimisation de la distribution de température de la préforme avec le modèle de soufflage ABAQUS[®] présenté au chapitre 3.
3. L'optimisation des paramètres de réglage du four IR avec le modèle de chauffage présenté au chapitre 2.

Les critères de choix utilisés sont reportés dans la TAB. 4.3.

	Nombre de variables	Type de contraintes	Temps de calcul (CPU – 1.8GHz 512 Mo)	Estimation des paramètres initiaux	Bruit dans la fonction coût
1- Identification loi de comportement	Faible (4)	Bornes	Très faible (~ 1s)	Bonne	Très peu
2 - Optimisation température préforme	Faible (5)	Bornes	Faible/Moyen (~ 30 min)	Bonne	Important
3 - Optimisation four	Faible (7)	Bornes	Faible (~ 15 min)	Moyenne	Peu

TAB. 4.3 - Critères utilisés pour le choix des algorithmes d'optimisation

- Quelle que soit l'application considérée, le nombre de variables d'optimisation est faible. Par conséquent, il ne s'agit pas d'un facteur limitant quant au choix de l'algorithme.
- La présence de contraintes de type borne réduit le nombre d'algorithmes utilisables aux algorithmes sous contraintes. Toutefois, nous verrons qu'il est envisageable d'introduire ces contraintes dans la fonction coût à l'aide des méthodes de pénalité ou de changement de variable, autorisant ainsi l'emploi de méthodes sans contrainte.

- Les temps de calcul des modèles directs peuvent être relativement importants. Ceci tend à exclure les méthodes d'optimisation globale traditionnelles, pour lesquelles le nombre d'évaluations de la fonction coût est généralement élevé.
- Un des points décisifs réside dans notre capacité à choisir des paramètres initiaux peu éloignés de la solution. En d'autres termes, nous sommes en mesure d'identifier, a priori, une zone prometteuse de l'espace de recherche. Par exemple, nous pouvons affirmer que la température optimale de la préforme doit être comprise entre la température de transition vitreuse du PET et la température de cristallisation du PET. Ceci tend à réduire l'attrait des méthodes d'optimisation globale qui sont généralement employées lorsque l'espace de recherche est large et que les zones prometteuses sont difficiles à localiser a priori.
- Enfin, nous avons constaté que les simulations éléments-finis réalisées avec le logiciel ABAQUS[®] induisent des perturbations significatives dans la fonction coût (et ce malgré l'augmentation de la précision numérique). Ce bruit important a pour conséquence d'augmenter les erreurs commises sur le calcul des gradients, et réduit l'efficacité des méthodes du 1^{er} et 2nd ordre. Pour l'application N°2, les méthodes d'ordre zéro semblent donc mieux adaptées.

Compte tenu de ces critères, nous avons porté notre choix sur deux méthodes d'optimisation locale : l'algorithme SQP et l'algorithme de Nelder-Mead. Ces deux algorithmes sont disponibles dans le logiciel Matlab[®].

Les méthodes SQP représentent une classe d'algorithmes de programmation mathématique du second ordre. A ce jour, elles font partie des méthodes les plus performantes pour résoudre les problèmes d'optimisation continue, non-linéaire, sous contraintes (d'égalités et d'inégalités). Elles sont particulièrement appréciées pour leur vitesse de convergence élevée et leur robustesse, sous réserve que les fonctions coût et contrainte soient peu bruitées. Nous avons adopté l'algorithme SQP pour les applications N°1 et N°3 citées précédemment.

L'algorithme de Nelder-Mead est une méthode d'optimisation locale d'ordre zéro. Nous avons choisi cet algorithme car il s'est avéré plus robuste que l'algorithme SQP lors du couplage avec ABAQUS[®]. Bien que l'algorithme original de Nelder-Mead ne permette pas la prise en compte des contraintes, nous verrons qu'il est possible de le modifier afin d'introduire des contraintes de type borne.

Ces deux algorithmes sont présentés de manière synthétique dans les parties suivantes.

4.1.3 L'algorithme SQP ("Sequential Quadratic Programming") Matlab®

a) Conditions d'optimalité de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)

Les méthodes SQP reposent sur la recherche d'un point de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), c'est à dire un point satisfaisant les conditions nécessaires d'optimalité locale. Supposons que les fonctions f , g et h du problème d'optimisation général PG (4.1) sont continûment différentiables. Notons $\mathcal{L}(x, \lambda_L, \mu_L)$ le Lagrangien associé au problème PG :

$$\mathcal{L}(x, \lambda_L, \mu_L) = f(x) + \lambda_L^T g(x) + \mu_L^T h(x) \quad (4.4)$$

où les vecteurs $\lambda_L \in \mathfrak{R}^m$ et $\mu_L \in \mathfrak{R}^p$ désignent les multiplicateurs de Lagrange.

Les équations de KTT stipulent que si x^* est un optimum local du problème PG, alors il existe des vecteurs $\lambda_L^* \in \mathfrak{R}_+^m$ et $\mu_L^* \in \mathfrak{R}^p$, tels que [MIN-1983]:

$$\left. \begin{array}{l} \text{(a)} \quad \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \lambda_L^*, \mu_L^*) = \nabla f(x^*) + \nabla g(x^*) \lambda_L^* + \nabla h(x^*) \mu_L^* = 0 \\ \text{(b)} \quad \lambda_L^* \geq 0 \quad \lambda_L^{*T} g(x^*) = 0 \\ \text{(c)} \quad h(x^*) = 0 \quad g(x^*) \leq 0 \end{array} \right\} \quad (4.5)$$

L'équation (4.5a) est appelée *condition de stationnarité*. Elle stipule que le gradient du Lagrangien de PG par rapport à x doit s'annuler au point x^* . Remarquons que cette équation inclut l'ensemble des contraintes du problème. Or la faisabilité de la solution ne dépend que des contraintes *actives*, i.e. des contraintes appartenant à l'ensemble :

$$\mathcal{A}(x) = I_0 = \{g_i(x) = 0, i \in \{1, \dots, m\}\} \cup J = \{h_j(x) = 0, j \in \{1, \dots, p\}\} \quad (4.6)$$

C'est pourquoi les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes inactives ($g(x) < 0$) doivent être nuls. Ceci est réalisé implicitement à travers les conditions de *complémentarité* (4.5b). Ces trois équations, associées aux contraintes du PG (4.5c), forment les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre de KKT. Notons que dans le cas où les fonctions f , g , et h sont convexes, ces conditions sont nécessaires et suffisantes pour que x^* soit un optimum global du problème PG.

Les conditions d'optimalité du premier ordre de KTT sont relatives aux points critiques de la fonction Lagrangienne, c'est à dire aux maxima, aux minima, et aux points cols. Si l'on s'attache spécifiquement à la recherche d'un minimum local, il est nécessaire de vérifier les conditions d'optimalité du second ordre de KTT. Supposons les fonctions f , g et h deux fois continûment différentiables. Notons \mathcal{H} le Hessien de la fonction Lagrangienne $\mathcal{L}(x, \lambda_L, \mu_L)$ par rapport à x :

$$\mathcal{H}(x, \lambda_L, \mu_L) = \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x, \lambda_L, \mu_L) = \nabla^2 f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_{Li} \cdot \nabla^2 g_i(x) + \sum_{j=1}^p \mu_{Lj} \cdot \nabla^2 h_j(x) \quad (4.7)$$

Supposons que le point $(x^*, \lambda_L^*, \mu_L^*)$ vérifie les conditions du 1^{er} ordre de KTT. La condition nécessaire d'optimalité du second ordre de KTT stipule que si x^* est un minimum local de PG, alors le Hessien du Lagrangien de PG en $(x^*, \lambda_L^*, \mu_L^*)$ doit être semi défini positif sur le cône :

$$\mathcal{N} = \left\{ w \in \mathfrak{R}^n \left| \begin{array}{l} \nabla g_i(x^*)^T w = 0, \forall i \in I_0 : \lambda_{L_i}^* > 0 \\ \nabla h_j(x^*)^T w = 0, \forall j \in J \end{array} \right. \right\} \quad (4.8)$$

C'est à dire :

$$w^T \mathcal{H}(x^*, \lambda_L^*, \mu_L^*) w \geq 0, \quad \forall w \in \mathcal{N}_+(x^*, \lambda_L^*, \mu_L^*) \quad (4.9)$$

Les équations de KTT révèlent que pour un problème contraint, un optimum local peut être approché par minimisation de la fonction Lagrangienne. Elles sont à la base de nombreuses méthodes d'optimisation sous contraintes, dont les méthodes SQP.

b) Principe de base des méthodes SQP : approximation quadratique du PG

Le principe de base des méthodes SQP repose sur la méthode de Wilson, qui est une extension de la méthode de Newton pour les problèmes à contraintes d'inégalité. Cette méthode consiste à linéariser la fonction Lagrangienne $\mathcal{L}(x, \lambda_L, \mu_L)$ ainsi que les fonctions contraintes g et h , au voisinage d'un point courant x^k (par des développements en série de Taylor). Le problème d'optimisation générale peut alors être approché par un sous problème quadratique PQ à contraintes linéaires :

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{x \in \mathfrak{R}^n} f(x) \\ g(x) \leq 0 \\ h(x) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \min_{d \in \mathfrak{R}^n} q(d) = \frac{1}{2} d^T \mathcal{H}^k d + \nabla f(x^k)^T d \\ \nabla g(x^k)^T d + g(x^k) \leq 0 \\ \nabla h(x^k)^T d + h(x^k) = 0 \end{array} \right. \quad (4.10)$$

A chaque itération k de l'algorithme principal, le sous problème PQ est résolu par une méthode itérative. La résolution de PQ fournit une direction d'avancée d^k permettant de générer un nouvel itéré x^{k+1} améliorant la solution courante :

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k \quad (4.11)$$

où la valeur du pas α^k est déterminée à chaque itération k par une méthode de minimisation unidimensionnelle.

La résolution de la séquence de problèmes quadratiques est à l'origine de l'appellation Programmation Quadratique Séquentielle ("Sequential Quadratic Programming"). Les

différentes méthodes applicables à la résolution du PQ donnent lieux à plusieurs déclinaisons de la méthode SQP. Nous proposons de présenter de manière synthétique la version de l'algorithme SQP disponible dans Matlab®.

c) Approximation du Hessien par une méthode quasi-Newton

Le calcul de la matrice Hessienne pose deux problèmes majeurs. Primo, le calcul des dérivées secondes, requises à chaque itération, peut se révéler très coûteux. Secundo, la matrice Hessienne peut s'avérer non-définie positive, ce qui ne garantit pas des directions successives de descente. Pour palier à ces deux problèmes, l'algorithme SQP Matlab® utilise une méthode quasi-Newton. Cette méthode fournit une approximation définie positive de la matrice Hessienne de la fonction Lagrangienne. La méthode implémentée par défaut est l'algorithme de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) :

$$\mathcal{H}^{k+1} = \mathcal{H}^k + \frac{\Lambda^k (\Lambda^k)^T}{(\Lambda^k)^T s^k} - \frac{\mathcal{H}^k s^k (s^k)^T \mathcal{H}^k}{(s^k)^T \mathcal{H}^k s^k}$$

avec :

$$\begin{cases} s^k = x^{k+1} - x^k \\ \Lambda^k = \nabla \mathcal{L}(x^{k+1}, \lambda_c^{k+1}, \mu_c^{k+1}) - \nabla \mathcal{L}(x^k, \lambda_c^{k+1}, \mu_c^{k+1}) \end{cases}$$

La matrice Hessienne est maintenue définie positive à chacune de ses mises à jour par la méthode proposée par [POW-1978]. Ainsi, la méthode BFGS assure une convergence globale super-linéaire de l'algorithme SQP.

d) Résolution du sous problème quadratique

A chaque itération de la résolution du sous problème PQ, ce dernier peut être transformé en un problème à contraintes d'égalités uniquement. Cette transformation est assurée par la méthode dite par *activation de contraintes* ("primal active set method"), ou encore méthode par projection [GIL-1984]. Cette méthode repose sur l'équivalence suivante :

$$\begin{cases} \min_{d \in \mathbb{R}^n} q(d) \\ A_i^T d \leq b_i & i \in I \\ A_j^T d = b_j & j \in J \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \min_{d \in \mathbb{R}^n} q(d) \\ a_i^T d = b_i & i \in \mathcal{A}(d^*) \end{cases}$$

où $\mathcal{A}(d) = \{i \in I \cup J : A_i^T d = b_i\}$ désigne l'ensemble des contraintes actives, qu'il convient d'estimer. La méthode consiste alors à déterminer une direction de descente δ , à chaque itération k^{PQ} du problème quadratique, telle que :

$$d^{kPQ+1} = d^{kPQ} + \delta^{kPQ} \quad (4.14)$$

On montre que pour que δ soit une direction de descente (i.e. satisfaisant $q(d^{kPQ+1}) < q(d^{kPQ})$), elle doit être solution du problème quadratique à contraintes d'égalité suivant [ESB-2007] :

$$\begin{cases} \min_{\delta \in \mathbb{R}^n} \tilde{q}(\delta) = \frac{1}{2} \delta^T \mathcal{H} \delta + (\mathcal{H}d + \nabla f(x))^T \delta \\ a_i^T \delta = 0 \quad i \in \mathcal{W}(d) \end{cases} \quad (4.15)$$

où l'ensemble de travail $\mathcal{W}(d)$ désigne un sous-ensemble de $\mathcal{A}(d)$ pour lequel les vecteurs $\{a_i\}$ sont linéairement indépendants. Ce sous-ensemble est mis à jour à chaque itération par ajout/suppression de contraintes, selon une procédure décrite par [ESB-2007].

Dans le cas où le nouveau point d^{kPQ+1} généré suivant (4.14) n'est pas réalisable, une nouvelle contrainte est ajoutée à l'ensemble $\mathcal{W}(d)$. On introduit alors un pas $\alpha \in [0,1[$, tel que :

$$d^{kPQ+1} = d^{kPQ} + \alpha^{kPQ} \delta^{kPQ} \quad (4.16)$$

La valeur optimale du pas, permettant de ne pas enfreindre une contrainte inactive, est donnée par [ESB-2007] :

$$\alpha^{kPQ} = \min \left(1, \min_{i \in \mathcal{A}} \frac{b_i - a_i^T d^{kPQ}}{a_i^T \delta^{kPQ}} \right) \quad (4.17)$$

Dans le cas où le nouveau point d^{kPQ+1} généré suivant (4.14) est réalisable, il faut s'assurer qu'il s'agit bien d'un minimum global du problème PQ. Pour cela, à chaque itération k^{PQ} , on résout le problème quadratique à contraintes d'égalité suivant :

$$d^{kPQ+1} = \arg \min q(d) \quad sc \quad a_i^T d = b_i \quad \forall i \in \mathcal{W}_k \quad (4.18)$$

Ce problème quadratique convexe sous contraintes d'égalité est résolu par la *méthode de l'espace nul* ("null space method"). Cette méthode est entièrement détaillée par [MAT-2004], [ESB-2007]. On obtient alors d^* , solution du problème quadratique PQ.

e) Calcul du pas par optimisation unidimensionnelle

La résolution du sous problème quadratique a permis d'obtenir une direction d'avancée d^k . Il reste alors à déterminer le pas requis pour la génération d'un nouvel itéré (éq. (4.11)). La longueur du pas est calculée par minimisation unidimensionnelle d'une fonction de mérite appelée fonction exacte pénalisée [HAN-1977], [POW-1978] :

$$\psi(x) = f(x) + \sum_{i=1}^m \eta_{\lambda_i} \max(0, g_i(x)) + \sum_{j=1}^p \eta_{\mu_j} h_j(x) \quad (4.19)$$

où les coefficients de pénalité sont définis par :

$$\begin{cases} \eta_{\lambda_i} = \eta_{\lambda_i}^{k+1} = \max_i \left(\lambda_{\mathcal{L}_i}, \frac{1}{2} (\eta_{\lambda_i}^k + \lambda_{\mathcal{L}_i}) \right) & i = 1, \dots, m \\ \eta_{\mu_j} = \eta_{\mu_j}^{k+1} = \max_j \left(\mu_{\mathcal{L}_j}, \frac{1}{2} (\eta_{\mu_j}^k + \mu_{\mathcal{L}_j}) \right) & j = 1, \dots, p \end{cases} \quad (4.20)$$

Le pas α^k est alors divisé par deux jusqu'à ce qu'une diminution suffisante de la fonction de mérite soit obtenue.

f) Critères d'arrêt

On considère que l'algorithme converge lorsque les conditions de KTT sont vérifiées à la fin d'une itération :

$$\begin{cases} \max(\nabla \mathcal{L}(x, \lambda_{\mathcal{L}}, \mu_{\mathcal{L}}), \lambda_{\mathcal{L}_i} g_i(x)) < \varepsilon_f \\ \max(g_i(x)) < \varepsilon_C \end{cases} \quad (4.21)$$

où ε_f et ε_C sont des nombres réels positifs généralement inférieurs à l'unité. D'autre part, si les conditions de KTT ne sont pas vérifiées mais que la solution n'évolue plus suffisamment d'une itération à l'autre, l'algorithme est interrompu. Pour cela, les critères d'arrêt suivants sont utilisés :

$$\begin{cases} \|\nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)\|_2 < 2\varepsilon_f \\ \|x^{k+1} - x^k\|_2 < 2\varepsilon_x \\ g_i(x) < \varepsilon_C \end{cases} \quad (4.22)$$

Il est aussi possible d'interrompre l'algorithme lorsque le nombre d'itérations (ou d'évaluations de la fonction coût) excède une certaine valeur.

La FIG. 4.4 illustre l'organigramme simplifié de l'algorithme SQP.

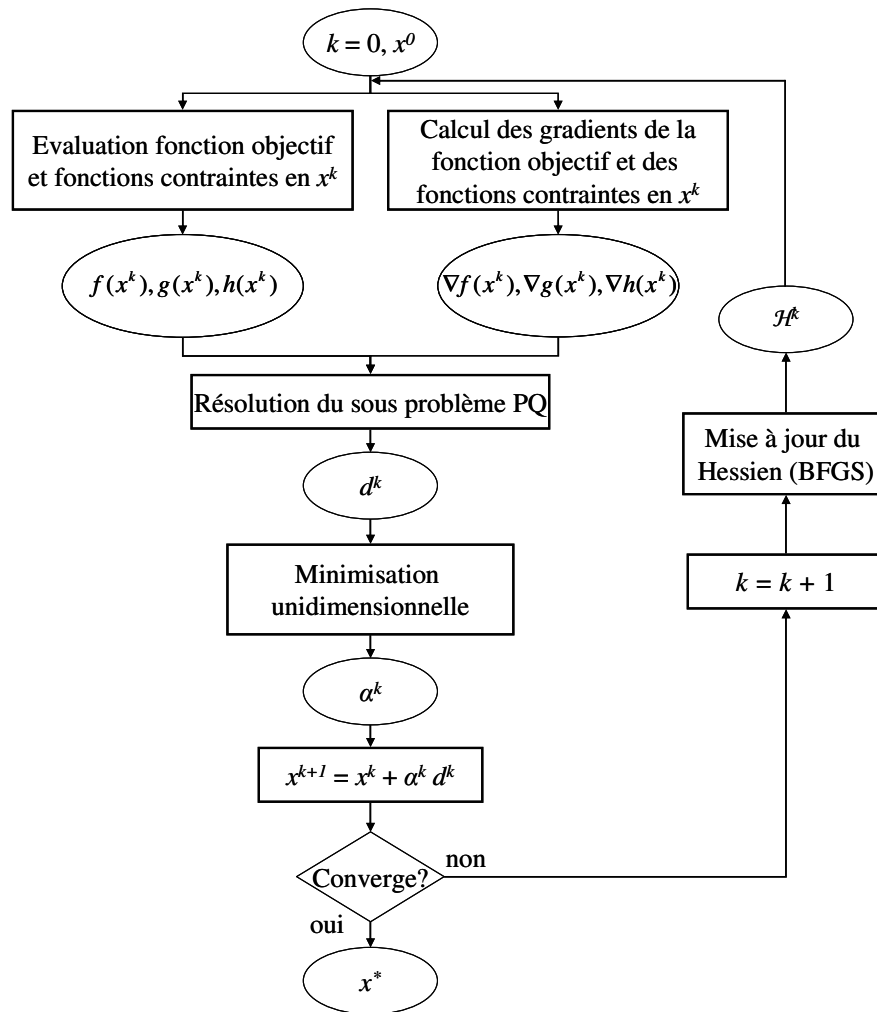


FIG. 4.4 - Organigramme de l'algorithme SQP

g) Propriétés de l'algorithme SQP Matlab®

Une des propriétés intéressantes de l'algorithme SQP Matlab® est qu'il s'agit d'une méthode *non réalisable*. Autrement dit, les points successifs (y compris le point initial) ne respectent pas obligatoirement les contraintes non-linéaires (les contraintes linéaires sont toutefois respectées). Ceci peut être utile lorsqu'il est difficile de choisir un point initial respectant toutes les contraintes. D'autre part, l'utilisation de l'algorithme BFGS permet de ne pas calculer les dérivées secondes de la fonction coût à chaque itération. De plus, cette méthode confère à l'algorithme SQP une convergence superlinéaire, assurée par le maintien des matrices Hessiennes successives définies positives.

