

N° d'ordre : 3253

THESE

présentée à

L'UNIVERSITE BORDEAUX I

Ecole Doctorale DE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGENIEUR

par Cyril PUJOS

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

Spécialité : Mécanique

**Estimation de la rhéologie d'un polymère dans une filière
d'extrusion
Simulation d'écoulement avec transferts thermiques et
Inversion de mesures**

Soutenue le 30 novembre 2006

Thèse dirigée par
Guy DEFAYE, Professeur, ENSCPB, Bordeaux
Yvon JARNY, Professeur, ISITEM, Nantes

Devant la commission d'examen formée de :

<i>Président</i>	G. Régnier	Professeur, ENSAM PARIS, Paris
<i>Rapporteurs:</i>	D. Maillet	Professeur, INPL, Nancy
	M. Vincent	Directeur de Recherche, Ecole des mines de Paris, Sophia Antipolis
<i>Examineurs:</i>	J.C. Batsale	Professeur, ENSAM, Bordeaux
	N. Régnier	Maître de Conférences, ENSCPB, Bordeaux
	P. Mousseau	Maître de Conférences, IUT Nantes, Nantes

Remerciements

Une thèse, ça commence avec un laboratoire d'accueil. La mienne a commencé au MASTER, dont Eric Arquis était le directeur. Mais dès le 1^{er} janvier 2004, soit trois mois après le début de ce travail, la fusion du MASTER avec le LEPT m'intégrait au sein du TREFLE, dont le nouveau directeur était Jean-Rodolphe Puiggali. Février 2006, ce dernier quitte ses fonctions directoriales du TREFLE pour la direction des Etudes de Bordeaux I, et Eric Arquis lui succède. Je remercie donc les deux pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire et m'avoir donné l'occasion d'y réaliser mes travaux.

Une thèse, c'est aussi un sujet et une équipe d'encadrement. Dans mon cas, deux directeurs de thèse : Guy Defaye, le directeur de thèse de tous les jours et Yvon Jarny, l'expert nantais en méthodes inverses. Mais il ne faudrait pas oublier Nicolas Régnier, toujours présent et dont l'aide à la rédaction (d'articles de congrès et de la thèse) a été maintes fois utile (Attends de voir ce qui nous attend pour janvier !!!) et Pierre Mousseau, sans qui les manip expérimentales à l'IUT de Nantes n'auraient été que chimères. C'est avec beaucoup de plaisir que j'ai travaillé avec chacun d'eux, formant une équipe complémentaire et manifestement efficace. Quelque soit mon avenir dans le monde de la recherche (j'espère bien sûr qu'il sera long et glorieux...), j'espère pouvoir continuer à travailler avec eux.

Je souhaite également remercier tous les membres de mon jury de thèse : M. Gilles Régnier, pour sa présidence cordiale, et ses remarques judicieuses sur la compressibilité des polymères, MM. Denis Maillet et Michel Vincent, pour avoir acceptés d'être rapporteurs de ma thèse et pour leurs suggestions extrêmement intéressantes afin d'aller encore plus loin dans ce champ de recherche. Je remercie également Jean-Christophe Batsale, invité de la dernière minute, qui a accepté de se joindre à nous, malgré une thèse à Montpellier la veille de ma soutenance. En est sorti un projet expérimental que j'ai grande hâte de creuser.

Je remercie tous les membres du laboratoire, en particulier ceux que j'ai embêtés avec mes questions tordues. Je commence bien évidemment par Eric GeorGIN : nous avons partagé le même bureau pendant 3 ans, et ce fut une cohabitation joyeuse, agréable et extrêmement enrichissante. J'adresse une mention spéciale à Serge Laugier, Jean Toutain et Cédric Le Bot avec qui j'ai partagé un bon nombre d'heures de TP. Merci aussi à Stéphane Glockner pour avoir relu la partie de cette thèse dédiée à Aquilon et m'avoir permis de déjouer de nombreux problèmes de programmation. Merci à tous les doctorants (et à ceux qui sont devenus docteurs) pour leur bonne humeur et les bons moments passés ensemble, même si leur situation géographique les a rendus trop rares (c'est loin le 1^{er} étage...). Parmi les derniers venus, merci à Stéphane Longelin, post-doc du 2^{ième} étage, qui m'a aidé à répéter ma thèse et à réparer mon vélo.

Je voudrais également remercier Rémi Deterre et Alain Sarda de l'IUT de Nantes pour leur expertise bien sûr, mais surtout pour la gentillesse de leur accueil et les échanges que nous avons pu avoir. Ca a été un plaisir de travailler avec vous. J'espère bien en avoir encore l'occasion.

Je remercie également le service informatique de l'ENSCP : Sandrine Cabos, Alain Taillacot, Baptiste Lagardère. Ils ont plus que largement contribué à rendre mes trois ans de thèse

agréables de par leur bonne humeur, leur gentillesse et leur volonté à rendre service. Etre au 2^{ème} étage peut présenter des inconvénients, je ne ferais pas l'échange si on m'en faisait la proposition.

Je souhaite également remercier le personnel de CPB pour les échanges de tous les jours et les multiples services rendus. Je ne me risquerai pas à donner des noms : je suis bien trop sûr d'en oublier, mais merci à tous.

J'ai eu également la chance de pouvoir encadrer de nombreux TP au cours de ces 3 ans et je voudrais remercier les étudiants avec qui ça s'est très bien passé dans l'ensemble. Une mention spéciale au club jdr (jeux de rôles bien sûr), club dont j'ai vu la naissance, et qui continue aujourd'hui à connaître un réel succès. Les parties du samedi ont été une bonne distraction aux travaux de thèse et ont permis aux idées de décanter dans la bonne humeur. Je remercie aussi le club journal qui a toujours publié mes articles.

Dans la même veine, je remercie les gens du Zanchin et du club de karaté de la Fac.

Enfin, last but non least, je remercie ma famille qui m'a toujours soutenu dans cette voie et à qui je n'ai pas toujours accordé tout le temps qu'elle méritait (« j'ai trop de travail »).

Merci encore à tous.

Cyril PUJOS

Résumé

A l'ère du polymère, les procédés industriels de mise en forme se doivent d'être en amélioration constante. Toutefois le coût prohibitif des appareils limite l'investigation expérimentale. On se tourne alors vers la simulation numérique pour optimiser les conditions expérimentales. Mais la simulation numérique est dépendante des données du modèle. Or certains paramètres sont mal connus.

L'objectif de cette thèse est la mise en place d'une méthode d'estimation de rhéologie à partir de mesures de débits et de températures. Le dispositif expérimental est une filière d'extrusion instrumentée, déjà utilisée pour déterminer le profil thermique en entrée de la filière. Arguant du fait que les nombreux modèles rhéologiques existants sont différemment adaptés en fonction des polymères considérés, nous avons opté pour un modèle original de rhéologie. Ce modèle, outre le fait de ne pas avoir de forme mathématique imposée, n'a que des paramètres du même ordre de grandeur, ce qui simplifie l'estimation de mesures par méthode inverse. La méthode inverse est une méthode de minimisation appliquée à un critère d'écart quadratique entre les variables calculées et les grandeurs mesurées, sous la contrainte des équations de l'énergie et de Navier-Stokes. Elle s'appuie sur la formulation du Lagrangien. Les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes sont calculés par la résolution des équations adjointes. Un problème de sensibilité complémentaire permet la détermination de la profondeur de descente. La décroissance de la viscosité lorsque le taux de cisaillement augmente, a été prise en compte dans la régularisation. Pour finir, la méthode inverse a été insérée dans le code volumes finis Aquilon, développé au laboratoire TREFLE.

La filière ayant déjà été instrumentée pour une thèse précédente, nous avons surtout développé le protocole expérimental et ajouté une mesure de masse en fonction du temps afin de remonter aux débits. De nouvelles mesures ont été faites pour alimenter la méthode inverse. Celle-ci a au préalable été testée sur des cas purement numérique. Les différents tests nous ont amené à ne pas imposer un modèle rhéologique de la littérature. Le nombre de paramètres possibles à inverser dépend du nombre d'expériences considérées. Une étude de sensibilité est menée pour évaluer la précision de l'estimation et ses limites. Enfin une confrontation expérimentale est réalisée avec la comparaison entre les mesures rhéologiques et l'estimation par inversion de mesures.