Une des problématiques de l'algorithme SQP réside dans le calcul des gradients par différences-finies. D'une part ce calcul s'avère coûteux, et d'autre part il est très sensible aux éventuelles perturbations de la fonction coût.

Dans le cas de fonctions objectif très bruitées, l'algorithme de Nelder-Mead s'avère mieux adapté. La présentation de cet algorithme fait l'objet de la partie suivante.

4.1.4 L'algorithme de Nelder-Mead

L'algorithme de Nelder-Mead [NEL-1965], aussi appelé méthode du simplexe non-linéaire, est une méthode déterministe d'ordre zéro basée sur un mécanisme de recherche locale. Cette méthode est surtout appréciée pour sa simplicité de mise en œuvre et sa robustesse. En dépit de sa faible vitesse de convergence, elle permet d'obtenir une amélioration de la solution initiale en un faible nombre d'itérations, sans toutefois garantir la convergence vers un minimum local.

a) Présentation de l'algorithme

La méthode de minimisation de Nelder-Mead est basée sur la comparaison des valeurs de la fonction coût au niveau des $(n+1)$ sommets d'une figure géométrique à n dimensions appelée simplexe (en deux dimensions le simplexe est un triangle, en trois un tétraèdre, etc...). A chaque itération, le simplexe est modifié par le biais d'opérations élémentaires de *réflexion*, d'*expansion*, de *contraction*, et de *multicontraction* (aussi appelée rétrécissement). La plus grande valeur de la fonction coût est alors remplacée par un autre point de plus petite valeur. Ainsi, le simplexe se transforme, s'étend, se contracte, et s'adapte à l'allure de la fonction coût, jusqu'à ce qu'il s'approche de l'optimum. L'algorithme est le suivant :

- 1. Initialisation** : pour une fonction f à n variables, $n+1$ points sont choisis pour former le simplexe initial de dimension n . La fonction f est évaluée pour chaque point-sommet $\{x_1, x_2, \dots, x_{n+1}\}$ du simplexe. Les valeurs sont alors indexées, tel que :

$$f_1 \leq f_2 \leq \dots \leq f_{n+1} \quad (4.23)$$

En notant $f_i = f(x_i)$. L'objectif est alors de substituer, à chaque itération, la valeur du "plus mauvais point" x_{n+1} par un "meilleur point". Pour cela, différentes opérations sont réalisées à partir du centre de gravité du simplexe défini par :

$$\bar{x} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{n} \quad (4.24)$$

- 2. Réflexion** : à chaque itération un nouveau sommet est généré par réflexion du plus mauvais point (x_{n+1}) suivant l'équation suivante :

$$x_r = \bar{x} + r(\bar{x} - x_{n+1}) \quad (4.25)$$

où r désigne l'opérateur de réflexion ($r > 0$).

Le sommet x_r ainsi généré est conservé si : $f_1 \leq f_r < f_n$, autrement dit, si le point généré est meilleur que le second plus mauvais point, mais moins bon que le meilleur point. Dans ce cas, f_{n+1} est remplacé par f_r et l'itération s'achève (retour à l'étape 2).

- 3. Expansion** : dans le cas où le point généré par réflexion x_r apporte une amélioration par rapport au meilleur point x_l (autrement dit si $f_r < f_l$), une opération d'expansion est réalisée afin d'étirer le simplexe dans la direction la plus favorable :

$$x_e = \bar{x} + \chi(x_r - \bar{x}) \quad (4.26)$$

où χ désigne l'opérateur d'expansion ($\chi > 1$).

Le sommet x_e ainsi généré est conservé si : $f_e < f_r$. Dans ce cas f_{n+1} est remplacé par f_e , et l'itération s'achève (retour à l'étape 2).

- 4. Contraction** : dans le cas où le point généré par réflexion x_r n'apporte pas d'amélioration par rapport au second meilleur point x_n (autrement dit si $f_r \geq f_n$), une opération de contraction est réalisée.

a. Contraction interne : si $f_r \geq f_{n+1}$ alors la contraction est réalisée sans prendre en compte la réflexion de l'étape 2 :

$$x_c = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_{n+1}) \quad (4.27)$$

où γ désigne l'opérateur de contraction ($0 < \gamma < 1$).

Le nouveau point est accepté si $f_c < f_{n+1}$. Dans ce cas f_{n+1} est remplacé par f_c et l'itération s'achève (retour à l'étape 2), sinon une opération de rétrécissement est réalisée (étape 5).

b. Contraction externe : si $f_n \leq f_r < f_{n+1}$ alors la contraction est réalisée à partir du sommet obtenu par réflexion :

$$x_c = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_r) \quad (4.28)$$

Le nouveau point est accepté si $f_c \leq f_r$. Dans ce cas f_r est remplacé par f_c et l'itération s'achève (retour à l'étape 2), sinon une opération de rétrécissement est réalisée (étape 5).

- 5. Rétrécissement** : lorsque toutes les opérations ont échouées ($f_c \geq f_{n+1}$), un rétrécissement de tout le simplexe est réalisé autour du point x_l (seul le meilleur point est conservé) :

$$x_i = x_l + \nu(x_i - x_l) \quad (4.29)$$

où ν désigne l'opérateur de rétrécissement ($0 < \nu < 1$). Fin de l'itération.

Le critère d'arrêt est une mesure de déplacement du simplexe d'une itération k à l'itération suivante $(k+1)$. L'algorithme converge lorsque :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x_i^k - x_i^{k+1}\|^2 \leq \varepsilon_x \quad (4.30)$$

où x^{k+1} désigne le sommet remplaçant le sommet x^k à l'itération $(k+1)$, et ε_x est un nombre réel positif donné. La FIG. 4.5 illustre les différentes opérations réalisées sur un simplexe en deux dimensions.

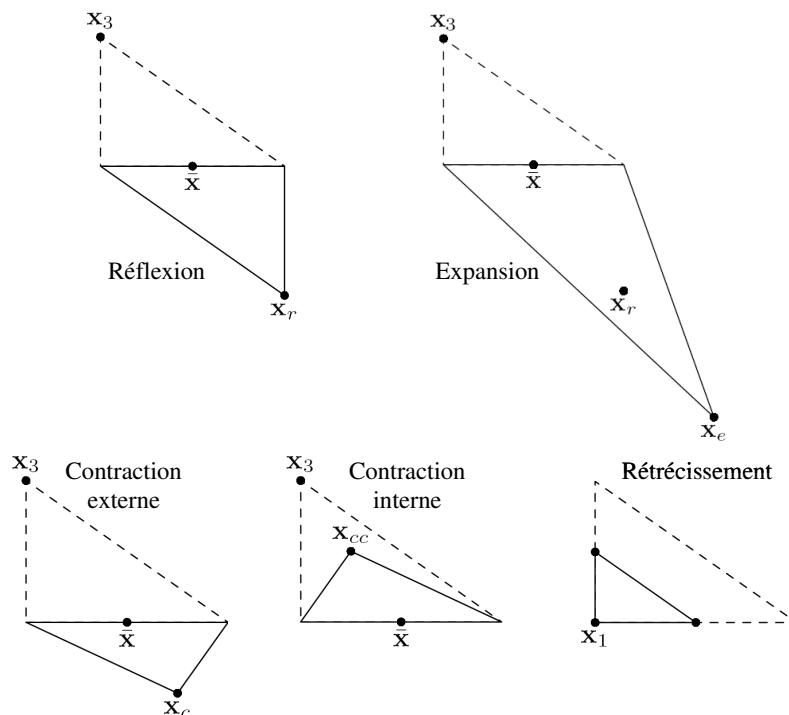


FIG. 4.5 - Modification du simplexe d'après l'algorithme de Nelder-Mead - Le simplexe originale est représenté en trait pointillé

Les valeurs classiquement adoptées (et quasi-universelles) pour les opérateurs de réflexions, d'expansion, de contraction, et de rétrécissement sont celles proposées par [NEL-1965] :

$$r = 1, \quad \chi = 2, \quad \gamma = \frac{1}{2}, \quad \text{et } \nu = \frac{1}{2} \quad (4.31)$$

Nous adopterons ces valeurs dans la suite de notre étude. L'organigramme de l'algorithme de Nelder-Mead est illustré par la FIG. 4.6.

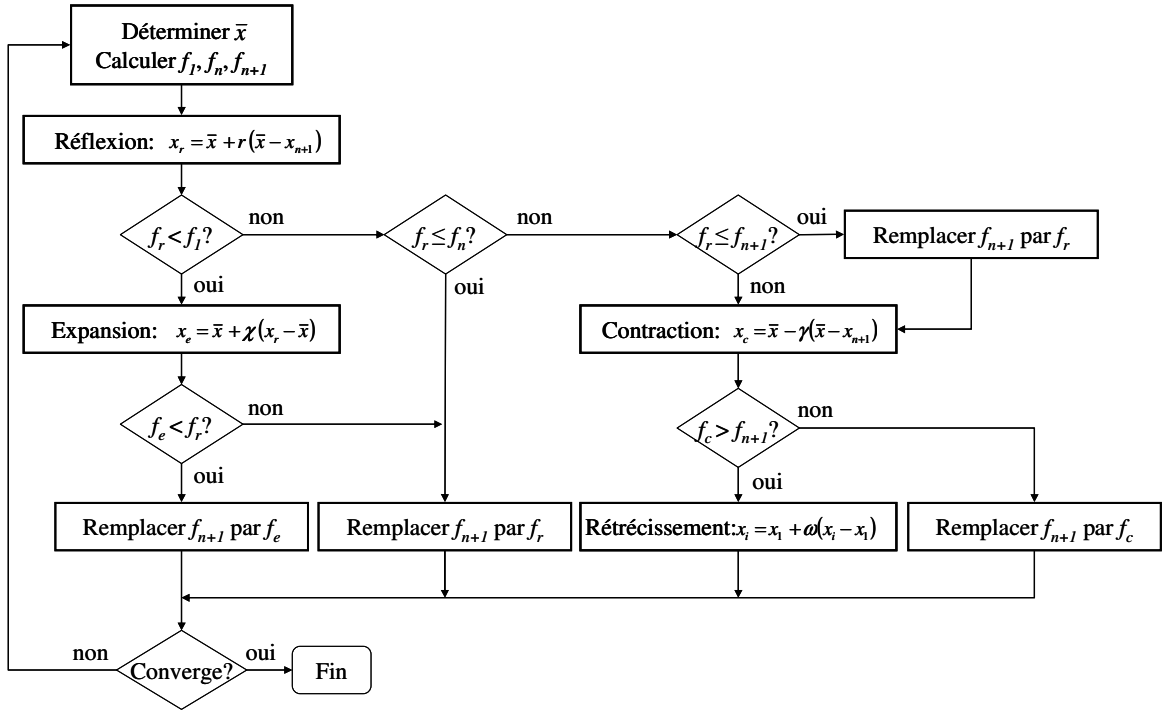


FIG. 4.6 - Organigramme de l’algorithme de Nelder-Mead

Une des principales lacunes de la méthode de Nelder-Mead est son incapacité à prendre en compte les contraintes. Il existe toutefois plusieurs méthodes permettant d’introduire des contraintes linéaires d’inégalités, permettant ainsi de borner les variables d’optimisation. Nous proposons de mettre en œuvre deux d’entre elles : la méthode de pénalité, et la méthode de changement de variable.

b) Ajout des contraintes linéaires d’inégalités par la méthode de pénalité

Les méthodes de pénalité permettent de transformer un problème d’optimisation contraint en un problème pénalisé sans contrainte par introduction d’une fonction de pénalité $P(x)$:

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad \forall i \in I = \{1, 2, \dots, m\} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) + P(x) \\ \text{avec } P(x) = \sum_{i=1}^m \eta(g_i(x)) \end{cases} \quad (4.32)$$

La résolution de ce problème peut alors être réalisée à l’aide de méthodes non-linéaires sans contraintes. Deux types de pénalisations sont envisageables :

- Méthode de pénalité extérieure :

Cette méthode vise à pénaliser la fonction coût uniquement en cas de violation d’une ou de plusieurs contraintes. La fonction de pénalité $P(x)$ est nulle si x est admissible, et positive dans

le cas contraire. La fonction de pénalité peut être définie comme une fonction quadratique des contraintes :

$$P(x) = \eta \sum_{i=1}^m (g_i(x))^2 u_i(g_i(x)) \quad \text{avec} \quad u_i(g_i(x)) = \begin{cases} 0 & \text{si } g_i(x) \leq 0 \\ 1 & \text{si } g_i(x) > 0 \end{cases} \quad (4.33)$$

Le terme $u_i(g_i(x))$ permet d'ignorer la pénalité si la contrainte correspondante est satisfaite. Lorsque la valeur du coefficient de pénalité $\eta > 0$ est élevée, une plus grande importance est attachée à l'admissibilité. Généralement, la méthode est initialisée avec une valeur faible de η afin d'éviter une terminaison prématurée en un point certes admissible, mais potentiellement loin de l'optimum. L'admissibilité de la solution est alors assurée par augmentation progressive de la valeur de η au cours du processus itératif. Ceci est réalisé en définissant le coefficient de pénalité comme une suite croissante du type :

$$\eta^{k+1} = \alpha \eta^k \quad \text{avec } \alpha > 1 \quad (4.34)$$

- Méthode de pénalité intérieure :

Cette méthode repose sur l'utilisation d'une fonction dite de barrière $P(x)$, définie à l'intérieure de l'ensemble réalisable $X = \{x \mid g_i(x) < 0, \forall i \in \{1, 2, \dots, m\}\}$. La fonction barrière est continue sur X . Sa valeur tend vers l'infini lorsque la frontière de X est approchée par l'intérieur, c'est à dire lorsque l'une des contraintes $g_i(x)$ approche zéro par des valeurs négatives. Les fonctions de barrière les plus répandues sont de type logarithmique :

$$P(x) = -\eta \sum_{i=1}^m \ln(-g_i(x)) \quad (4.35)$$

ou inverse :

$$P(x) = -\eta \sum_{i=1}^m \frac{1}{g_i(x)} \quad (4.36)$$

A l'image de la méthode de pénalité extérieure, la méthode de barrière repose sur l'emploi d'un coefficient de pénalité $\eta > 0$. Le processus consiste à réduire la valeur de ce coefficient au cours des itérations afin d'atténuer l'influence de la pénalité, et d'autoriser l'algorithme de minimisation à se rapprocher progressivement de la frontière X :

$$\eta^{k+1} = \alpha \eta^k \quad \text{avec } \alpha < 1 \quad (4.37)$$

Le comportement des méthodes de pénalité dépend fortement du choix des coefficients η et α . Malheureusement il n'existe pas de règle universelle permettant de choisir des valeurs adaptées pour ces deux paramètres. Ce choix demeure problème-dépendant, et l'utilisateur sera souvent

condamné à exécuter la méthode à plusieurs reprises afin d'établir un jeu de paramètres $\{\eta^0, \alpha\}$ satisfaisant.

- Application à la minimisation de la fonction de Rosenbrock

Nous proposons d'appliquer la méthode de pénalité couplée à l'algorithme de Nelder-Mead afin de minimiser la fonction de Rosenbrock en deux dimensions. Cette fonction est définie par :

$$f(x) = 100(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2 \quad (4.38)$$

Il s'agit d'une fonction couramment utilisée pour tester les algorithmes d'optimisation. Elle est aussi appelée fonction banana du fait de ses courbes de niveau en forme de banane. Cette fonction non convexe présente un minimum global au point $\{1; 1\}$ où sa valeur est égale à zéro. Elle possède aussi un minimum local au point $\{-1; 1\}$. Une représentation graphique de cette fonction est illustrée par la FIG. 4.7.

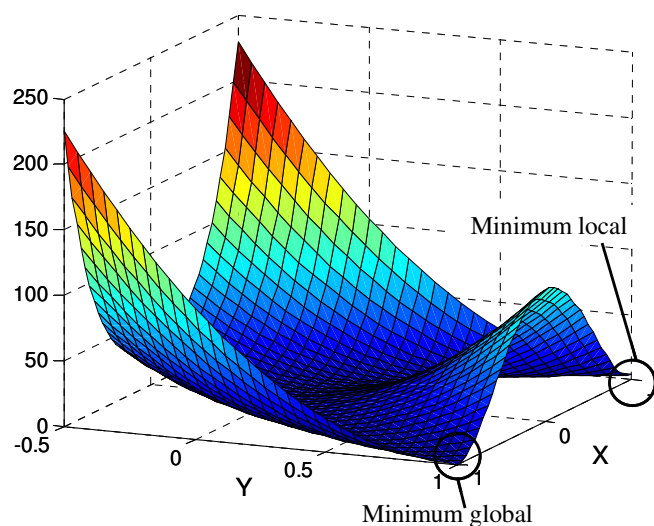


FIG. 4.7 - Représentation graphique de la fonction de Rosenbrock

Dans un premier temps nous appliquons l'algorithme de Nelder-Mead original (disponible dans Matlab®) en partant du point initial $x_0 = \{-0.5; 1\}$. Après 71 itérations (soit 132 évaluations de la fonction coût), l'algorithme converge vers le minimum global $x^* = \{1; 1\}$. La FIG. 4.8 illustre le « trajet » parcouru par le simplexe au cours du processus itératif. Nous pouvons constater que ce trajet épouse la trajectoire des lignes de niveau de la fonction de Rosenbrock, indiquant que le simplexe s'adapte à l'allure de la fonction coût. Il est intéressant de souligner la présence d'un « point de stagnation » du simplexe au point $\{-0.7; 0.5\}$. Ce phénomène de stagnation de la solution est typique de la méthode de Nelder-Mead, et demeure une des raisons de sa faible vitesse de convergence.

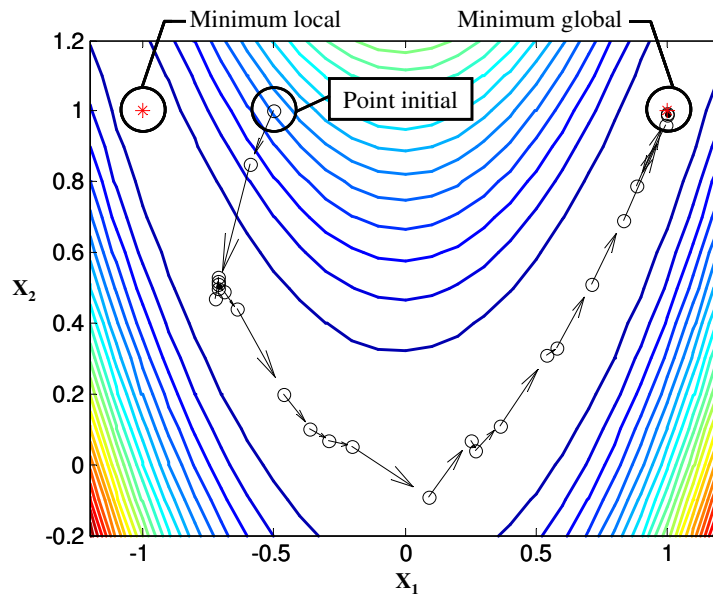


FIG. 4.8 - Minimisation de la fonction de Rosenbrock par l'algorithme de Nelder-Mead

Dans un second temps nous avons implémenté dans Matlab[®] la méthode de pénalité extérieure. Afin de tester son efficacité, nous réalisons une seconde minimisation en réduisant l'espace admissible. Les bornes adoptées pour les variables d'optimisation sont les suivantes :

$$-0.5 \leq x_1 \leq 0.5 \quad ; \quad -0.2 \leq x_2 \leq 1.2 \quad (4.39)$$

A chaque itération, le coefficient de pénalité est augmenté de 50% :

$$\eta^{k+1} = 1.5 \eta^k \quad ; \quad \text{avec } \eta^0 = 10^{-4} \quad (4.40)$$

Ce coefficient a été choisi arbitrairement de manière à ce que la fonction de pénalité $P(x)$ soit faible par rapport à la valeur de la fonction à l'instant initial, puis atteigne le même ordre de grandeur que la fonction coût au cours du processus itératif. Comme nous l'avons évoqué précédemment, le choix de ce paramètre reste une des principales problématiques de la méthode des pénalités. La FIG. 4.9a illustre le résultat obtenu. Après 77 itérations (soit 144 évaluations de la fonction coût), l'algorithme converge vers le point $x^* = \{0.5 ; 0.25\}$. La solution est donc comprise dans le domaine admissible. Toutefois, nous pouvons constater que l'algorithme effectue des évaluations de la fonction coût en dehors du domaine admissible. Il est possible de remédier à ce problème en augmentant la valeur initiale du coefficient de pénalité, ce qui favorise l'admissibilité de la solution. La FIG. 4.9b illustre le résultat obtenu avec un coefficient de pénalité initial $\eta^0 = 8.10^5$. Après 61 itérations (115 évaluations), l'algorithme converge vers le même résultat ($x^* = \{0.5 ; 0.25\}$) sans avoir procédé à aucune évaluation en dehors du domaine admissible. Cependant, augmenter la valeur initiale du coefficient de pénalité accroît le risque de convergence prématurée.