Comme beaucoup de problèmes mal posés, la sensibilité au bruit de mesure nuit considérablement à l'estimation. De plus, des fuites thermiques importantes au niveau de la connectique des thermocouples sur la filière génèrent de grosses difficultés pour l'inversion. Pourtant en utilisant les mesures de pression et de débit observées lors du fonctionnement de la filière, on peut estimer des conditions initiales de la technique inverse améliorant considérablement la convergence et la qualité du résultat final.

En définitive, sur une filière mieux isolée, la méthode développée permet d'obtenir une connaissance du comportement rhéologique précise, sans l'hypothèse d'isothermie habituellement faite pour les mesures rhéologiques expérimentales. Elle génère un modèle rhéologique adapté au code de simulation numérique du point de vue de l'écoulement et de la

thermique. Enfin elle ouvre le chemin pour de nombreuses applications notamment dans le domaine de l'injection.

Mots-Clefs :

Écoulement, Filière d'extrusion, Méthode de l'adjoint, Polymère, Problème inverse, Rhéologie, Transferts thermiques

Abstract

At polymer era, industrial processes of polymer shaping have to be continually improved. Yet experimental investigation is limited by apparatus costs. Numerical simulation appears as the solution to optimize operating conditions, but it depends strongly on model data. And some parameters are badly known.

The aim of this study is the development of a method of rheological estimation from temperature and flow measurements. An instrumented extrusion die, which was built in order to estimate inlet thermal profile, is used to obtain experimental data. Although numerous rheological models exist, no one describes each polymer rheological behavior. That is the reason why an original table-like model has been chosen. This model presents two major advantages: it has no imposed mathematical form and each parameter has the same order of magnitude. The inverse method is a minimization method of a criterion, which is the quadratic norm of the difference between calculated values of flow and temperatures and experimental ones. The minimization is done under the energy and Navier-Stokes equations constraints. The minimization climbs on the Lagrangian formula. Lagrangian factors are calculated thanks to the adjoint equations. A sensitivity problem allows to determine the descent depth. The decrease of the viscosity when shear rate increases, is taken in account into regularization. Eventually the inverse method is programmed into the finite volume code AQUILON, which is developed in TREFLE laboratory.

Since the die was instrumented for a former study, the experimental protocol has been developed and completed by mass measurements, from which flow can be deduced. New measurements have been done in order to feed the inverse method, which was first tested with numerical case. A sensitivity study allows to evaluate the accuracy of the method and its limits. Eventually the method is applied to experimental data, and a comparison is done between estimated rheology by measurements inversion and rheology obtained from traditional measurements (e.g. with rheometers).

As many ill-posed problems, the measurement noise affects badly the estimation. Furthermore thermal losses make the thermal model inaccurate. Yet by choosing a good first guess from the experimental flows and pressures for the rheology, convergence may be really improved.

To conclude, with a best insulated die, the developed method allows to obtain an accurate knowledge of the rheological behavior, without usual hypothesis of isotherm polymer. The method calculates a rheological model adapted to the numerical simulation code, giving good agreement with experiment for flow and thermal phenomena. In this way, it opens a large door to numerous applications, as for example in injection field.

Key words :

Adjoint method, Extrusion die, Flow, Inverse problem, Polymer, Rhéology, Thermal transfers