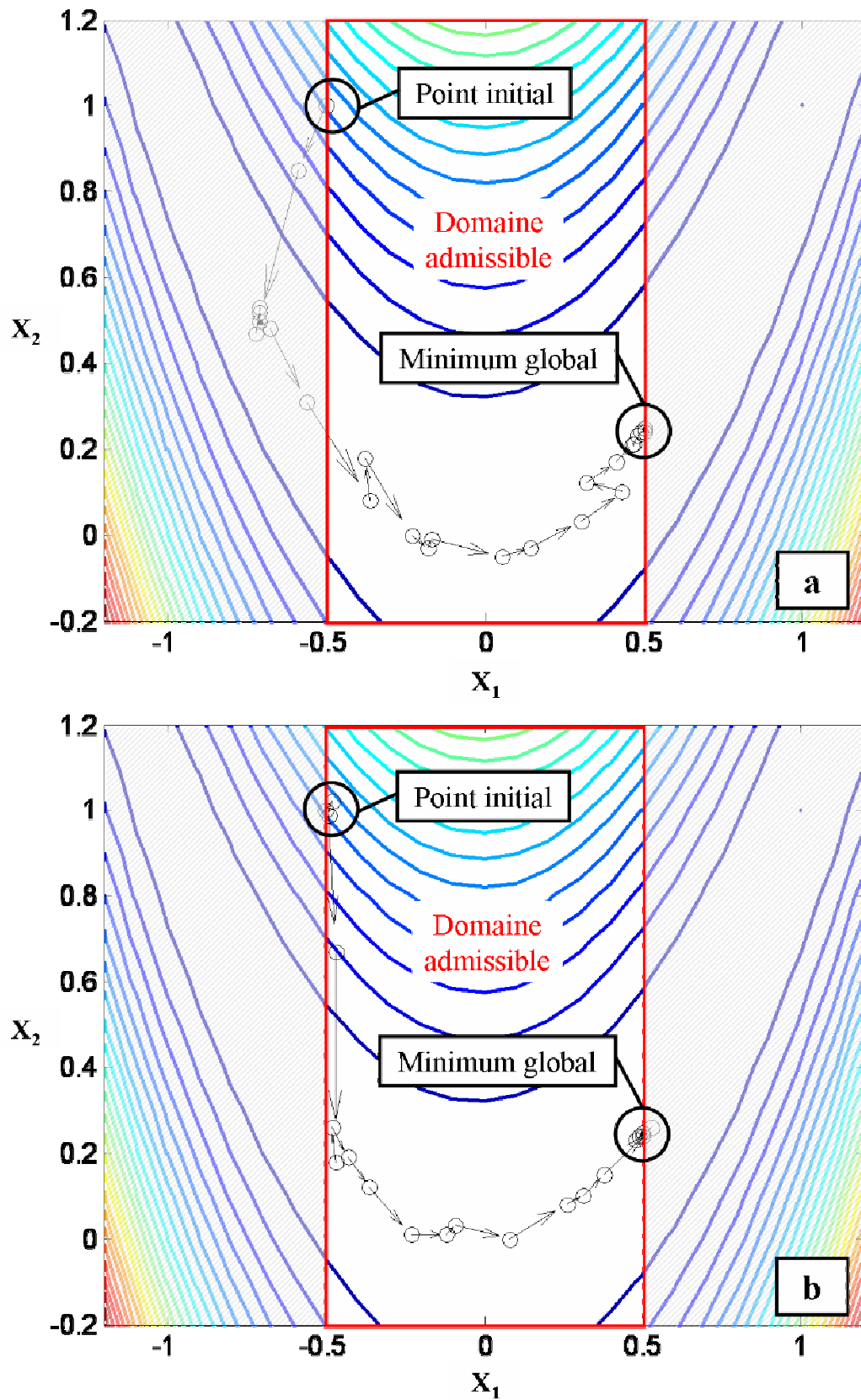


FIG. 4.9 - Minimisation de la fonction de Rosenbrock par l'algorithme de Nelder-Mead couplé à la méthode de pénalité extérieure – a) Coefficient de pénalité égal à 10^{-4}
b) Coefficient de pénalité égal à 8.10^5

Bien que la méthode de pénalité soit très simple à mettre en œuvre, son comportement est fortement dépendant des paramètres de pénalité, et par conséquent, son efficacité demeure problème-dépendant. Aujourd'hui, cette méthode est considérée comme peu efficace et sera souvent remplacée par les méthodes Lagrangienne (ou encore du Lagrangien augmenté) [MAT-2004].

Une autre alternative est d'utiliser la méthode de changement de variable, que nous présentons dans le paragraphe suivant.

c) Ajout des contraintes de type borne par la méthode de changement de variable

Cette méthode s'applique lorsque les variables d'optimisation sont uniquement contraintes par des bornes. Le problème d'optimisation s'écrit alors :

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ x_{\min} \leq x \leq x_{\max} \end{cases} \quad (4.41)$$

où x_{\min} et x_{\max} désignent respectivement les bornes inférieures et supérieures.

La première étape consiste à utiliser des variables réduites du type :

$$\tilde{x} = \text{asin} \left(2 \frac{(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})} - 1 \right) \quad (4.42)$$

Quelle que soit la valeur du point x du simplexe, la variable réduite est comprise entre $[-\pi/2 ; \pi/2]$. La fonction coût est évaluée à chaque itération au point x :

$$x = \frac{\sin(\tilde{x} + 1)}{2} (x_{\max} - x_{\min}) + x_{\min} \quad (4.43)$$

Le point x est donc compris entre $[x_{\min} ; x_{\max}]$.

Nous avons appliqué cette méthode au problème de minimisation de la fonction de Rosenbrock en adoptant les bornes définies par l'équation (4.39). Après 43 itérations (81 évaluations), l'algorithme converge vers le point ($x^* = \{0.5 ; 0.25\}$) sans avoir procédé à aucune évaluation en dehors du domaine admissible. La FIG. 4.10 illustre le résultat obtenu.

Cette méthode présente l'avantage de ne requérir aucun paramètre de réglage, c'est pourquoi nous l'avons retenu dans la suite de notre étude.

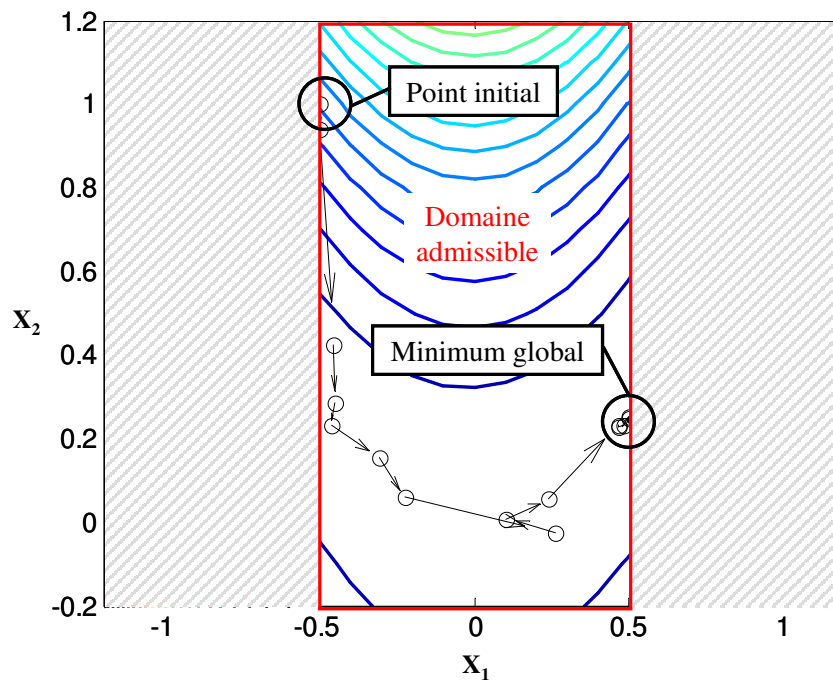


FIG. 4.10 - Minimisation de la fonction de Rosenbrock par l'algorithme de Nelder-Mead couplé à la méthode de changement de variable

Il est important de souligner qu'il n'existe à ce jour aucune démonstration mathématique concernant la convergence de la méthode de Nelder-Mead. Toutefois, les différents tests que nous avons réalisés ont été concluants quant à l'efficacité de la méthode. Bien que théoriquement la convergence de l'algorithme vers un minimum local ne soit pas assurée, en pratique nous constatons une amélioration significative de la solution en un faible nombre d'évaluations. De plus cet algorithme présente l'avantage d'être peu sensible aux perturbations de la fonction coût, tel que nous allons le montrer dans le paragraphe suivant.

d) Application de la méthode de Nelder-Mead à la minimisation d'une fonction bruitée – comparaison avec l'algorithme SQP

Nous souhaitons mettre en évidence la robustesse de l'algorithme de Nelder-Mead dans le cas d'une fonction coût bruitée. Pour cela, nous avons perturbé artificiellement la fonction de Rosenbrock. A chaque évaluation, une quantité infinitésimale pseudo-aléatoire est ajoutée/retranchée à la valeur de la fonction coût :

$$f_{\text{bruitée}} = f \cdot \left(1 \pm \varepsilon \cdot \frac{P_b}{100} \right) \quad \text{avec } \varepsilon : \text{nombre aléatoire} \in [0;1] \quad (4.44)$$

En un point donné, l'amplitude du bruit affecté à la fonction coût est comprise entre zéro et P_b pourcent de la valeur de la fonction coût en ce point. La FIG. 4.11 illustre les courbes de niveau de la fonction originale ainsi que celles de la fonction bruitée artificiellement pour $P_b = 1$.

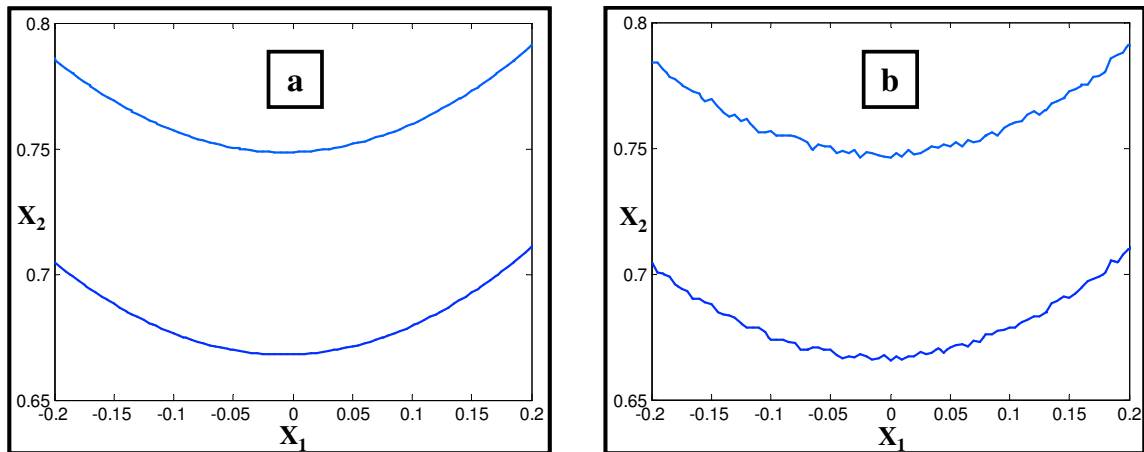


FIG. 4.11 - Courbes de niveau de la fonction de Rosenbrock
 a) Fonction "non bruitée" b) Fonction bruitée artificiellement

Nous procédons à la minimisation de cette fonction en adoptant les bornes définies par l'équation (4.39) et en partant du point initial $x_0 = \{-0.5 ; 1\}$.

Dans un premier temps, nous appliquons un bruit relativement faible, de l'ordre de 10^{-4} % de la valeur de la fonction coût ($P_b = 10^{-4}$). Les résultats sont reportés dans la TAB. 4.4.

	Fonction "non bruitée" ($P_b = 0$)		Fonction bruitée ($P_b = 10^{-4}$)	
	Nombre d'itérations / d'évaluations	Solution	Nombre d'itérations / d'évaluations	Solution
SQP	13 / 60	{0.5 ; 0.25}	-	Diverge
Nelder-Mead	57 / 108	{0.5 ; 0.25}	57 / 108	{0.5 ; 0.25}

TAB. 4.4 - Minimisation de la fonction de Rosenbrock bruitée par la méthode de Nelder-Mead et l'algorithme SQP

- Pour la fonction de Rosenbrock "non-bruitée", les deux algorithmes convergent vers la solution optimale. L'algorithme SQP requière toutefois un nombre d'évaluations beaucoup plus faible (60 contre 108 pour la méthode de Nelder-Mead).
- Pour la fonction bruitée, l'algorithme SQP diverge. En revanche, la méthode de Nelder-Mead converge vers la solution optimale sans évaluation supplémentaire par rapport à la fonction non bruitée.

La divergence de l'algorithme SQP peut être imputée à la méthode employée pour le calcul du gradient de la fonction coût. Les dérivées partielles de la fonction f sont calculées par différences-finies suivant la relation :

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (4.45)$$

Par défaut, l'algorithme SQP Matlab® impose une perturbation $\Delta x = 10^{-8}$. Cependant, ce paramètre peut être modifié par l'utilisateur. Nous proposons d'étudier l'influence de ce paramètre dans le cas d'un bruitage artificiel faible ($P_b = 10^{-4}$), puis dans le cas d'un bruitage plus élevé ($P_b = 10^{-3}$). Les résultats sont reportés dans la TAB. 4.5.

	Fonction bruitée ($P_b = 10^{-4}$)		Fonction bruitée ($P_b = 10^{-3}$)	
	Nombre d'itérations / d'évaluations	Solution	Nombre d'itérations / d'évaluations	Solution
SQP $\Delta x = 10^{-8}$	-	Diverge	-	Diverge
SQP $\Delta x = 10^{-6}$	16 / 71	{0.5 ; 0.25}	-	Diverge
SQP $\Delta x = 10^{-3}$	13 / 60	{0.5 ; 0.25}	22 / 98	{0.5 ; 0.25}
Nelder-Mead	57 / 108	{0.5 ; 0.25}	57 / 108	{0.5 ; 0.25}

TAB. 4.5 - Influence du pas imposé pour le calcul des dérivées par l'algorithme SQP

- Tout d'abord, lorsque la fonction est peu bruitée ($P_b = 10^{-4}$), une augmentation de la valeur du pas Δx permet à l'algorithme SQP de converger vers la solution optimale du problème.
- Lorsque le bruit est plus important ($P_b = 10^{-3}$), la solution optimale peut être obtenue à condition d'augmenter une nouvelle fois la valeur du pas. Cependant le nombre d'évaluations de la fonction coût augmente considérablement (augmentation de 65%). En effet, l'erreur commise sur le calcul des dérivées est fonction du carré de la valeur du pas.
- Quelle que soit la perturbation introduite dans la fonction coût, l'algorithme de Nelder-Mead converge vers la solution optimale avec un même nombre d'itérations.

Dans le cas d'un bruit plus important ($P_b = 10^{-2}$), aucune valeur du pas Δx ne permet à l'algorithme SQP de converger vers la solution optimale, alors que l'algorithme de Nelder-Mead conserve son efficacité.

Nous retiendrons que lorsque la fonction coût est bruitée, l'algorithme SQP est potentiellement capable de converger vers un minimum local à condition de régler ses paramètres judicieusement. Cependant l'augmentation significative du nombre d'évaluations rend la méthode beaucoup moins efficace. Ceci met clairement en évidence la supériorité de la méthode de Nelder-Mead qui ne requière aucun réglage supplémentaire lorsque la fonction est bruitée.

4.1.5 Conclusion de l'étude bibliographique

Dans cette première partie, nous avons proposé une classification des méthodes d'optimisation non-linéaire continue mono-objectif. Nous avons mis l'accent sur les principaux avantages et inconvénients propres à chacune des familles de méthodes. Cette étude bibliographique nous a conduit à porter notre choix sur les algorithmes SQP et de Nelder-Mead. Ces deux méthodes, fondamentalement différentes, seront mise en œuvre dans deux applications distinctes.

Dans un second temps, nous avons intégré les contraintes linéaires d'inégalités dans l'algorithme de Nelder-Mead, et démontré l'efficacité de la méthode en l'appliquant à la minimisation de la fonction de Rosenbrock. Enfin, nous avons mis en évidence l'efficacité de l'algorithme de Nelder-Mead dans le cas d'une fonction bruitée.

A présent, notre objectif est d'appliquer ces deux algorithmes afin d'optimiser l'étape de chauffage IR. L'algorithme SQP sera utilisé pour l'optimisation des paramètres de réglage du four IR. L'algorithme de Nelder-Mead sera quant à lui adopté pour l'optimisation de la distribution de température de la préforme. Ces deux applications sont présentées dans les parties suivantes.

4.2 Optimisation de la distribution de température de la préforme

4.2.1 Positionnement du problème

a) Objectifs et démarche adoptée

Afin d'optimiser la distribution de température de la préforme, nous proposons de coupler l'algorithme de Nelder-Mead avec le modèle de soufflage présenté dans le troisième chapitre. La procédure d'optimisation consiste à modifier itérativement la distribution de température de la préforme jusqu'à l'obtention d'une bouteille dont la distribution d'épaisseur est conforme à celle fixée par le cahier des charges. La méthode suppose donc que la distribution d'épaisseur optimale de la bouteille est connue a priori. Cette dernière est généralement obtenue par le biais d'essais consistant à mesurer la résistance de la bouteille à un écrasement (essai de top-load). Pour de nombreuses géométries de bouteilles, l'objectif est d'obtenir une épaisseur longitudinale la plus uniforme possible. C'est l'objectif que nous nous fixons dans cette étude.

Afin de mettre en évidence les potentialités de la méthode d'optimisation, nous proposons d'appliquer celle-ci au soufflage d'une bouteille 50cl de géométrie simple. La configuration adoptée est identique à celle du pilote de soufflage du CROMeP. Dans ces conditions, le seul paramètre modifiable par l'utilisateur est la pression *nominale* de soufflage. Cette dernière est considérée comme étant constante (toutefois la pression réelle de soufflage varie au cours du temps), ce qui nous permet de réaliser les simulations éléments-finis avec les conditions aux limites présentées dans le troisième chapitre. Dans cette étude, nous supposons que la température est uniforme dans l'épaisseur de la préforme. Par conséquent, l'optimisation ne porte que sur le profil de température longitudinal. L'optimisation du gradient de température dans l'épaisseur de la préforme fait bien entendu partie des perspectives de ce travail.

Les paragraphes suivants visent à présenter les différentes étapes de notre démarche.

b) Paramétrisation

La première étape consiste à paramétrer le profil de température longitudinal de la préforme. Pour cela, nous avons choisi cinq variables d'optimisation correspondant aux températures situées à des distances $z = 10, 20, 30, 50$ et 69 mm du col de la préforme (FIG. 4.12). Durant toute l'optimisation, la température du col de la préforme est fixée à 80 °C. En pratique, cette régulation est assurée par des canaux de refroidissement situés dans le support métallique de la préforme. Elle vise à limiter la déformation du col durant le chauffage IR. En l'absence de système de régulation, le refroidissement du col est assuré par le pont thermique existant entre la préforme et son support.

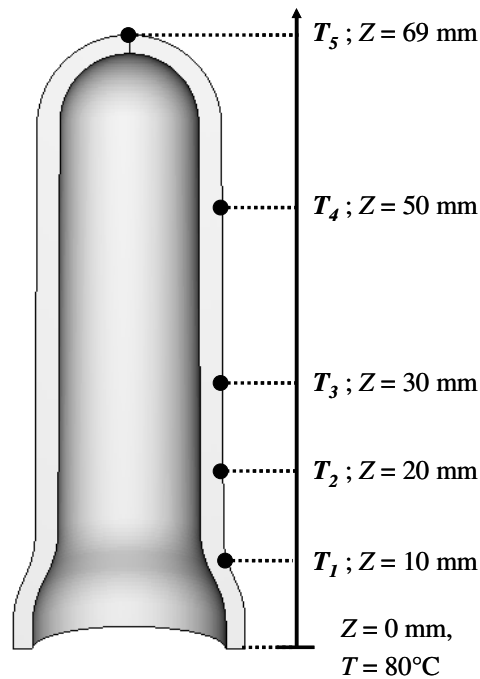


FIG. 4.12 - Paramétrisation de la distribution de température de la préforme

Le profil de température longitudinal est alors reconstitué par interpolation. Nous avons testé trois méthodes d'interpolation par morceaux disponibles dans le logiciel Matlab® : l'interpolation linéaire, les fonctions spline, et les fonctions PCHIP ("Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomial") qualifiées de "shape preserving" car elles garantissent la monotonie de la fonction d'interpolation. Des présentations détaillées de ces différentes méthodes sont proposées par [BOO-1978] et [FRI-1980]. La FIG. 4.13 illustre un exemple de résultat obtenu.

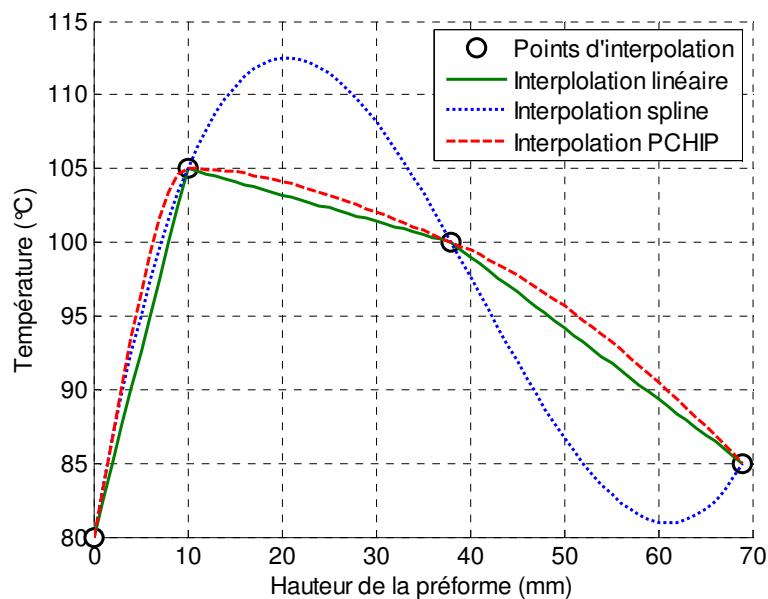


FIG. 4.13 - Reconstitution du profil de température longitudinal par interpolation polynomiale par morceaux

Bien que l'interpolation linéaire donne des résultats acceptables, elle ne garantit qu'une continuité par morceaux de la fonction d'interpolation (la dérivée première de la fonction n'est pas continue). Ceci se traduit par la présence de bifurcations au niveau des points d'interpolation, qui peuvent nuire à la stabilité du calcul éléments-finis. Les fonctions spline, quant à elles, garantissent la continuité des dérivées premières et secondes de la fonction d'interpolation. Elles permettent d'éviter les points de bifurcation dans le profil de température interpolé. Toutefois, elles ne garantissent pas la monotonie de la fonction entre deux points d'interpolation. Le profil de température obtenu est peu réaliste, tel que l'illustre la FIG. 4.13. Enfin, les fonctions PCHIP "shape preserving" présentent des dérivées premières continues et garantissent la monotonie du profil de température entre deux points d'interpolation. Parmi les trois méthodes testées, l'interpolation PCHIP est clairement la mieux adaptée à notre application. C'est pourquoi nous la retiendrons dans la suite de l'étude. Soulignons que l'interpolation est susceptible d'introduire des erreurs qui pourraient être une des origines du bruit observé dans la fonction coût.

c) Définition des contraintes

La seconde étape consiste à borner les variables d'optimisation. Cette phase permet de restreindre l'espace de recherche en limitant le domaine admissible à la zone qui nous semble la plus prometteuse. Dans le cas présent, les valeurs admissibles pour la température de la préforme découlent du comportement rhéologique du PET. En effet, nous savons que le PET adopte un comportement vitreux-caoutchoutique sur une gamme de température comprise entre sa température de transition vitreuse T_g et sa température de cristallisation T_c . En dehors de cette plage de températures, la pression de soufflage n'est pas suffisante pour assurer une déformation convenable. Les bornes adoptées sont donc les suivantes :

$$T_g \leq T \leq T_c \quad (4.46)$$

d) Définition de la fonction coût

La dernière étape consiste à traduire mathématiquement l'objectif de l'optimisation. Dans cette étude, nous souhaitons obtenir une bouteille d'épaisseur uniforme. L'uniformité de l'épaisseur de la bouteille peut être quantifiée avec la fonction coût suivante :

$$f(x) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (e_i - \bar{e})^2} \quad (4.47)$$

où e_i désigne l'épaisseur calculée au nœud d'indice i , et \bar{e} représente l'épaisseur moyenne calculée pour les N nœuds du maillage de la surface externe de la préforme.

Cette fonction représente l'écart type des épaisseurs calculées. Minimiser cette fonction permet donc de réduire la dispersion des épaisseurs autour de leur valeur moyenne, et donc d'augmenter l'homogénéité de l'épaisseur. L'épaisseur de la bouteille n'étant pas une grandeur directement accessible depuis le logiciel ABAQUS[®], nous avons développé un sous-programme en langage Python afin de la calculer. Après chaque simulation éléments-finis, ce sous-programme est exécuté depuis le logiciel Matlab[®]. Elle génère un fichier contenant les épaisseurs calculées à partir des coordonnées des nœuds du maillage. Le transfert de données entre Matlab[®] et ABAQUS[®] est donc assuré par des phases successives de lecture/écriture. Ceci occasionne probablement des erreurs cumulées du fait de la précision numérique, et pourrait être une autre source du bruit observé dans la fonction coût.

4.2.2 Résultats et discussion

Les variables d'optimisation sont arbitrairement initialisées à une valeur de 100 °C. Initialement, la distribution de température de la préforme est donc quasi-uniforme (la température du col de la préforme reste fixée à 80 °C). La vitesse de convergence de l'algorithme pourrait être augmentée en choisissant des conditions initiales plus judicieuses. Cependant, nous avons volontairement choisi un profil quasi-uniforme afin d'orienter le moins possible la solution. L'influence des conditions initiales sur le résultat de l'optimisation n'a pas été étudiée. Ce point fait toutefois parti de nos perspectives. Les résultats de l'optimisation sont reportés dans la TAB. 4.6.

	T_1 (°C)	T_2 (°C)	T_3 (°C)	T_4 (°C)	T_5 (°C)	f (mm)
Paramètres initiaux	100	100	100	100	100	0.134
Paramètres optimisés	104.1	105.9	101.2	92.2	87.9	0.016

TAB. 4.6 - Résultats d'optimisation

La FIG. 4.14 illustre la variation de la fonction coût en fonction du nombre d'itérations. Dès la première itération, la valeur de la fonction coût est réduite de 56%. Après sept itérations, soit trente-cinq simulations éléments-finis, le gain d'homogénéité s'élève à 88%. Le temps de calcul de l'optimisation s'élève à 14 h 10 min CPU (Pentium M, 1.8 GHz, 512 Mo RAM).

La FIG. 4.15 illustre la distribution d'épaisseur de la bouteille avant et après optimisation. Avec les paramètres initiaux, c'est à dire lorsque la distribution de température de la préforme est quasi-uniforme, nous observons une surépaisseur importante près du goulot de la bouteille. En revanche, l'épaisseur au niveau du fond de la bouteille est très faible. Ceci est caractéristique

d'un surétirage de la préforme qui engendre généralement une opacification du PET. Avec le profil de température optimisé, la bouteille présente une distribution d'épaisseur beaucoup plus uniforme.

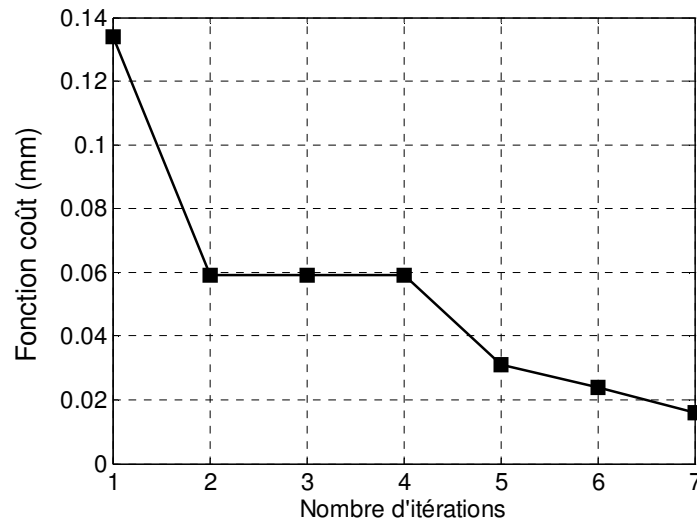


FIG. 4.14 - Courbe de convergence

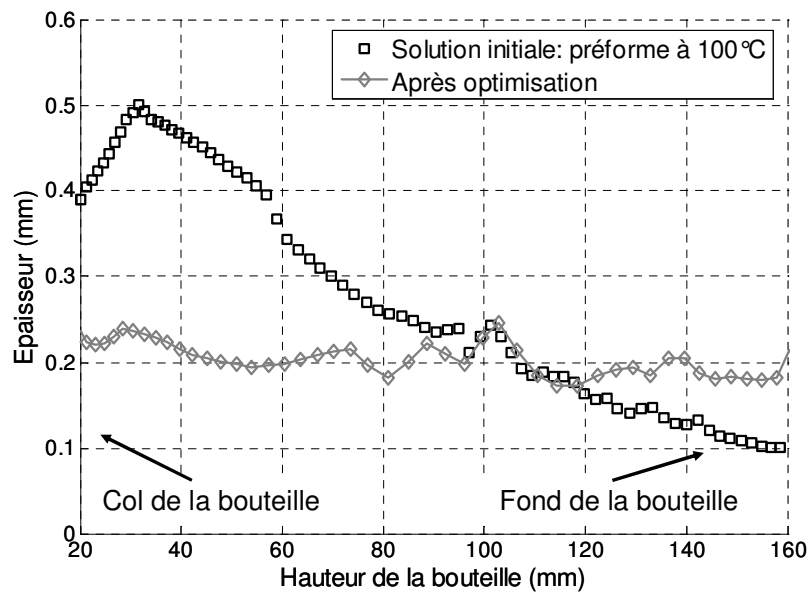


FIG. 4.15 - Distribution d'épaisseur de la bouteille avant et après optimisation

Afin de valider les résultats de l'optimisation, nous proposons de comparer le profil de température optimisé avec celui déterminé expérimentalement lors d'une campagne d'essais menée par la société Logoplaste. La configuration adoptée pour ces essais est la suivante :

- La préforme est identique à celle de notre étude. D'un poids de 18g, cette préforme est composée de PET T74F9, et injectée par la société Logoplaste.

- La bouteille soufflée, d'un volume de 50 cl, présente une géométrie similaire à celle de notre étude (le fond de la bouteille n'est pas plat contrairement à celle que nous utilisons).
- Les bouteilles sont mises en forme avec une souffleuse Sidel SBO1. Bien que la pression nominale de soufflage soit identique à celle adoptée dans nos simulations (7.5 bars), il est probable que le débit d'air injecté dans la préforme soit supérieur à celui du pilote de soufflage du CROMeP.

Le réglage de la machine est réalisé par une succession d'essais/erreur jusqu'à l'obtention d'une bouteille dont l'épaisseur est la plus uniforme possible. La température de la préforme est alors mesurée avec une caméra IR à l'instant précédant la fermeture du moule. La FIG. 4.16 illustre le profil de température optimisé ainsi que la solution optimale obtenue expérimentalement.

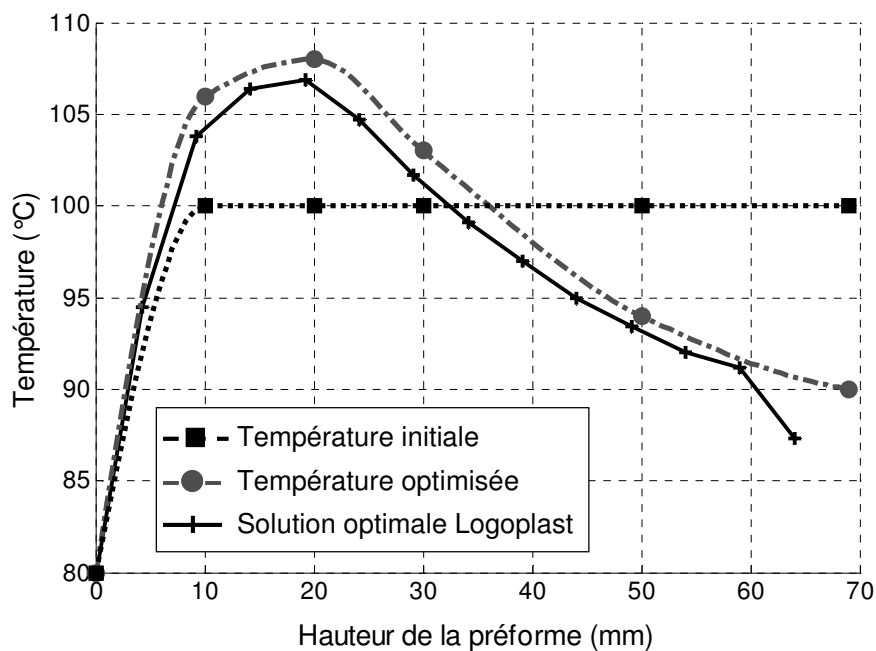


FIG. 4.16 - Profils de température longitudinal sur la paroi externe de la préforme avant et après optimisation

Nous observons un bon accord, tant qualitatif que quantitatif, entre la solution obtenue par optimisation et celle obtenue expérimentalement. Tel que l'illustre la FIG. 4.17, l'écart relatif moyen est égale 2.4 %. Ce résultat démontre qu'il est préférable de générer un gradient de température longitudinal au cours du chauffage IR. Ce gradient favorise la répartition de la matière lors du soufflage de la préforme et permet d'homogénéiser l'épaisseur de la bouteille. D'autre part nous constatons que la température optimale déterminée par optimisation est légèrement supérieure à la température optimale mesurée expérimentalement. Cette différence pourrait être due au gradient de température dans l'épaisseur de la préforme qui n'est pas pris en compte dans notre calcul.

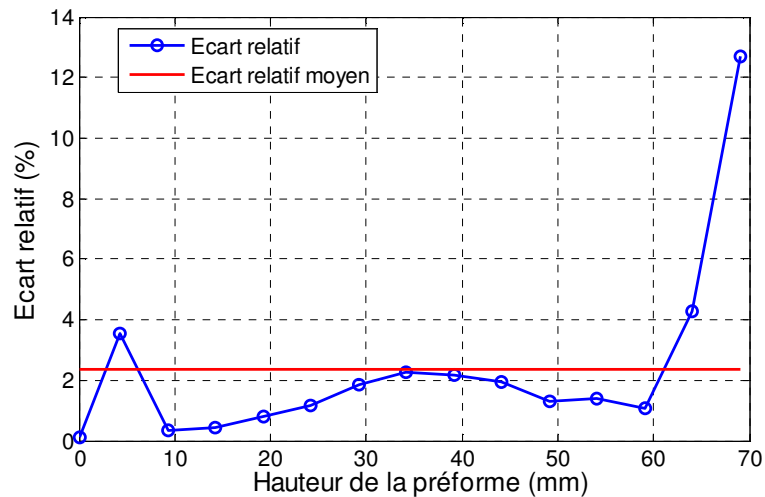


FIG. 4.17 - Ecart relatif entre la température déterminée par optimisation et la température optimale déterminée expérimentalement

La FIG. 4.18 illustre la forme de la bouteille obtenue ainsi que les iso-épaisseurs avant et après optimisation. Cette figure met clairement en évidence la plus-value apportée par la procédure d'optimisation. Pour une préforme dont la distribution de température est uniforme (égale à 100°C), le soufflage est incomplet et la bouteille présente une répartition d'épaisseur très hétérogène. L'optimisation de la distribution de température de la préforme a permis d'obtenir une bouteille épousant la forme du moule, et présentant une répartition d'épaisseur beaucoup plus uniforme.

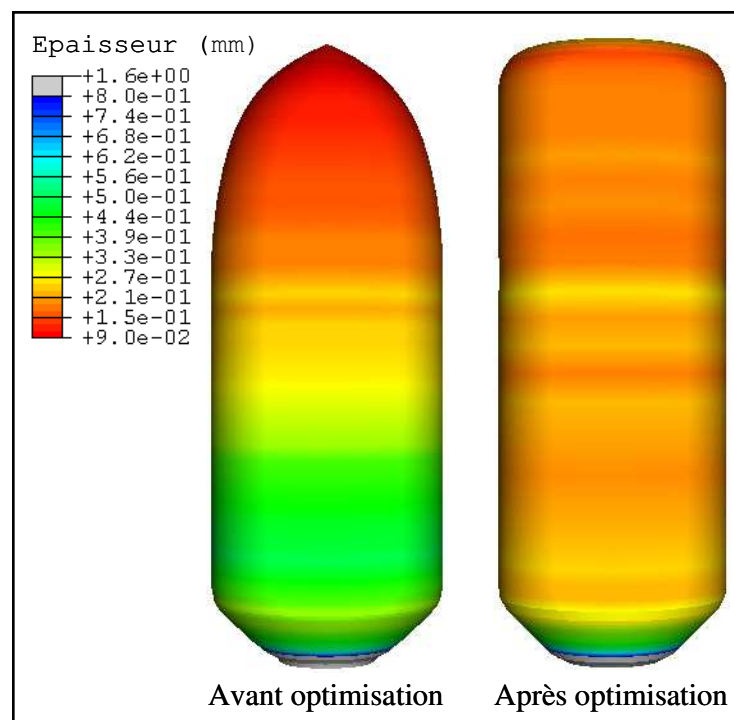


FIG. 4.18 - Forme de la bouteille et iso-épaisseurs avant et après optimisation

4.2.3 Conclusion sur l'optimisation de la distribution de température de la préforme

Bien que l'application présentée dans cette partie soit simplifiée par rapport à un cas industriel, elle met en évidence les potentialités de la méthode d'optimisation que nous avons développée. L'accord qualitatif entre les résultats numériques et les mesures expérimentales démontre la validité de notre approche. En dépit des fortes non-linéarités du problème (grandes déformations, loi de comportement fortement non-linéaire, etc...), le modèle de soufflage s'est avéré suffisamment précis et robuste pour être intégré efficacement dans une boucle d'optimisation. Ceci constitue en soit un des apports majeurs de ce travail.

Toutefois, différentes critiques peuvent être émises à propos des hypothèses adoptées. Tout d'abord, nous avons supposé que l'objectif de l'optimisation était d'obtenir une bouteille d'épaisseur uniforme. Or la qualité d'une bouteille ne dépend pas uniquement de sa distribution d'épaisseur. Il serait intéressant d'étudier l'influence de la température de la préforme sur les propriétés optiques et mécaniques de la bouteille. D'autre part, nous avons supposé que la température était uniforme dans l'épaisseur de la préforme, ce qui n'est généralement pas le cas en pratique. Ces différents points seront discutés plus amplement dans la conclusion du chapitre.

En dépit des problématiques évoquées ci dessus, la méthode d'optimisation a permis d'obtenir des résultats suffisamment fiables pour être exploités. Dans la partie suivante, nous présentons une méthode permettant d'optimiser les paramètres de réglage du four infrarouge. L'objectif de l'optimisation sera d'obtenir une préforme dont la distribution de température est identique à celle que nous avons déterminée par optimisation dans le paragraphe 4.2.2. Afin d'être en mesure de valider les résultats numériques, nous avons choisi de fixer comme objectif, non pas le profil de température optimal déterminé par optimisation, mais le profil de température optimal déterminé expérimentalement par la société Logoplaste (comme l'illustre la FIG. 4.16, ces deux profils de température sont très similaires). Ainsi, nous serons en mesure de comparer directement les paramètres de réglage du four que nous avons calculés, et ceux déterminés expérimentalement.

4.3 Optimisation des paramètres de réglage du four IR

4.3.1 Positionnement du problème

a) Objectif de l'optimisation

Afin d'optimiser les paramètres de réglage du four IR, nous proposons de coupler l'algorithme SQP avec le logiciel PLASTIRAD présenté dans le second chapitre. La procédure d'optimisation consiste à modifier itérativement les paramètres du four IR, jusqu'à ce que la paroi externe de la préforme présente un profil de température longitudinal le plus proche possible de celui déterminé dans la partie 4.2.2. Le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme n'est pas optimisé. Ceci fait toutefois partie des perspectives de ce travail. Les paramètres de réglage optimaux déterminés expérimentalement par la société Logoplaste permettront de valider les résultats de l'optimisation.

b) Configuration du four IR

La configuration adoptée pour les simulations du chauffage IR est illustrée par la FIG. 4.19.