Table des Matières

1 Introduction	15
1.1 Introduction	15
1.2 Vocabulaire et rappels sur les polymères	16
1.2.1 <i>Qu'est-ce qu'un polymère ?</i>	16
1.2.2 <i>Quelques propriétés et caractéristiques</i>	17
1.2.2.1 Distribution et représentation statistique	17
1.2.2.2 Modules et viscoélasticité	18
1.2.2.3 Rhéologie	19
1.2.2.3.1 Variation de la viscosité avec le cisaillement	20
1.2.2.3.1.1 Loi Ostwald – de Waele	20
1.2.2.3.1.2 Loi de Cross	21
1.2.2.3.1.3 Loi de Carreau-Yasuda	21
1.2.2.3.2 Variation de la viscosité avec la température	21
1.2.2.3.2.1 Loi de Williams, Landel et Ferry (WLF)	21
1.2.2.3.2.2 Loi d'Arrhénius	22
1.2.2.3.3 Variation de la viscosité en fonction du cisaillement et de la température couplés	23
1.2.2.3.4 Principe d'équivalence temps-température	23
1.2.2.3.5 Variation de la viscosité en fonction de la pression	23
1.2.3 <i>Problème de la mesure</i>	24
1.3 L'extrusion en deux mots	25
1.3.1 <i>Le procédé industriel</i>	25
1.3.2 <i>Applications concrètes</i>	26
1.3.3 <i>Notion de filière</i>	26
1.3.4 <i>Conclusion</i>	27
1.4 Objet de l'étude et annonce du plan	27
2 L'expérimental.....	29
2.1 Introduction	29
2.2 Structure de la filière	30
2.2.1 <i>Idées de base</i>	30
2.2.2 <i>Filière rectangulaire</i>	30
2.2.3 <i>Réalisation mécanique</i>	30
2.3 Instrumentation	33
2.3.1 <i>Les capteurs de la filière</i>	33
2.3.2 <i>Les thermocouples</i>	34
2.3.2.1 <i>Les thermocouples à 1 mm de l'interface acier/canal d'extrusion</i>	34

2.3.2.2	Les thermocouples aux périphéries supérieures et inférieures.....	34
2.3.2.3	Les thermocouples en entrée de filière.....	35
2.3.2.4	Les thermocouples en sortie de filière.....	36
2.3.2.5	La connectique des thermocouples	36
2.3.2.6	Soudure et positions réelles des thermocouples	36
2.3.3	Les capteurs de pression.....	37
2.4	Propriétés physiques des éléments de la filière	37
2.5	Caractérisation des polymères étudiés.....	38
2.5.1	Mesures de masses volumiques	38
2.5.2	Mesures de propriétés thermiques.....	40
2.5.2.1	Mesures de la conductivité thermique.....	40
2.5.2.2	Mesures de la capacité calorifique	41
2.5.3	Rhéologie	43
2.5.3.1	Rhéomètre capillaire	43
2.5.3.2	Rhéomètre cône-plan.....	46
2.5.3.3	Loi de Cox Merz	47
2.5.3.4	Mesures	48
2.5.3.5	Modèles rhéologiques	50
2.5.3.6	Conclusion.....	51
2.6	Acquisitions avec la filière.....	51
2.6.1	La chaîne d'acquisition	52
2.6.2	Logiciel d'acquisition	55
2.6.2.1	Langage	55
2.6.2.2	Organisation	55
2.6.2.3	Limites.....	57
2.6.3	Les capteurs de pression.....	57
2.6.4	La balance de précision.....	57
2.6.5	Quelques mots sur l'extrudeuse.....	60
2.6.6	Conclusion	60
2.7	Analyse des données et traitements	61
2.7.1	Modus operandi.....	61
2.7.2	Les essais réalisés.....	62
2.7.3	Post-traitement	62
2.7.4	Conclusion.....	62
2.8	Détermination rhéologique avec la filière par comparaison avec le rhéomètre capillaire.....	63
2.9	Conclusion	66
3	Modélisation et Simulation	67
3.1	Introduction	67
3.2	Problème étudié et nombres adimensionnels	67
3.2.1	Système étudié.....	67
3.2.2	Traduction en équations	68