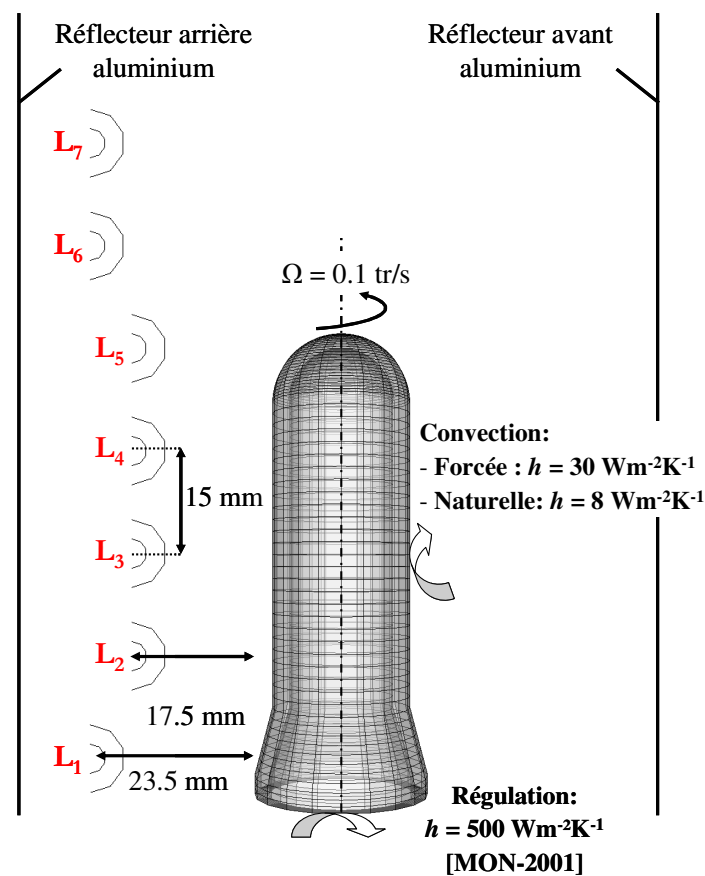


FIG. 4.19 - Configuration du four IR et maillage de la préforme

Il s'agit de la configuration du four IR intégré dans la souffleuse Sidel SBO1, utilisée lors de la campagne d'essais réalisée par la société Logoplaste. Le four est composé de sept lampes halogènes présentant chacune une puissance nominale de 2 kW. La surface arrière de ces lampes (face cachée de la préforme) est recouverte d'un revêtement céramique jouant le rôle de réflecteur. Le four dispose en outre de deux réflecteurs métalliques avant et arrière, comme l'illustre la FIG. 4.19. Un système de ventilation permet de refroidir le four (lampes et parois) ainsi que la paroi externe de la préforme. Enfin, le support de la préforme est régulé en température à l'aide de canaux de refroidissement. Les paramètres de contrôle de l'utilisateur (paramètres de réglage du four IR) sont les suivants :

- Le pourcentage de la puissance nominale affecté à chacune des lampes.
- La vitesse de translation de la préforme : elle conditionne le temps de séjour de la préforme au sein du four, ainsi que le temps de maintien.
- Le pourcentage de la puissance nominale du ventilateur.

Après avoir quitté le four, la préforme est acheminée vers le poste de soufflage. Durant cette période, elle subit un refroidissement au contact de l'air libre.

Les positions des lampes par rapport à la préforme sont indiquées sur la FIG. 4.19. Les paramètres géométriques des lampes sont illustrés par la FIG. 1.5 (chapitre 1). Ces données sont requises par le logiciel PLASTIRAD pour le calcul des températures des lampes.

Les essais sont réalisés avec une cadence de 800 bouteilles par heure. Pour atteindre cette cadence, la vitesse d'acheminement de la préforme est fixée à 13.5 mm/s. La vitesse de rotation correspondante est de 0.1 tour/s. Dans ces conditions, le temps de séjour de la préforme dans le four est égal à 22.4 s (temps de chauffage). Une fois sortie du four, le temps nécessaire à l'acheminement de la préforme vers le module de soufflage est égal à 3 s (temps de maintien). Par conséquent, les temps de chauffage et de maintien sont imposés et ne seront pas optimisés.

c) Conditions aux limites adoptées pour les simulations

Les conditions aux limites sont identiques à celles présentées dans le second chapitre. La seule différence provient du système de ventilation. Celui-ci génère des transferts thermiques par convection forcée entre l'air ambiant et la surface externe de la préforme. Ces transferts de chaleur convectifs sont pris en compte par le biais d'un coefficient d'échange moyen h_f , uniforme sur la surface externe de la préforme. Nous avons fixé sa valeur à $30 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, en nous appuyant sur les valeurs de coefficients d'échange mesurées sur un four industriel par [MON-2004]. D'autre part, lors de son acheminement vers le module de soufflage, la préforme est refroidie par convection au contact de l'air ambiant. Ces échanges convectifs sont pris en compte par le biais d'un second coefficient d'échange moyen h_n . Bien que la préforme soit en mouvement, nous avons utilisé une corrélation de type convection naturelle pour calculer le coefficient d'échange. En appliquant la corrélation de Churchill and Chu [CHU-1975] présentée

au second chapitre, nous obtenons une valeur de $8 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$. Nous avons procédé à une étude de sensibilité afin de mettre en évidence l'influence de ces deux coefficients d'échange sur la distribution de température calculée numériquement. Cette étude, présentée en Annexe D, révèle que les coefficients d'échange jouent un rôle déterminant sur le gradient de température généré dans l'épaisseur de la préforme, mais n'ont qu'un effet très limité sur la température calculée sur la surface externe de la préforme. Par conséquent, l'erreur commise sur les valeurs des coefficients d'échange n'aura qu'un impact limité sur les résultats de l'optimisation.

d) Maillage de la préforme

La géométrie ainsi que le maillage 3D sont réalisés à l'aide du logiciel IDEAS®. Nous avons adopté un maillage structuré composé de quadrangles à huit nœuds. Les mailles sont orthogonales dans l'épaisseur de la préforme afin de faciliter le calcul de la propagation du flux radiatif. Un intérêt tout particulier a été apporté à la distorsion des éléments, notamment au niveau de la calotte de la préforme. En suivant les recommandations proposées par [MON-2001] suite à son étude paramétrique du logiciel PLASTIRAD, nous avons choisi un nombre de mailles dans l'épaisseur de la préforme égal à dix, ainsi qu'un pas de temps de 0.1 s. Enfin, nous avons choisi un nombre d'éléments élevé suivant la hauteur de la préforme (cinquante éléments) afin de garantir une bonne précision sur le profil de température longitudinal. Le nombre d'éléments total s'élève à dix mille. Le maillage adopté est illustré par la FIG. 4.19.

e) Variables d'optimisation, contraintes, et fonction coût

Nous proposons d'optimiser le pourcentage de la puissance nominale de chacune des lampes. Le nombre de variables d'optimisation est donc égal à sept. Par la suite, nous noterons P_i le pourcentage de la puissance nominale correspondant à la lampe L_i (les indices sont illustrés par la FIG. 4.19). Chaque variable est contrainte par les bornes suivantes :

$$0\% \leq P_i \leq 100\% \quad (4.48)$$

La fonction coût est définie comme étant l'erreur, au sens des moindres carrés, entre la distribution de température longitudinale calculée T_{cal} et la distribution de température longitudinale objectif T_{obj} , au niveau de la paroi externe de la préforme :

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (T_{cal,i}(x) - T_{obj,i})^2 \quad (4.49)$$

4.3.2 Résultats et discussion

Les variables d'optimisation sont arbitrairement initialisées à 35%. L'influence des conditions initiales sur le résultat de l'optimisation n'a pas été étudiée, bien que cela fasse partie des perspectives de ce travail. Le temps de calcul de l'optimisation s'élève à 7 h 30 min CPU (Pentium M, 1.8 GHz, 512 Mo RAM). La FIG. 4.20 illustre l'évolution de la fonction coût et des variables d'optimisation en fonction du nombre d'itérations. Dès la première itération, la valeur de la fonction coût décroît de 85%. Après quatre itérations, soit quarante-cinq simulations du chauffage IR, la fonction objectif est réduite de 98%. Cette rapide décroissance de la fonction coût met en évidence l'efficacité de l'algorithme SQP.

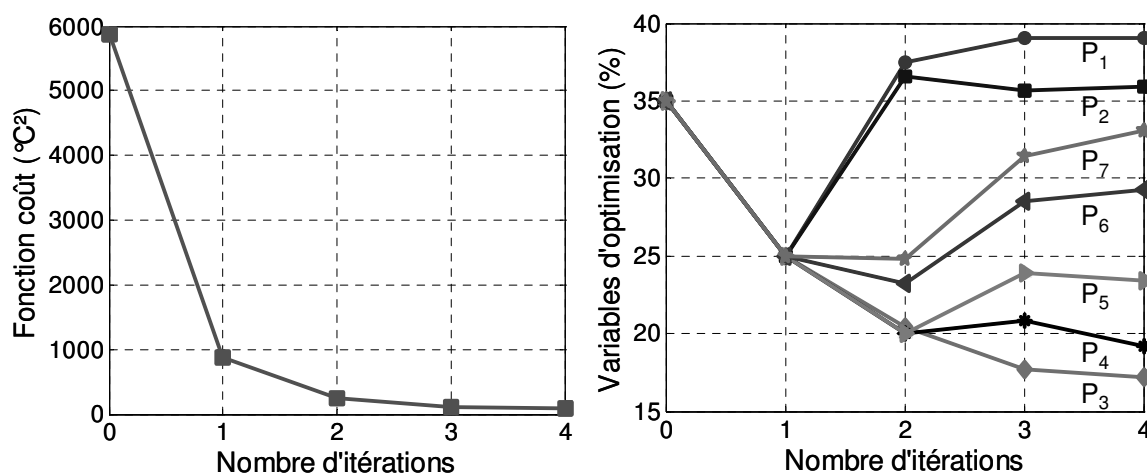


FIG. 4.20 - Évolution de la fonction coût et des variables d'optimisation en fonction du nombre d'itérations

La FIG. 4.21 illustre trois profils de température. Le premier correspond à la température calculée avec les paramètres initiaux (variables d'optimisation fixées à 35%). Le second correspond à la température calculée avec les paramètres optimisés. Enfin, le dernier profil de température représente l'objectif de l'optimisation, i. e. la distribution de température optimale déterminée expérimentalement. Ces trois distributions de température correspondent à la surface externe de la préforme.

A l'issue de l'optimisation, un très bon accord est obtenu entre la distribution de température calculée et la distribution de température objectif. L'erreur au sens des moindres carrés s'élève à $89 \text{ (}^\circ\text{C)}^2$, contre $5870 \text{ (}^\circ\text{C)}^2$ avec les paramètres initiaux

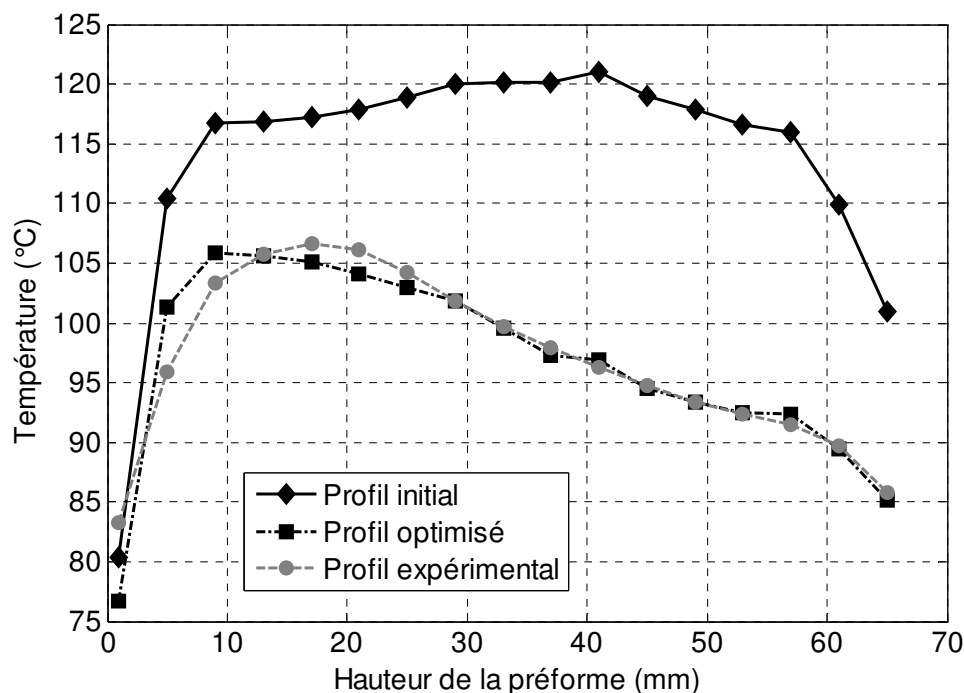


FIG. 4.21 - Profils de température de la préforme avant et après optimisation – Comparaison avec les mesures expérimentales

Afin de valider les résultats de l'optimisation, nous proposons de comparer les paramètres calculés par optimisation avec ceux déterminés expérimentalement. Tel que l'illustre la FIG. 4.22, les puissances des lampes 3 à 7 sont relativement bien estimées. Les erreurs relatives par rapport aux valeurs expérimentales sont comprises entre 1% et 10%. En revanche, pour les lampes 1 et 2, un écart significatif peut être observé entre les puissances calculées et les puissances mesurées. En particulier, l'erreur commise sur la puissance de la lampe 2 est de 88%. Cette erreur est difficilement interprétable. La raison la plus plausible est la présence de la bague de protection qui n'est pas pris en compte dans notre modèle. Cette bague vise à limiter la déformation du col de la préforme au cours du chauffage, en le protégeant du rayonnement IR. Le but d'un tel système est de limiter les risques de déformation susceptible de compromettre, après remplissage, l'opération de bouchage de la bouteille. En pratique, la présence de la bague de protection implique une augmentation de la puissance de la lampe 1, qui contribue au chauffage de la zone couverte par la lampe 2. La lampe 2 voit alors sa puissance diminuer. Ces résultats sont donc tout à fait cohérents. D'autre part, cette erreur peut aussi provenir d'une mauvaise estimation de l'effet des réflecteurs métalliques.

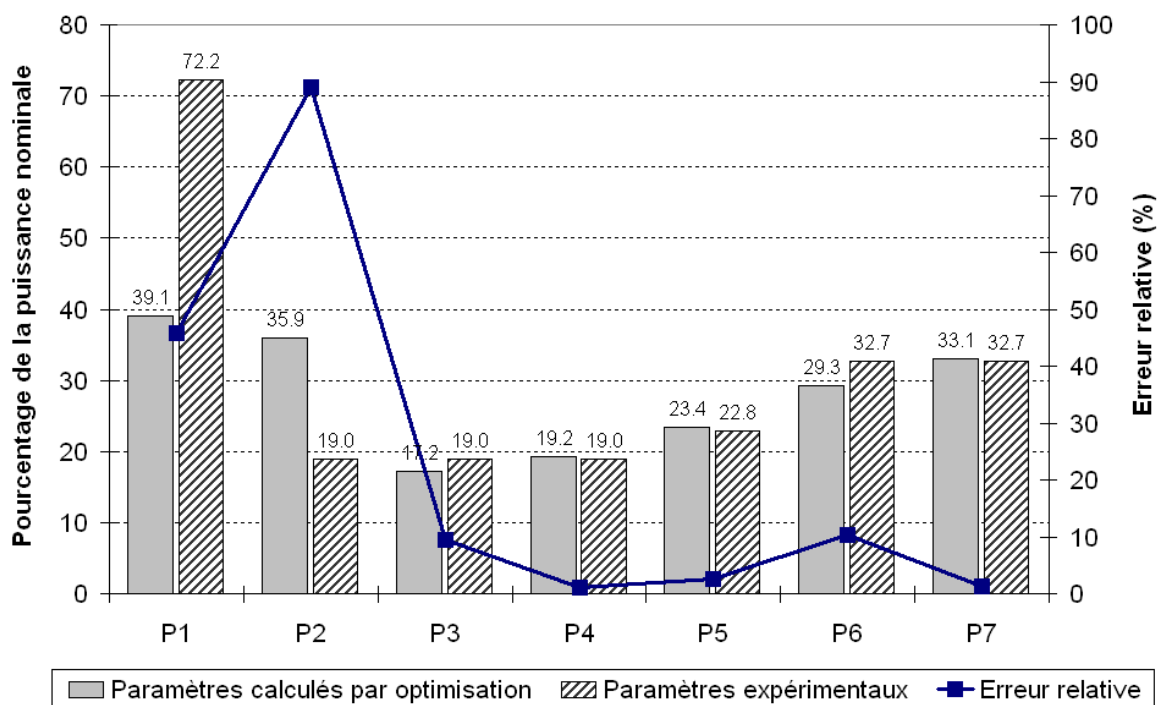


FIG. 4.22 - Comparaison des paramètres identifiés par optimisation et des paramètres obtenus expérimentalement

Avant de conclure, nous proposons de comparer les profils de température longitudinaux sur les parois externe et interne de la préforme, afin de mettre en évidence le gradient de température transversal. La FIG. 4.23a illustre les profils de température calculés avec les paramètres optimisés. Nous pouvons constater que la température est moins élevée sur la face interne de la préforme que sur sa face externe. Ceci révèle que le temps de maintien n'est pas suffisant pour inverser la température dans l'épaisseur de la préforme. La différence de température maximale entre la paroi externe et la paroi interne est d'environ 2.5 °C (FIG. 4.23a). Comme nous l'avons démontré dans l'étude de sensibilité présentée en Annexe D, cette valeur est fortement dépendante des coefficients d'échange adoptés. En augmentant les coefficients d'échange de 30%, la différence de température maximale entre la paroi externe et la paroi interne est inférieure à 1°C (FIG. 4.23b).

Dans la partie 3.2., nous avons adopté l'hypothèse que la température était uniforme dans l'épaisseur de la préforme. L'erreur commise en adoptant cette hypothèse est relativement faible compte tenu des résultats illustrés par la FIG. 4.23.

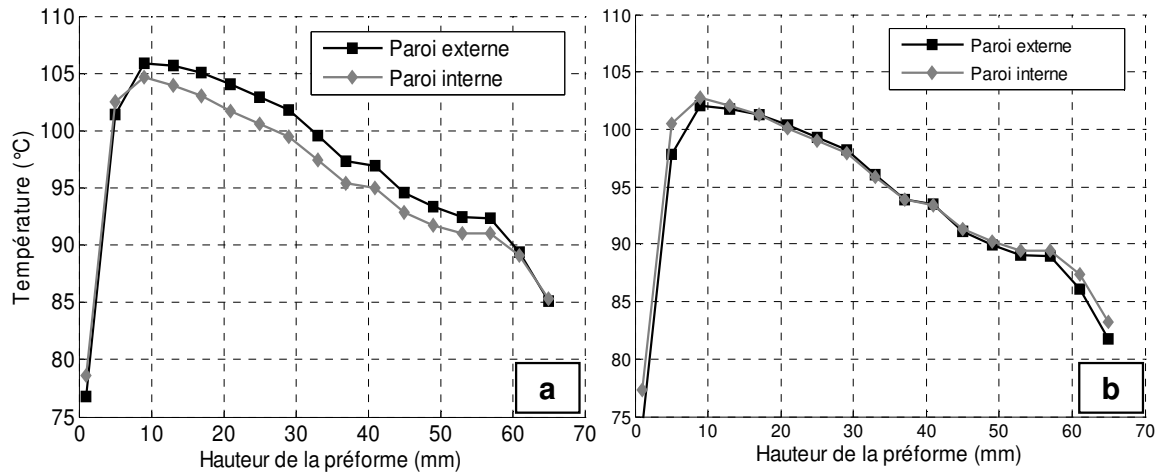


FIG. 4.23 - Profils de température longitudinal calculés avec les paramètres optimisés –
a) Coefficients d'échange utilisés pour l'optimisation b) Coefficients
d'échange augmentés de 30%

4.3.3 Conclusion sur l'optimisation des paramètres de réglage du four IR

A travers cette application, nous avons démontré que la méthode d'optimisation était en mesure de réduire très sensiblement l'erreur entre la distribution de température calculée, et la distribution de température objectif. Globalement, les paramètres de réglage calculés par optimisation sont en accord avec ceux déterminés expérimentalement, ce qui valide notre approche. Le logiciel PLASTIRAD s'est avéré suffisamment précis et robuste pour être intégré efficacement dans une boucle d'optimisation. Une des perspectives de ce travail est d'évaluer la robustesse de la méthode d'optimisation, en étudiant l'influence des conditions initiales sur le résultat de l'optimisation. Une autre perspective intéressante serait de coupler le logiciel PLASTIRAD avec le modèle de soufflage afin de relier directement les paramètres de chauffage à la distribution d'épaisseur de la bouteille. Nous reviendrons sur ce point dans la conclusion du chapitre.

4.4 Conclusion partielle

A travers l'application présentée dans ce chapitre, nous avons mis en évidence les potentialités de la méthode d'optimisation que nous avons développée. L'accord qualitatif entre les résultats numériques et les mesures expérimentales démontre la validité de notre approche.

Toutefois, différentes remarques peuvent être émises à propos des hypothèses adoptées. Tout d'abord, nous avons supposé que l'objectif de l'optimisation était d'obtenir une bouteille d'épaisseur uniforme. Or la qualité d'une bouteille ne dépend pas uniquement de sa distribution d'épaisseur. En réalité, la distribution de température de la préforme affecte aussi l'orientation moléculaire et la cristallisation induite au cours de la déformation, qui a leur tour, affectent les propriétés mécaniques, optiques, et barrières de la bouteille [KIM-1985], [VEN-1998]. Ces critères n'ont pas été pris en compte car le modèle rhéologique que nous avons adopté ne le permet pas. Ceci met en évidence la principale lacune de notre modèle de soufflage, à savoir l'utilisation d'une loi de comportement phénoménologique décollée de l'évolution de la microstructure du PET au cours de sa déformation.

D'autre part, nous avons supposé que la température était uniforme dans l'épaisseur de la préforme. Or, le gradient de température transversal joue un rôle majeur sur les propriétés optiques de la bouteille. L'étude présentée par [VEN-1998] démontre qu'il est crucial d'imposer un temps de maintien suffisamment important pour générer une inversion de température dans l'épaisseur de la préforme. Cette inversion de température a pour conséquence d'améliorer la transparence optique de la bouteille. Ces différentes perspectives impliquent la mise en œuvre d'un modèle rhéologique plus riche, prenant en compte l'anisotropie du comportement du PET, et capable de prédire les propriétés mécaniques de la bouteille. Le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme pourrait alors être optimisé numériquement.

D'autre part, une perspective intéressante serait de réaliser l'optimisation du chauffage IR en une seule étape. L'idée serait de coupler le modèle de chauffage (présenté dans le second chapitre) avec le modèle de soufflage (présenté dans le troisième chapitre). Ainsi, il serait possible de corrélérer directement les paramètres de réglage du four IR avec la distribution d'épaisseur de la bouteille.

Conclusions et perspectives

1. Bilan de l'étude

L'objectif principal de ce travail est le développement d'une procédure d'optimisation numérique, permettant de calculer automatiquement les paramètres de réglage du four infrarouge, et plus particulièrement des lampes halogènes. L'enjeu est de réduire le temps nécessaire au réglage du four, tout en garantissant un chauffage adéquat. Cet objectif est donc en adéquation avec les exigences industrielles de plus en plus fortes vis à vis de la qualité des bouteilles et de la rentabilité du procédé. Deux problématiques découlent de cet objectif :

- Quelle doit être la distribution de température dans la préforme à l'issue du chauffage IR ?
- Comment régler le four IR afin que la préforme présente cette distribution de température ?

Pour répondre à ces problématiques, nous avons développé deux procédures d'optimisation distinctes, qui constituent la contribution originale de nos travaux de recherche.

✓ Optimisation de la distribution de température de la préforme

La première méthode d'optimisation que nous avons développée repose sur le couplage entre un algorithme d'optimisation non-linéaire, avec des simulations du soufflage réalisées par éléments-finis avec le logiciel ABAQUS®. La procédure consiste à modifier itérativement la distribution de température de la préforme, jusqu'à l'obtention d'une bouteille dont l'épaisseur calculée est la plus uniforme possible. Bien que l'objectif choisi soit quelque peu réducteur (la qualité d'une bouteille ne dépend pas uniquement de l'uniformité de son épaisseur) il reste en adéquation avec une des principales problématiques du procédé d'injection-soufflage, à savoir la maîtrise de l'épaisseur de la bouteille.

Le premier apport scientifique de ce travail réside dans le développement de simulations numériques (en deux dimensions axisymétriques) suffisamment précises, robustes, et peu coûteuses en temps de calcul, pour être intégrées efficacement dans une boucle d'optimisation. Pour parvenir à ce résultat, nous avons modélisé le comportement mécanique du PET avec une loi isotrope, basée sur le modèle de G'sell couplé à une thermodépendance de type WLF. Cette loi phénoménologique prend en compte l'effet de la vitesse de déformation, ainsi que le durcissement structural du PET sur une plage de mise en œuvre limitée. Toutefois, du fait de sa nature viscoplastique, elle ne prend pas en compte l'élasticité du PET, ni l'anisotropie de son comportement. En dépit de ces lacunes, elle a permis d'obtenir un bon compromis entre

précision et temps de calcul, tout en contribuant à la stabilité des simulations numériques du fait de sa nature visqueuse. L'implantation de la loi de comportement dans le logiciel ABAQUS® a été réalisée par le biais d'un sous-programme développé en Fortran, puis validée grâce au développement d'un modèle analytique de soufflage d'une membrane sphérique.

Le *calcul automatique de la pression de soufflage* constitue une des originalités du modèle de soufflage. Un modèle thermodynamique, basé sur la loi des gaz parfaits, permet de calculer la pression d'air appliquée sur la paroi interne de la préforme, à partir du débit d'air injecté dans la préforme (nous avons mesuré ce débit sur un pilote de soufflage de laboratoire). Cette méthode a permis de calculer des cinématiques de mises en forme conformes à celles observées expérimentalement, ce qui n'est pas le cas lorsque l'on applique la pression directement en tant que donnée d'entrée du modèle.

Enfin, la dernière contribution originale du modèle de soufflage réside dans la *mesure de la Résistance Thermique de Contact (RTC)* entre la préforme et le moule. Celle-ci a été mesurée sur un pilote de laboratoire à l'aide de capteurs spécifiquement conçus pour cette étude. De plus, nous avons étudié l'*influence de la pression nominale de soufflage* sur la valeur maximale de la RTC.

Les simulations numériques ont été validées expérimentalement à l'aide de mesures réalisées sur un pilote de soufflage de laboratoire. Un bon accord est obtenu entre la distribution d'épaisseur calculée par le modèle, et la distribution d'épaisseur mesurée expérimentalement. *L'erreur relative moyenne est inférieure à 16 %.*

D'autre part, nous avons réalisé une étude bibliographique des méthodes d'optimisation non-linéaire continue. Suite à cette étude, notre choix s'est porté sur l'algorithme de Nelder-Mead, disponible dans Matlab®. Il s'agit d'un algorithme d'optimisation locale d'ordre zéro (ne requérant pas les dérivées de la fonction coût) particulièrement adapté aux fonctions bruitées. Une des contributions de notre travail réside dans l'ajout des contraintes de type borne, notamment par les méthodes de pénalités ou de changement de variables. Afin de rendre la procédure d'optimisation entièrement automatique, nous avons développé des sous-programmes en langage Python permettant de faire le lien entre ABAQUS® et l'environnement Matlab®.

Finalement, nous avons mis en œuvre la méthode d'optimisation afin d'uniformiser l'épaisseur d'une bouteille de faible contenance (50 cl) et de géométrie simple. L'optimisation porte uniquement sur la distribution de température longitudinal de la préforme. Les résultats de l'optimisation ont été validés expérimentalement à l'aide de mesures de températures réalisées par la société Logoplaste. Nous avons obtenu un accord, tant qualitatif que quantitatif, entre le profil de température calculé par optimisation, et le profil de température optimal déterminé expérimentalement. *L'écart relatif moyen est inférieur à 3 %.* Ces résultats démontrent l'efficacité de notre approche. L'optimisation révèle qu'un gradient de température longitudinal

adéquat permet une meilleure répartition du PET dans le moule, et favorise l'uniformité de l'épaisseur de la bouteille.

✓ Optimisation des paramètres opératoires du four infrarouge

La seconde méthode d'optimisation que nous avons développée repose sur le couplage entre un algorithme de programmation quadratique séquentielle (SQP), avec des simulations du conditionnement thermique réalisées avec le logiciel de chauffage IR développé au laboratoire [MON-2001]. La procédure consiste à modifier itérativement les pourcentages de la puissance nominale affectés à chacune des lampes Halogène, jusqu'à ce que la préforme présente une distribution de température longitudinale conforme à celle calculée par optimisation dans la première étape.

Nous avons mesuré les propriétés radiatives du PET utilisé dans notre étude, notamment le coefficient d'absorption spectral, et l'émissivité spectrale. Ces propriétés sont requises pour le calcul de l'absorption du rayonnement dans l'épaisseur de la préforme. Les simulations numériques du chauffage ont été validées dans différentes configurations. Dans tous les cas, *l'erreur entre les températures calculées et les températures mesurées sont comprises entre 5% et 10%*. Enfin, nous avons mis en œuvre la méthode d'optimisation en adoptant la configuration du four d'une machine semi-industrielle (Sidel SBO1). L'accord qualitatif obtenu entre les paramètres de réglage calculés par optimisation et ceux déterminés expérimentalement, valident notre approche.

Enfin, soulignons que ces travaux constituent la contribution principale du CROMeP dans le cadre du projet APT_PACK, et ont fait l'objet de différentes publications [BOR-2009], [BOR-2007a], [BOR-2007b].

2. Axes d'amélioration et développements futurs

Les perspectives de ce travail découlent directement des hypothèses que nous avons adoptées. Tout d'abord, nous avons supposé que l'objectif de l'optimisation était d'uniformiser l'épaisseur de la bouteille. Or la qualité d'une bouteille dépend aussi de ses propriétés mécaniques, optiques, et barrières (perméabilité au gaz). Ces trois propriétés sont affectées par la distribution de température de la préforme, et par conséquent, dépendent des paramètres de réglage du four infrarouge. D'autre part, nous avons supposé que la température était uniforme dans l'épaisseur de la préforme. Or, le gradient de température transversal joue un rôle majeur sur les propriétés optiques de la bouteille [VEN-1998]. Ces différentes problématiques impliquent la mise en œuvre d'un modèle rhéologique plus riche, prenant en compte l'anisotropie du comportement du PET, et capable de prédire les propriétés mécaniques de la

bouteille. Le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme pourrait alors être optimisé numériquement.

D'autre part, il serait tout à fait envisageable de réaliser l'optimisation en une seule étape. Pour cela, il suffirait de simuler successivement le chauffage de la préforme et le soufflage de la bouteille. Ainsi, il serait possible de corrélérer directement les paramètres de réglage du four IR avec la distribution d'épaisseur de la bouteille. Toutefois, le transport du champ de température depuis un maillage volume-finis (logiciel PLASTIRAD) vers un maillage éléments-finis (logiciel ABAQUS®) serait susceptible d'introduire des erreurs numériques supplémentaires, ce qui augmenterait le bruit de la fonction coût. De ce point de vue, il serait plus profitable d'implémenter un modèle de chauffage, à l'image de PLASTIRAD, directement dans le logiciel ABAQUS®. Ceci permettrait en outre de s'affranchir des nombreux problèmes de maillage liés à l'utilisation de la méthode des volumes-finis.

Enfin, nous n'avons pas abordé le problème des faibles rendements énergétiques des fours IR. Une fraction majoritaire du flux radiatif émis par les lampes IR n'est pas absorbé par la préforme, mais contribue au chauffage des parois du four. Cette chaleur est ensuite en partie évacuée par l'air insufflé par le système de ventilation. La problématique est de réduire ces pertes thermiques en optimisant la conception du four IR. Les positions respectives des lampes par rapport à la préforme sont des variables importantes à maîtriser, mais il est aussi envisageable d'optimiser la conception des lampes elles-mêmes. Deux axes d'investigations majeurs se dégagent : l'optimisation des revêtements céramiques des lampes IR, qui affectent l'efficacité énergétique des lampes, et l'optimisation de la température d'équilibre du filament, directement liée au spectre d'émission des lampes.

Bibliographie

- [ABA-2003] ABAQUS Analysis User's Manual, Version 6.4.1, Hibbitt, Karlsson, and Sorensen, Inc., Pawtucket, RI, 2003.
- [AGA-1996] J.-F. AGASSANT, P. AVENAS, J.P. SERGENT, B. VERGNES, M. VINCENT, *La mise en forme des matières plastiques*, Technique et Documentation, 1996.
- [AND-2005] S. ANDRIEU, "Étude expérimentale et numérique du chauffage infrarouge de plaques thermoplastiques pour le thermoformage", Thèse de Doctorat, ENSMP, 2005.
- [ASL-2001] F. ASLLANAJ, "Etude et analyse numérique des transferts de chaleur couplés par rayonnement et conduction dans les milieux semi-transparents : application aux milieux fibreux", Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré, Nancy, 2001.
- [BAL-1981] R.C. BALL, M. DOI, S.F. EDWARDS, M. WARNER, "Elasticity of entangled networks", *Polymer* **22** (1981), p. 1010-1018.
- [BEC-1986] J.V. BECK, "Combined function specification-regularization procedure for solution of inverse heat conduction problem", *AIAA Journal* **24** (1) (1986), p. 180-185.
- [BEN-2004] A. BENDADA, A. DERDOURI, M. LAMONTAGNE, Y. SIMARD, "Analysis of thermal contact resistance between polymer and mold in injection molding", *Applied Thermal Engineering* **24** (2004), p. 2029-2040.
- [BER-1999] V. BERROU, L. CHEVALIER, C. LINHONE, Y. MARCO, "Microstructure evolution during stretch blow molding process and the influence on mechanical strength of poly(ethylene terephthalate) bottles", *The 15th Annual Meeting of The Polymer Processing Society* ('s-Hertogenbosch, The Netherlands), 1999.
- [BIL-2003] N. BILLON, "Effet de couplage thermomécanique dans la caractérisation du comportement de polymères solides", *16^{ème} Congrès Français de Mécanique*, Nice, 1-5 septembre 2003.
- [BIL-2002] N. BILLON, E. GORLIER, "Comportement mécanique du PET amorphe au dessus de sa transition vitreuse", *Matériaux 2001*, Tours, France, 21-25 octobre 2002, CM03002. ISBN : 2-914279-08-6 (2002).
- [BOR-2009] M. BORDIVAL, F. SCHMIDT, Y. LE MAOULT, 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** (4) (2009), p. 783-793.

- [BOR-2007a] M. BORDIVAL, F. SCHMIDT, Y. LE MAOULT, V. VELAY, "Simulation of the two stages stretch-blow molding process: infrared heating and blowing modeling", *AIP Conference Proceedings* (2007), p. 519-524, ISBN: 978-0-7354-0416-8.
- [BOR-2007b] M. BORDIVAL, F. SCHMIDT, Y. LE MAOULT, "Measurement Of Thermal Contact Resistance Between The Mold And The Polymer For The Stretch-blow Molding Process", *AIP Conference Proceedings* **907** (2007), p. 1245-1250, ISBN: 978-0-7354-0414-4.
- [BUC-1995] C.P. BUCKLEY, D.C. JONES, "Glass-rubber constitutive model for amorphous polymers near the glass transition", *Polymer* **36** (1995), p. 3301-3312.
- [CHA-2007] C. CHAMPIN, "Modélisation 3D du chauffage par rayonnement infrarouge et de l'étirage soufflage de corps creux en P.E.T.", Thèse de doctorat, ENSMP, 2006.
- [CHA-2005] C. CHAMPIN, "3D Finite Element Modeling of the Blow Molding Process", *ANTEC'05* (Boston, Massachusetts), May 2005.
- [CHE-2006a] L. CHEVALIER, S. MAAMAR, Y. MARCO, "Simulation of free blowing Polyethylene Terephthalate using a thermodynamic induced crystallisation model", *International Journal of Forming Processes* **9** (2006), p. 27-59.
- [CHE-2006b] L. CHEVALIER, Y. MARCO, "Comportement en traction uniaxiale et biaxiale du polyéthylène téréphtalate au dessus de Tg : modélisation probabiliste de l'influence de la température", *Rhéologie* **9** (2006), p. 40-48.
- [CHE-2002] N. CHEVAUGEON, "Contribution à l'étude des membranes hyperélastiques en grandes déformations", Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 2002.
- [CHE-1999] B. CHERON, *Transferts Thermiques - Résumé De Cours, Problèmes Corrigés*, Ellipses Marketing, 1999.
- [CHO-2008] H.L. CHOO, P.J. MARTIN, E.M.A. HARKIN-JONES, "Measurement of Heat Transfer for Thermoforming Simulations", *International Journal of Material Forming*, published online on 5 April 2008.
- [CHU-1975] S. W. CHURCHILL, H. S. CHU, "Correlating Equations for Laminar and Turbulent Free Convection from a Vertical Plate", *International Journal of Heat and Mass Transfer* **18** (1975), p. 1323-1329.
- [COS-2008] B. COSSON, L. CHEVALIER AND J. YVONNET, "Optimization by the c-nem method of the stretch-blow molding process of a pet bottle near tg", *11th ESAFORM conference on material forming. AIP Conference Proceedings*, Published online: 18 April 2008.
- [DEL-2006] E. DELOYE, "Effet de l'architecture de chaine sur le comportement en injection soufflage de copolyesters PET – Etude expérimentale", Thèse de Doctorat, ENSMP, 2006.

- [DEL-2000] D. DELAUNAY, P. LE BOT, R. FULCHIRON, J.F. LUYE, G. REGNIER, "Nature of contact between polymer and mold in injection molding. Part I: Influence of a non-perfect thermal contact", *Polymer Engineering and Science* **40** (7) (2000), p. 1682-1691.
- [DEN-1995] A. DENIS, "Étude expérimentale et modélisation du chauffage par rayonnement infrarouge de polymères semi-cristallins : influence des centres diffusants", Thèse de Doctorat, Université de Rouen, 1995.
- [DEV-1984] A. B. DE VRIENDT, *La transmission de la chaleur Vol. 2 : Introduction au rayonnement thermique*, Gaëtien Morin Editeur, Québec, 1984.
- [DGC-2007] "Bulletin Officiel de la Concurrence, de la Consommation et de la Répression des Fraudes", N°8 bis, 26 octobre 2007.
- [DIR-1993] R. DIRRADO, A. GARCIA-REJON, "Dynamic modeling of the preform reheating stage in injection blow molding", *Plastic Rubber and Composites Processing and Applications* **20** (1993), no 5.
- [DOU-2005] G. DOUR, M. DARGUSCH, C. DAVIDSON, A. NEFA, "Development of a non-intrusive heat transfer coefficient gauge and its application to high pressure die casting Effect of the process parameters", *Journal of materials processing technology* **169** (2005), p. 223-233.
- [DUP-2005] R.B. DUPAIX, M.C. BOYCE, "Finite strain behavior of poly(ethylene terephthalate) (PET) and poly(ethylene terephthalate)-glycol (PETG)", *Polymer* **46** (2005), p. 4827-4838, no 13.
- [EDW-1986] S.F. EDWARDS, T. VILGIS, "The effect of entanglements in rubber elasticity", *Polymer* **27** (1986), p. 483-492.
- [ESS-1987] K. ESSER, E. HABERSTROH, U. HUSGEN, D. WEINAND, "Infrared radiation in the processing of plastics: precise adjustment-the key to productivity", *Advances in Polymer Technology* **7** (1987), no 2.
- [FLE-1987] R. FLETCHER, *Practical Methods of Optimization*, John Wiley and Sons, 1987.
- [FOR-1982] M. FORTIN, R. GLOWINSKI, *Méthode de Lagrangien augmenté*, Collection Méthodes Mathématiques de l'informatique, Dunod, 1982.
- [GAR-2006] D. GARCIA, T. BURRET, M. BOUTAOUS, "Procédé de thermoformage : simulation de la phase de mise en température", *Matériaux & Techniques* **94** (2006), p.355-370.
- [GAV-1996] A. GAVRUS, "Identification automatique des paramètres rhéologiques par analyse inverse", Thèse de doctorat, ENSMP, 1996.
- [GOR-2001a] E. GORLIER, "Caractérisation rhéologique et structurale d'un pet. application au procédé de bi-etirage soufflage de bouteilles", Thèse de Doctorat, ENSMP, 2001.
- [GOR-2001b] E. GORLIER, J. M. HAUDIN, N. BILLON, "Strain-induced crystallization in bulk amorphous PET under uni-axial loading", *Polymer* **42** (2001), p. 9541-9549.

- [GSE-1979] C. G'SELL, J. JONAS, "Determination of the Plastic Behaviour of Solid Polymer at Constant True Strain Rate", *Journal of Material and Science* **14** (1979), p.583-591.
- [HAL-1995] J.-L. HALARY, "Introduction à la mécanique des polymères, ch. Traitement pratique des résultats des essais de viscoélasticité", p. 169-189, C. G'Sell et J.-M. Haudin, INPL, 1995.
- [HAM-2008] A. HAMASAIID, G. DOUR, M. DARGUSCH, T. LOULOU, C. DAVIDSON, G. SAVAGE, "Heat transfer coefficient and in-cavity pressure at the casting-die interface during high-pressure die casting of the magnesium alloy AZ91D", *Metallurgical and Materials Transactions* **39A** (2008), p. 853-864.
- [HAM-2007] A. HAMASAIID, M.S. DARGUSCH, C. DAVIDSON, T. LOULOU, G. DOUR, "A Model to Predict the Heat Transfer Coefficient at the Casting-Die Interface for the High Pressure Die Casting Process", *AIP Conference Proceedings* **907** (2007), p. 1211-1216, ISBN : 978073540414407.
- [HAR-1996] K. HARTWIG, "Simulation of the stretch blow moulding process and characterisation of the relevant material behaviour", Dissertation, RWTH, Aachen, 1996.
- [HIL-1977] H.M. HILBER, T.J.R. HUGHES, R.L. TAYLOR, "Improved numerical dissipation for time integration algorithms in structural dynamics", *Earthquake Eng. And Struc. Dyn.* **5** (1977), p.283-292.
- [HMI-2006] S. HMIDA-MAAMAR, F. SCHMIDT, L. ROBERT, V. VELAY, D. MERCIER², "Identification de paramètres de comportement de membranes en polymères durant le procédé de soufflage", *Matériaux & Techniques* **94** (2006), P. 371-378.
- [HUA-2006] H.-X. HUANG, Y.-Z. LI, Y.-H. DENG, "Online real-time acquisition for transient temperature in blow molding", *Polymer Testing* **25** (2006), p. 839-845.
- [HUA-2005] H.-X. HUANG, Y.-H. DENG, Y.-F. HUANG, "Temperature profiles within reheated preform in stretch blow molding", *ANTEC'05* (Boston, Massachusetts), May 2005.
- [KIM-1985] S. L. KIM, "Effect of equilibration time on the properties of reheat blown 2L PET bottles", *Journal of Polymer Engineering* **5** (1985), p. 125-134.
- [LAR-2001] D. LAROCHE, R. DIRADDO, "Thermomechanical modeling, microstructure development and part performance in stretch blow molding", *ANTEC'01*.
- [LEB-2005] N. LEBEAL, S. PUISSANT, F. SCHMIDT, "Rheological parameters identification using in-situ experimental data of a flat die extrusion", *Journal of Materials Processing Technology* **164-165** (2005), p. 1524-1529.
- [LEB-2001] P. LEBAUDY, J. GRENET, "Heating simulation of multilayer performs", *Applied Polymer Science* **80** (2001), p. 2683-2689.

- [LEB-1989] P. LEBAUDY, "Etude et simulation de la répartition des températures dans un cylindre creux en PET soumis à un rayonnement infrarouge", Thèse de Doctorat, Université de Rouen, 1989.
- [MAH-2000] A. MAHENDRASINGAM, D. J. BLUNDELL, C. MARTIN, W. FULLER, D. H. MACKERRON, J. L. HARVIE, R. J. OLDMAN, R. C. RIEKEL, "Influence of temperature and chain orientation on the crystallization of poly(ethylene terephthalate) during fast drawing", *Polymer* **41** (2000), p. 7803-7814.
- [MAR-2005] P.J. MARTIN, C.W. TAN, K.Y. TSHAI, R. MCCOOL, G. MENARY, C.G. ARMSTRONG, E.M.A. HARKIN-JONES, "Biaxial characterisation of materials for thermoforming and blow moulding", *Plastics, rubber and composites* **34** (2005), p. 276-282.
- [MAR-2003] Y. MARCO, "Caractérisation multi-axiale du comportement et de la microstructure d'un semi-cristallin : application au cas du PET", Thèse de Doctorat, ENS Cachan, 2003.
- [MAR-1999] L. MARTIN, D. STRACOVSKY, D. LAROCHE, A. BARDETTI, R. BEN-YEDDER, R. DIRADDO, "Modeling and experimental validation of the stretch blow molding of PET", *ANTEC'99* (NY, USA), 1999.
- [MAT-1997] R.G. MATTHEWS, R.A. DUCKETT, I.M. WARD, D.P. JONES, "The biaxial drawing behaviour of poly(ethylene terephthalate)", *Polymer* **38**, (1997), p. 4795-4802.
- [MCE-1998] J.P. MCEVOY, C.G. ARMSTRONG, R.J. CRAWFORD, "Simulation of the stretch blow molding process of PET bottles", *Advances in Polymer Technology* **17** (1998), p.339-352.
- [MEN-2007] 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", *AIP Conference Proceedings* **907** (2007), p. 939-944.
- [MEN-2001] G.H. MENARY, Ph.D. Thesis, Queen's University Belfast, 2001.
- [MEN-2000] G.H. MENARY, C.G. ARMSTRONG, R.J. CRAWFORD, J.P. MCEVOY, "Modelling of poly(ethylene terephthalate) in injection stretch-blow moulding", *Plastics Rubbers and Composites* **29** (2000), p. 360-370.
- [MER-2006] D. MERCIER, "Finite element simulation of thick sheet thermoforming", Ph.D. Thesis, Lehigh University, 2006.
- [MIC-2004] W. MICHAELI, W. PAPST, "FE-analysis of the two-step stretch blow moulding process", *ANTEC'04 Tech Papers* **30**, 2004.
- [MIR-2007] H. MIR, Z. BENRABAH, F. THIBAUT, "The Use of Elasto-Visco-Plastic Material Model Coupled with Pressure-Volume Thermodynamic Relationship to Simulate the Stretch Blow Molding of Polyethylene Terephthalate", *AIP Conference Proceedings* **908** (2007), p. 331-336.
- [MOD-1993] M.F. MODEST, *Radiative Heat Transfer*, McGraw-Hill, Inc, 1993.

- [MON-2004] S. MONTEIX, Y. LE MAOULT, F. SCHMIDT, "Quantitative infrared thermography applied to blow moulding process: measurement of a heat transfer coefficient", *Quantitative InfraRed Thermography Journal*. **1** (2004).
- [MON-2001] S. MONTEIX, "Modélisation du chauffage convecto-radiatif de préformes en P.E.T. pour la réalisation de corps creux", Thèse de Doctorat, ENSMP, 2001.
- [NAR-1997] K.A. NARH, L. SRIDHAR, "Measurement and modeling of thermal contact resistance at a plastic metal interface", *ANTEC'97* (Toronto, Canada), 1997, p. 2273-2277.
- [NEL-1965] J. A. NELDER, R. MEAD, "A simplex method for function minimization", *Computer Journal* **7** (1965), no. 4, p. 308-313.
- [OZI-1994] M. N. OZISIK, *Finite Difference Methods in Heat Transfer*, CRS Press, 1994.
- [OZI-1993] M. N. OZISIK, *Heat Conduction*, 2nd edition, John Wiley & Sons, N.Y., 1993.
- [PAR-2003] H.-J. PARK, J.R. KIM, IN. SEON YOON, "Stretch Blow Molding of PET Bottle: Simulation of Blowing Process and Prediction of Bottle Properties", *ANTEC'03*, 2003, p. 859-863.
- [PET-2000] M. PETERSSON, S. STENSTROM, "Modelling of an electric IR heater at transient and steady state conditions. Part I: model and validation", *International Journal of Heat and Mass Transfert* **43** (2000), p. 1209-1222.
- [PIC-2008] M. PICARD, "Evolution de la microstructure d'un PET lors du bi-étirage soufflage - Corrélation au durcissement structural", thèse de doctorat, ENSMP, 2008.
- [PIL-2001] M. PILLET, *Les plans d'expériences par la méthode Taguchi*, 3^{ème} tirage Ed. d'Organisation, Paris, 2001.
- [PHA-2004] X.-T. PHAM, F. THIBAUT, L.-T. LIM, "Modeling and simulation of stretch blow molding of polyethylene terephthalate", *Polymer Engineering and Science* **44** (2004), p.1460-1472.
- [SCH-1995] F. SCHMIDT, "Etude expérimentale et modélisation du procédé d'injection/soufflage biorientation en cycle froid de bouteilles en P.E.T.", Thèse de Doctorat, ENSMP, 1995.
- [SCH-1998] F. M. SCHMIDT, J. F. AGASSANT, M. BELLET, "Experimental Study and Numerical Simulation of the Injection Stretch/blow Molding Process", *Polymer Engineering and Science* **38** (1998), p. 1399-1412.
- [SCH-1985] K. SCHITTKOWSKI, "NLQPL: A FORTRAN-Subroutine Solving Constrained Nonlinear Programming Problems", *Annals of Operations Research* **5** (1985), p. 485-500.
- [SES-2008] Service des Études et des Statistiques Industrielles (Sessi) du Ministère de l'Economie des Finances et de l'Industrie; "L'industrie française de l'emballage", [http://www .industrie.gouv.fr/sessi](http://www.industrie.gouv.fr/sessi), 2008.
- [SHE-1991] M. D. SHELBY, "Effects of infrared lamp temperature and other variable on the reheat rate of PET", *ANTEC'91*, 1991.

- [SRI-2000] L. SRIDHAR, WENYUE YIN, K.A. NARH, "The Effect of Shrinkage Induced Interface Gap on the Thermal Contact Resistance Between the Mold and Plastic in Injection Molding", *Journal of Injection Molding Technology* **4** (2000), p. 44-49.
- [SZE-2004] D. SZELIGA, J. GAWAD, M. PIETRZYK, "Parameters identification of material models based on the inverse analysis", *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.* **14** (2004), p. 549-556
- [TAN-2008] C.W. TAN, G.H. MENARY, Y. SALOMEIA, C.G. ARMSTRONG, M. PICARD, N. BILLON, "Modelling of the injection stretch blow moulding of pet containers via a pressure-volume-time (pv-t) thermodynamic relationship", *11th ESAFORM conference on material forming. AIP Conference Proceedings*, Published online: 18 April 2008.
- [THI-2007] F. THIBAUT, A. MALO, B. LANCTOT, R. DIRADDO, "Preform Shape and Operating Condition Optimization for the Stretch Blow Molding Process", *Polymer Engineering and Science* **47** (2007), n°3, p. 289-301.
- [TIL-1998] Y. TILLIER, "Identification par analyse inverse du comportement mécanique des polymères solides ; Application aux sollicitations multiaxiales et rapides", Thèse de doctorat, ENSMP, 1998.
- [VEN-1998] G. VENKATESWARAN, M. R. CAMERON, C. A. JABARINET, "Effects of temperature profiles through preform thickness on the properties of reheat-blown PET containers", *Advances in Polymer Technology* **17** (1998), p. 237-249.
- [VER-1997] E. VERRON, "Contribution expérimentale et numérique aux procédés de moulage par soufflage et de thermoformage", Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 1997.
- [VIS-1975] R. VISKANTA, E. E. ANDERSON, "Heat Transfer in Semitransparent Solids", *Advances in heat Transfer* **11** (1975), p. 317-441.
- [WAN-2000] S. WANG, A. MAKINOCHI, T. NAKAGAWA, "3D viscoplastic FEM simulation of a stretch blow molding process", *International Journal for Numerical Methods in Engineering* **48** (2000) p. 501-521.
- [WEL-1998] G. E. WELSH, D. J. BLUNDELL, A. H. WINDLE, "A transient liquid-crystalline phase as a precursor for crystallization in random co-polyester fibers", *Macromolecules* **31** (1998), p. 7562-7565.
- [WIL-1955] M.L. WILLIAMS, R.F. LANDEL, J.D. FERRY, "The temperature dependence of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids". *Journal of the American Chemical Society* **77** (1955), p. 3701-3707.
- [YAN-2004] Z.J. YANG, E. 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), p. 20-27.

- [YOU-2001] A. YOUSEFI, R. DIRADDI, A. BENDADA, "Simulation of the mobile preform reheat in injection stretch blow molding process", *PPS-17, The Polymer Processing Society* (Montreal, Canada), May 2001, p. 134-146.
- [YUA-2000] J.Z. YUAN, "Improving accuracy of blow molding simulation", *ANTEC'00*.
- [YU-1990] C.J. YU, J.E. SUNDERLAND, C. POLI, "Thermal contact resistance in injection molding", *Polymer Engineering and Science* **30** (24) (1990), p. 1599-1606.

Annexe A

Etablissement de l'Equation du Transfert Radiatif (ETR) [MOD-1993]

Si l'on effectue un bilan des mécanismes physiques d'interaction rayonnement-matière pour un rayonnement se propageant à travers un milieu qui absorbe, émet et diffuse, on obtient l'expression d'une équation intégral-différentielle appelée *Equation du Transfert Radiatif* (ETR).

On considère, pour l'établissement de cette équation, un faisceau de rayonnement qui se propage dans un volume élémentaire d'un milieu semi-transparent, avec une direction d'incidence $\vec{\Omega}$. Nous choisissons un volume de contrôle cylindrique de longueur ds . Le cylindre est orienté selon la direction $\vec{\Omega}$ de propagation du rayonnement. Un changement d'intensité de ce rayonnement est observé pour le parcours ds : la luminance passe d'une valeur L_λ à une valeur $L_\lambda + dL_\lambda$. La FIG. A.1 illustre les notations adoptées.

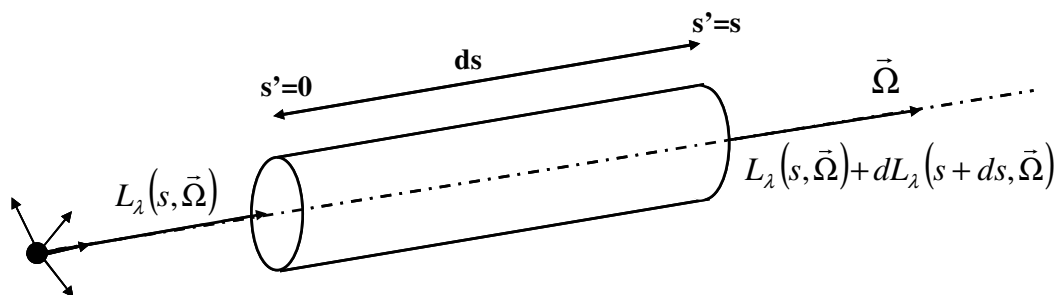


FIG. A.1 - Variation de la luminance à travers un élément de volume cylindrique

$L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega})$ représente la luminance monochromatique à la longueur d'onde λ , le long d'une trajectoire s , dans la direction $\vec{\Omega}$. Plusieurs processus expliquent la variation de la luminance dans le cylindre élémentaire :

a) Perte par absorption

Une partie du rayonnement est absorbée par le milieu. La perte due à l'absorption dans le cylindre de longueur ds est donnée par la relation suivante :

$$dL_{\lambda}(\vec{s}, \vec{\Omega}) = -\sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_{\lambda}(\vec{s}, \vec{\Omega}) \cdot ds \quad (\text{A.1})$$

où $\sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega})$ est le coefficient monochromatique d'absorption.

b) Perte par diffusion

Une fraction du rayonnement provenant de la direction Ω peut être diffusée dans toutes les autres directions. L'atténuation due à cette diffusion est donnée par :

$$dL_{\lambda}(\vec{s}, \vec{\Omega}) = -\sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_{\lambda}(\vec{s}, \vec{\Omega}) \cdot ds \quad (\text{A.2})$$

Où $\sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega})$ est le coefficient monochromatique de diffusion (s pour "scattering").

c) Gain par émission propre

Ce phénomène est lié à la température du milieu. Le renforcement par émission propre est donné par :

$$dL_{\lambda}(\vec{s}, \vec{\Omega}) = \sigma_{e\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_{\lambda}^{\circ}(T(\vec{s})) \cdot ds \quad (\text{A.3})$$

où $T(\vec{s}, t)$ est la température du milieu au point s .

d) Gain par diffusion

Le rayonnement dans la direction $\vec{\Omega}$ est renforcé par la diffusion des rayonnements provenant de toutes les autres directions de l'espace, comme l'illustre la FIG. A.2. :

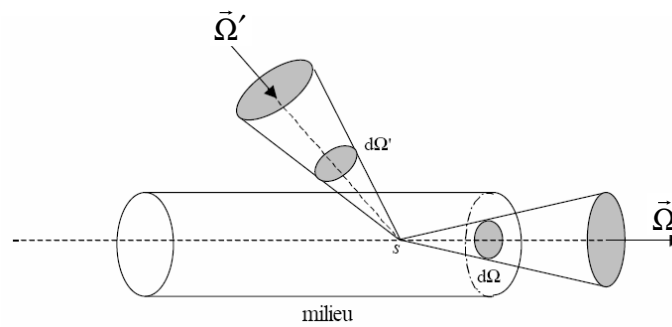


FIG. A.2 - Gain par diffusion d'un faisceau de rayonnement ([Asllanaj 2001])

On explicite le gain par diffusion en introduisant une distribution angulaire de diffusion (ou fonction de phase) P_{λ} :

$$dL_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \cdot \int_{\Omega'=4\pi} \sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega}') \cdot P_\lambda(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}') d\Omega' \cdot ds \quad (\text{A.4})$$

où le terme intégral prend en compte la diffusion des rayonnements provenant de toutes les directions de l'espace.

Bilan radiatif général

Le bilan d'énergie pour la luminance L_λ qui traverse l'élément de volume de longueur ds peut alors être écrit en sommant les contributions par émission, absorption et diffusion définies précédemment :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{variation de} \\ \text{la luminance} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{gain par} \\ \text{émission} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{renforcement} \\ \text{par diffusion} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{perte par} \\ \text{absorption} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{atténuation} \\ \text{par diffusion} \end{array} \right\}$$

En notant que: $L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) + dL_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) = L_\lambda(\vec{s} + d\vec{s}, \vec{\Omega})$, nous pouvons écrire:

$$\begin{aligned} \frac{dL_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega})}{ds} = & -(\sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega}) + \sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega})) \cdot L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) + \sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_\lambda^\circ(T(\vec{s})) \\ & + \frac{1}{4\pi} \cdot \int_{\vec{\Omega}'=4\pi} \sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega}') \cdot P_\lambda(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}') d\Omega' \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

L'équation (A.5) est une équation intégral-différentielle de transport. L'ETR est une traduction mathématique du bilan de l'énergie radiative dans le milieu. Elle représente l'évolution de la luminance monochromatique du rayonnement le long d'une trajectoire s , au cours du temps. Elle est valable en chaque point du milieu, dans l'intervalle de fréquence $\lambda + d\lambda$, à l'intérieur d'un angle solide élémentaire $d\Omega$ centré autour d'une direction $\vec{\Omega}$.

Une écriture couramment utilisée de l'ETR met en évidence un terme source d'énergie radiative monochromatique $J_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega})$ tel que :

$$\begin{aligned} \frac{dL_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega})}{ds} = & -\sigma_{e\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) + J_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) \\ J_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}) = & \sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega}) \cdot L_\lambda^\circ(T(\vec{s})) + \int_{\Omega'=4\pi} \sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega}') \cdot P_\lambda(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot L_\lambda(\vec{s}, \vec{\Omega}') d\Omega' \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

où $\sigma_{e\lambda}(\vec{\Omega}) = \sigma_{a\lambda}(\vec{\Omega}) + \sigma_{s\lambda}(\vec{\Omega})$ est le coefficient d'extinction spectral, traduisant l'atténuation du rayonnement dans le milieu. Le premier terme du membre de droite de l'équation (A.6) traduit donc l'atténuation du rayonnement, tandis que le second terme représente le renforcement du rayonnement.

Annexe B

Etat de l'art sur la simulation numérique du procédé d'injection-soufflage (Tableau non exhaustif)

Références	Loi de comportement	Modèle numérique	Remarques/Spécificité
[SCH-1995]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Johnson-Segalman ▪ Oldroyd +WLF ▪ Prise en compte du durcissement par modification de la viscosité 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Forge2[®]" ▪ 2D Axisym. ▪ Triangles P2-P0 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Calcul automatique de la pression de soufflage
[MCE-1998]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle de Buckley 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus[®]" ▪ 2D Axisym. ▪ Membranes 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Préforme isotherme
[MAR-1999]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ogden + WLF 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus[®]" ▪ 2D Axisym. ▪ Membranes 	
[WAN-2000]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ G'Sell modifiée ▪ Thermodépendance polynomiale 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "PLOW3D[®]" ▪ 3D 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Préforme isotherme dans l'épaisseur
[YUA-2000]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Mooney-Rivlin 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 2D Axisym. ▪ Coques 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Préforme isotherme
[LAR-2001]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ogden + WLF ▪ Modèle de Nakamara 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 2D Axisym. ▪ Membranes multicouches 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prédiction du taux de cristallinité et de l'orientation moléculaire
[MEN-2001]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ogden ▪ Modèle de Buckley 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus[®]" ▪ 2D Axisym ▪ Membranes ou quadrangles 	

[PAR-2003]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Loi K-BKZ + WLF 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prédiction des propriétés mécaniques de la bouteille
[PHA-2004]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle Vico-Hyperélastique 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 2D Axisym. ▪ Membranes 	
[YAN-2004]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle de Buckley 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus®" ▪ 2D Axisym. ▪ Quadrangle 4 nœuds linéaires 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Préforme isotherme dans l'épaisseur
[CHE-2006]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ G'Sell modifiée ▪ Consistance dépendante du taux de cristallinité 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 2D Axisym. ▪ Membranes 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Prédiction du taux de cristallinité ▪ Préforme isotherme
[BOR-2007a]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ G'Sell modifiée + WLF 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus®" ▪ 2D Axisym ▪ Coques 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Couplage simulations chauffage/soufflage ▪ Calcul automatique de la pression de soufflage ▪ Couplage avec un algorithme d'optimisation
[CHA-2007]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Mooney-Rivlin ▪ G'Sell modifiée + Arrhénius 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Forge3®" ▪ 3D 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Couplage simulations chauffage/soufflage
[MIR-2007]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ G'Sell-Jonas 3D + Arrhénius 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 3D 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Calcul automatique de la pression de soufflage
[THI-2007]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle Vico-Hyperélastique 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF 3D 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Couplage avec un algorithme d'optimisation
[COS-2008]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle viscoplastique avec viscosité orthotrope 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ C-NEM 2D Axisym. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Modèle rhéologique orthotrope ▪ Soufflage libre
[TAN-2008]	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Buckley-Jones-Adams 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ EF "Abaqus®" ▪ 2D Axisym. ▪ Quadrangle 4 nœuds linéaires 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Calcul automatique de la pression de soufflage

Annexe C

Soufflage d'une membrane hémisphérique obéissant à une loi viscoplastique avec durcissement

Une membrane circulaire de diamètre initial $R_0 = 20$ mm et d'épaisseur initiale $e_0 = 2$ mm est gonflée par application d'une pression sur sa face inférieure (FIG. C.1). Si l'on néglige les effets de bord (la membrane doit être fixée sur son pourtour), le gonflage peut-être supposé sphérique au pôle de la bulle.

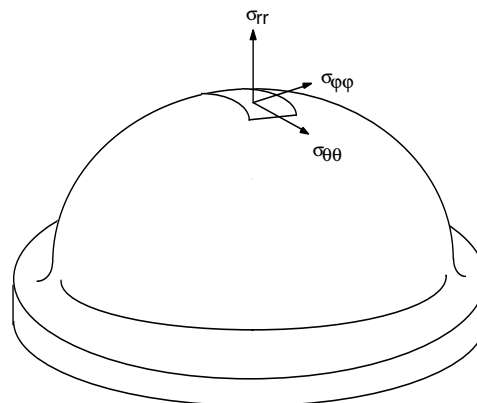


FIG. C.1 – Soufflage d'une bulle sphérique (au pôle)

En adoptant des coordonnées sphériques, on montre que l'élongation équi-biaxial d'une coque mince, i.e. satisfaisant $(\delta(t) = e(t)/R(t) \ll 1)$, conduit au tenseur des contraintes de Cauchy moyennées suivant (voir démonstration à la fin de l'annexe) :

$$\sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\theta\theta} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{\theta\theta} \end{bmatrix}_{(r,\theta,\varphi)} \quad \text{avec} \quad \langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = \frac{\Delta P R(t)}{2e(t)} \quad (\text{C.1})$$

où ΔP désigne la surpression interne, $R(t)$ et $e(t)$ désignent respectivement le rayon interne et l'épaisseur à l'instant t . Nous supposons que le polymère adopte un comportement de type viscoplastique avec durcissement dont la loi constitutive s'exprime:

$$\sigma = -pI + 2k_0 \exp(B\bar{\mathcal{E}})^{m-1} \dot{\mathcal{E}} \quad (\text{C.2})$$

où p désigne la pression hydrostatique, k_0 la consistance, et B le coefficient de durcissement. Nous souhaitons exprimer les composantes moyennées du tenseur des vitesses de déformation $\dot{\mathcal{E}}$. Pour cela, exprimons la conservation du volume d'une demi-sphère creuse :

$$2\pi \frac{(R+e)^3 - R^3}{3} = 2\pi \frac{(R_0 + e_0)^3 - R_0^3}{3} \quad (\text{C.3})$$

Que nous pouvons agencer de la manière suivante :

$$\left[(1 + \delta)^3 - 1 \right] R^3 = \left[(1 + \delta_0)^3 - 1 \right] R_0^3 \quad (\text{C.4})$$

En réalisant un développement limité au premier ordre du terme cubique, nous obtenons :

$$(1 + \delta)^3 \cong 1 + 3\delta \quad (\text{C.5})$$

Finalement la conservation du volume en hypothèse coque mince se simplifie en :

$$e(t)R(t)^2 = e_0R_0^2 \quad (\text{C.6})$$

Pour obtenir les composantes du tenseur des vitesses de déformation, il suffit de dériver (C.6) par rapport au temps, soit :

$$R^2 \frac{de}{dt} + 2Re \frac{dR}{dt} = 0 \quad (\text{C.7})$$

Soit encore :

$$\frac{1}{e} \frac{de}{dt} + \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} = 0 \quad (\text{C.8})$$

De part la symétrie du problème, nous pouvons déduire immédiatement que :

$$\langle \dot{\epsilon}_{rr} \rangle = \frac{1}{e} \frac{de}{dt} = -\frac{2}{R} \frac{dR}{dt} \quad (\text{C.9})$$

$$\langle \dot{\epsilon}_{\theta\theta} \rangle = \langle \dot{\epsilon}_{\varphi\varphi} \rangle = \frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \quad (\text{C.10})$$

La relation (C.9) traduit en fait l'incompressibilité puisque :

$$\langle \dot{\epsilon}_{rr} \rangle + \langle \dot{\epsilon}_{\theta\theta} \rangle + \langle \dot{\epsilon}_{\varphi\varphi} \rangle = 0 \Rightarrow \text{Tr}(\langle \dot{\epsilon} \rangle) = 0 \quad (\text{C.11})$$

Nous pouvons alors calculer la vitesse de déformation équivalente moyennée, définie par :

$$\langle \dot{\bar{\epsilon}} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3} \sum_{i,j} \langle \dot{\epsilon}_{ij} \rangle^2} \quad (\text{C.12})$$

Nous obtenons :

$$\langle \dot{\bar{\epsilon}} \rangle = \sqrt{\frac{4}{R^2} \left(\frac{dR}{dt} \right)^2} = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} \quad (\text{C.13})$$

Nous pouvons aussi calculer la déformation équivalente moyennée :

$$\langle \bar{\epsilon} \rangle = \int_0^t \langle \dot{\bar{\epsilon}} \rangle dt = \int_{R_0}^{R(t)} 2 \frac{dR}{R} = \ln \left(\frac{R(t)}{R_0} \right)^2 \quad (\text{C.14})$$

Exprimons à présent les composantes du tenseur des contraintes de Cauchy à partir de la loi de comportement (C.2) :

$$\langle \sigma_{rr} \rangle = -p - 2^{m+1} (\sqrt{3})^{m-1} k_0 \left(\frac{R(t)}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m \quad (\text{C.15})$$

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = -p + 2^m (\sqrt{3})^{m-1} k_0 \left(\frac{R(t)}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m \quad (\text{C.16})$$

D'après l'hypothèse coque mince, nous avons supposé que :

$$\langle \sigma_{rr} \rangle = 0 \Rightarrow -p = 2^{m+1} (\sqrt{3})^{m-1} k_0 \left(\frac{R(t)}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m \quad (\text{C.17})$$

Soit en remplaçant dans (C.16) :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = 3^{\frac{m+1}{2}} \times 2^m k_0 \left(\frac{R(t)}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m \quad (\text{C.18})$$

En égalant avec (C.1), nous trouvons :

$$3^{\frac{m+1}{2}} \times 2^m k_0 \left(\frac{R}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m = \frac{\Delta P R}{2e} \quad (\text{C.19})$$

En utilisant la conservation du volume (C.6), il est possible d'exprimer l'épaisseur en fonction du rayon interne :

$$e = \frac{e_0 R_0^2}{R^2} \quad (\text{C.20})$$

Soit dans (C.19) :

$$3^{\frac{m+1}{2}} \times 2^m k_0 \left(\frac{R}{R_0} \right)^{2B} \left(\frac{1}{R} \frac{dR}{dt} \right)^m = \frac{\Delta P R^3}{2e_0 R_0^2} \quad (\text{C.21})$$

Après réagencement :

$$\frac{dR}{R^{\frac{3-2B}{m}+1}} = \frac{\Delta P^{\frac{1}{m}}}{\left(2^{m+1} 3^{\frac{m+1}{2}} k_0 e_0 R_0^{2(1-B)} \right)^{\frac{1}{m}}} dt \quad (\text{C.22})$$

Enfin intégrons entre $t' = 0$ et $t' = t$ en supposant que la surpression est constante :

$$\frac{R}{R_0} = \frac{1}{\left(1 - \frac{3-2B}{2m(\sqrt{3})^{\frac{1}{m}+1}} \left(\frac{\Delta P R_0}{2k_0 e_0} \right)^{\frac{1}{m}} t \right)^{\frac{m}{3-2B}}} \quad (\text{C.23})$$

Nous pouvons définir un temps de soufflage "Newtonien" comme suit :

$$\tau = \frac{2k_0 e_0}{\Delta P R_0} \quad (\text{C.24})$$

La relation (C.23) devient :

$$\frac{R}{R_0} = \left(1 - \frac{3-2B}{2m(\sqrt{3})^{\frac{1}{m+1}}} \frac{t}{\tau^m} \right)^{\frac{-m}{3-2B}} \quad (\text{C.25})$$

Soulignons que cette relation n'a de sens que pour B différent de $3/2$, et pour un dénominateur non nul c'est à dire pour :

$$t \neq \frac{2m\tau^{\frac{1}{m}}(\sqrt{3})^{\frac{1}{m+1}}}{3-2B} \quad (\text{C.26})$$

Etablissement du tenseur des contraintes de Cauchy moyennées

En faisant l'hypothèse de symétrie sphérique ($\sigma_{\theta\theta} = \sigma_{\varphi\varphi}$) et en négligeant les termes de cisaillement (déformation purement élongationnel), l'équation d'équilibre statique suivant r s'exprime :

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{2(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})}{r} = 0 \quad (\text{C.27})$$

Soit encore en réorganisant les termes :

$$2\sigma_{\theta\theta} = \frac{\partial(r^2\sigma_{rr})}{\partial r} \quad (\text{C.28})$$

Intégrons cette équation suivant r entre $r = R$ et $r = R + e$:

$$\int_R^{R+e} 2\sigma_{\theta\theta} r dr = \left[r^2 \sigma_{rr} \right]_{r=R}^{r=R+e} \quad (\text{C.29})$$

Nous appliquons ensuite les conditions aux limites en pression, lesquelles s'expriment :

$$\sigma_{rr}(r = R) = -P_i \quad (\text{C.30})$$

$$\sigma_{rr}(r = R + e) = -P_a \quad (\text{C.31})$$

où P_i désigne la pression interne imposée, et P_a la pression de l'air. En remplaçant dans (C.29), nous obtenons :

$$\int_R^{R+e} 2\sigma_{\theta\theta} r dr = P_i R^2 - P_a (R+e)^2 \quad (\text{C.32})$$

Définissons ensuite la contrainte circonférentielle moyenne $\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle$ comme suit :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = \frac{1}{\pi[(R+e)^2 - R^2]} \int_R^{R+e} 2\pi\sigma_{\theta\theta} r dr \quad (\text{C.33})$$

La relation (C.32) devient :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = \frac{P_i R^2 - P_a (R+e)^2}{(R+e)^2 - R^2} \quad (\text{C.34})$$

Appliquons à présent l'hypothèse de coque mince. Celle-ci implique :

$$\delta(t) = \frac{e(t)}{R(t)} \ll 1 \quad (\text{C.35})$$

La relation (C.34) peut alors s'écrire sous la forme :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle = \frac{P_i - P_a (1 + \delta)^2}{(1 + \delta)^2 - 1} \quad (\text{C.36})$$

En réalisant le développement limité au premier ordre suivant :

$$(1 + \delta)^2 \cong 1 + 2\delta \quad (\text{C.37})$$

Par substitution dans l'équation (C.36) :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle \cong \frac{P_i - P_a (1 + 2\delta)}{2\delta} = \frac{\Delta P}{2\delta} - P_a \quad (\text{C.38})$$

où ΔP désigne la surpression interne. Cette équation est équivalente à :

$$\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle \cong \frac{\Delta P R(t)}{2e(t)} - P_a \quad (\text{C.39})$$

En négligeant la pression atmosphérique, nous retrouvons la relation (C.1). En ce qui concerne la contrainte radiale σ_r , nous savons que :

$$|\sigma_{rr} + P_a| \leq \Delta P \quad (\text{C.40})$$

Soit encore en divisant par $\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle + P_a$:

$$\frac{|\sigma_{rr} + P_a|}{\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle + P_a} \leq \frac{2}{\delta(t)} \quad (\text{C.41})$$

Finalement nous démontrons que :

$$\frac{|\sigma_{rr} + P_a|}{\langle \sigma_{\theta\theta} \rangle + P_a} \ll 1 \quad \text{soit} \quad |\sigma_{rr}| \ll \langle \sigma_{\theta\theta} \rangle \quad (\text{C.42})$$

Ce qui justifie l'expression du tenseur des contraintes (C.1).

Annexe D

Etude de sensibilité : influence des coefficients d'échange convectif sur la distribution de température calculée avec PLASTIRAD

L'objectif de cette étude est de mettre en évidence l'influence des coefficients d'échange convectifs sur la température calculée numériquement avec le logiciel PLASTIRAD. La configuration adoptée pour les simulations est présentée dans le paragraphe 4.3.1. Le pourcentage de la puissance nominale des lampes IR est fixé à 35%. Les deux coefficients d'échanges sont les suivants :

- Le coefficient h_f , correspondant à la convection forcée générée par le système de ventilation. Ce coefficient n'intervient que durant la phase de chauffage (22.4 s).
- Le coefficient d'échange naturel h_n correspondant au refroidissement de la préforme au contact de l'air ambiant lors de son acheminement vers le module de soufflage (durée du maintien : 3s).

Pour réaliser cette étude, nous adoptons un plan d'expérience Taguchi $L_4(2^2)$ à deux niveaux [PIL-2001]. Nous souhaitons calculer l'effet d'une augmentation de 30% de la valeur de ces coefficients d'échanges. Les valeurs adoptées sont reportées dans la TAB. C.1.

h_{f1} ($W.m^{-2}.K^{-1}$)	h_{f2} ($W.m^{-2}.K^{-1}$)	h_{n1} ($W.m^{-2}.K^{-1}$)	h_{n2} ($W.m^{-2}.K^{-1}$)
30	40	8	10.7

TAB. C.1 - Valeurs adoptées pour l'étude de sensibilité

Les effets calculés portent sur les deux critères suivants :

- La température maximale calculée sur la surface externe de la préforme.
- La différence de température maximale entre les parois externe et interne de la préforme (représentative du gradient de température dans l'épaisseur).

La FIG. D.1 illustre les résultats de cette étude.

✓ **Effet sur la température maximale calculée :**

La principale information apportée par cette étude est que, dans la configuration adoptée, les deux coefficients d'échange ont un effet relativement faible sur la température maximale calculée. En effet, une augmentation de 30% des coefficients d'échange induit une diminution d'environ 3 °C de la température maximale calculée, soit une diminution inférieure à 2.5%. En toute logique, l'effet du coefficient d'échange h_f est plus important que celui du coefficient d'échange h_n , étant donné que le temps de chauffage est sept fois supérieur au temps de maintien.

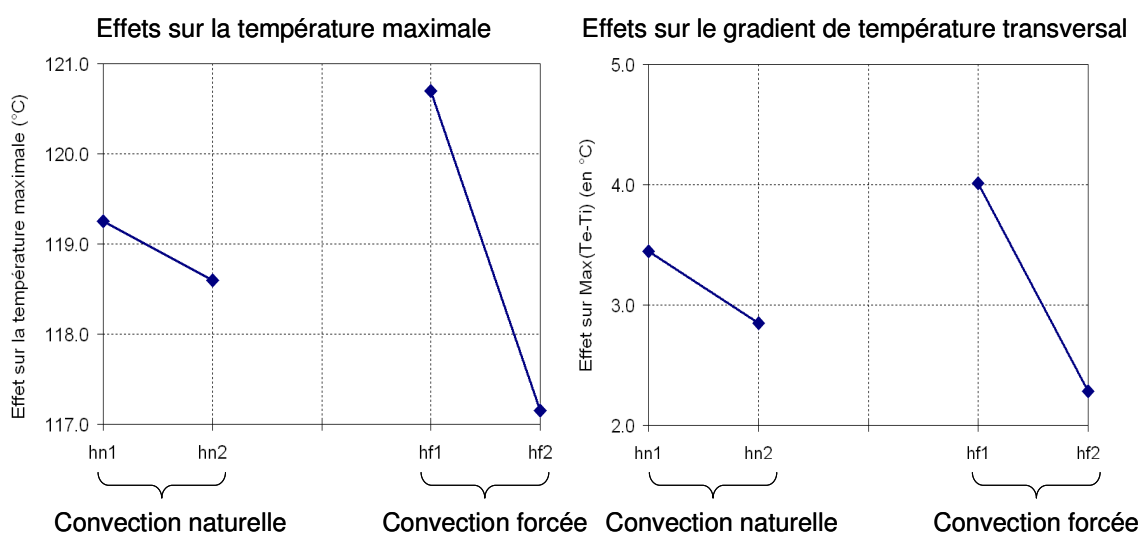


FIG. D.1 - Effets des coefficients d'échange convectif sur la distribution de température calculée par PLASTIRAD

✓ **Effet sur la différence de température maximale entre la paroi externe et la paroi interne de la préforme :**

La seconde information apportée par cette analyse de sensibilité est que le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme est fortement affecté par les deux coefficients d'échange. En effet, une augmentation de 30% des coefficients d'échange induit une diminution d'environ 2.5 °C de la différence de température dans l'épaisseur, soit une diminution supérieure à 50% du gradient de température.

En conclusion de cette étude, nous retiendrons qu'il est crucial de mesurer (ou de calculer) précisément les coefficients d'échange convectif si l'on souhaite optimiser le gradient de température dans l'épaisseur de la préforme. En revanche, si l'optimisation ne porte que sur la distribution de température externe de la préforme, une erreur de 30% commise sur la valeur des coefficients d'échange n'aurait qu'un impact mineur sur les résultats de l'optimisation.

RÉSUMÉ :

Lors de la fabrication d'une bouteille par injection-soufflage, le conditionnement thermique de la préforme joue un rôle essentiel. Nous proposons une procédure d'optimisation numérique permettant de calculer automatiquement les paramètres de réglage du four infrarouge.

Dans un premier temps, l'algorithme d'optimisation de Nelder-Mead est couplé avec des simulations éléments finis de l'étape de soufflage, réalisées avec ABAQUS®. L'objectif est de calculer la distribution de température optimale de la préforme, permettant d'uniformiser l'épaisseur de la bouteille. Dans un second temps, un algorithme de programmation quadratique séquentielle est couplé avec un modèle numérique de chauffage infrarouge 3D développé au laboratoire. Cette méthode permet de calculer les paramètres optimaux pour le réglage du four. Des mesures expérimentales réalisées sur une machine de soufflage semi-industrielle ont permis de valider qualitativement notre approche pour une bouteille de géométrie simple.

Les propriétés radiatives du PET sont mesurées par spectrométrie infrarouge. Ces mesures sont exploitées pour calculer l'absorption spectrale du rayonnement. Le modèle de chauffage est validé à l'aide de mesures thermographiques. Un capteur a été développé pour mesurer la résistance thermique de contact entre le polymère et le moule. Le débit d'air injecté dans la préforme a été mesuré, puis appliqué en tant de donnée d'entrée. La pression de soufflage est alors automatiquement calculée à chaque itération par un modèle thermodynamique. Les cinématiques de mise en forme, ainsi que les distributions d'épaisseurs calculées par le modèle sont conformes à celles mesurées sur un pilote de laboratoire.

Mots clefs : Injection-soufflage, Modélisation du chauffage infrarouge, Simulations éléments finis, Optimisation numérique

ABSTRACT :

During a stretch-blow-moulding cycle, the heat conditioning of the preform is a critical step. We propose an optimisation method allowing to automatically compute the best set of process parameters for the infrared oven.

Firstly, we couple the Nelder-Mead optimisation algorithm with finite-element simulations of the blowing step performed using ABAQUS®. The goal is to calculate the optimal temperature distribution inside the preform, in order to provide a bottle with a uniform thickness. Secondly, we couple a sequential quadratic programming method with an in-lab software devoted to the 3D simulation of the infrared heating. This method aims to calculate the best set of parameters for the infrared oven. Numerical results of the optimisation have been qualitatively validated by comparison with experimental measurements performed using a semi-industrial blowing machine and a simple-design bottle.

The radiative properties of PET are measured using an infrared spectrometer. These properties are used to calculate the spectral radiative absorption of PET. Heating simulations are validated with temperature measurements performed with an infrared camera. We also have developed a sensor in order to measure the thermal contact resistance between the polymer and the mould. In addition, the air flow rate was measured inside the preform, and applied as an input parameter. Then, the air pressure is automatically computed using a thermodynamic model. Experimental measurements, performed on an in-lab blowing machine, are used to validate the blowing kinematics and the thickness distribution of the bottle predicted by the simulations.

Key words: Stretch-blow-moulding, Infrared heating modelling, Finite element simulations, Numerical optimization