3.2.3	<i>Etude de quelques grandeurs caractéristiques</i>	68
3.2.3.1	Le nombre de Reynolds.....	69
3.2.3.2	Le nombre de Stokes.....	69
3.2.3.3	Le nombre de Péclet.....	69
3.2.3.4	Le nombre de Cameron.....	70
3.2.4	<i>Autres hypothèses simplificatrices</i>	71
3.2.5	<i>La rhéologie du polymère</i>	71
3.2.6	<i>Les conditions limites</i>	73
3.2.7	<i>Conclusion</i>	76
3.3	<i>Aquilon</i>	76
3.3.1	<i>La philosophie</i>	76
3.3.2	<i>Volumes finis et stratégies numériques</i>	77
3.3.2.1	Maillage décalé.....	77
3.3.2.2	Pénalisation et équations numériques.....	78
3.3.3	<i>Discrétisation spatiale et temporelle</i>	79
3.3.3.1	Discrétisation temporelle.....	79
3.3.3.2	Couplage vitesse-pression.....	80
3.3.3.3	Discrétisation spatiale.....	81
3.3.4	<i>Solveurs et algorithmes de résolutions</i>	83
3.4	<i>Validation du code et choix du maillage</i>	84
3.5	<i>Conclusion sur le modèle adopté</i>	88
4	<i>Méthodes inverses</i>	89
4.1	<i>Introduction</i>	89
4.1.1	<i>De l'intérêt des méthodes inverses</i>	89
4.1.2	<i>Mal posé au sens d'Hadarnard</i>	90
4.1.2.1	Existence de la solution.....	90
4.1.2.2	Unicité de la solution.....	91
4.1.2.3	Quasi-solutions.....	91
4.1.2.4	Stabilité vis-à-vis des faibles variations.....	91
4.1.3	<i>Rappels bibliographiques</i>	92
4.2	<i>Méthodes classiques de minimisation et limitations</i>	93
4.2.1	<i>Minimisation sans contrainte</i>	94
4.2.2	<i>Minimisation avec contraintes</i>	95
4.2.3	<i>Evaluation du gradient</i>	95
4.3	<i>Méthode de l'adjoint</i>	97
4.3.1	<i>Le principe</i>	97
4.3.2	<i>Les avantages de la méthode</i>	99
4.3.3	<i>Application à notre problème : écriture des équations</i>	99
4.3.3.1	Simplifications des équations de Navier-Stokes.....	99
4.3.3.2	Applications à la méthode de l'adjoint.....	101
4.3.3.2.1	Problème direct.....	102
4.3.3.2.2	Paramétrisation de la viscosité.....	102
4.3.3.2.3	Observations et critère.....	103

4.3.3.2.4	Equations adjointes	103
4.3.3.2.4.1	Ecriture du Lagrangien.....	103
4.3.3.2.4.2	Ecriture des équations adjointes	104
4.3.3.2.4.2.1	Equation adjointe en température.....	104
4.3.3.2.4.2.2	Equation adjointe en vitesse	106
4.3.3.2.4.3	Calcul du gradient	111
4.3.3.3	Stratégie de résolution du problème de sensibilité.....	112
4.3.3.4	Régularisation.....	112
4.3.4	Conclusion.....	113
4.4	<i>Etude de sensibilité</i>	114
4.4.1	Effet de la viscosité sur le système.....	114
4.4.2	Sensibilité des mesures aux paramètres recherchés.....	118
4.4.3	Matrice de Fisher	121
4.4.4	Choix des paramètres et incertitude.....	123
4.4.5	Conclusion.....	123
4.5	<i>Validations numériques</i>	124
4.5.1	Rhéologie newtonienne thermodépendante	124
4.5.2	Rhéologie loi puissance thermodépendante	125
4.5.3	Rhéologie thermodépendante à 3 paramètres	127
4.5.4	Rhéologie du PEBD à 10 paramètres.....	128
4.5.5	Estimation de rhéologie avec du bruit de mesure	132
4.5.6	Conclusion.....	133
4.6	<i>Conclusion</i>	134
5	Résultats et analyses	135
5.1	<i>Introduction</i>	135
5.2	<i>Préliminaires</i>	135
5.3	<i>Différences entre l'expérimental et la simulation numérique, et leurs conséquences sur l'estimation de rhéologie par inversion de mesures</i>	138
5.3.1	Thermocouples imparfaits	139
5.3.2	Pertes thermiques	139
5.3.2.1	Observation expérimentale.....	139
5.3.2.2	Modélisation des fuites.....	139
5.3.2.3	Non prise en compte des pertes thermiques et effet sur l'estimation par inversion de mesures	141
5.3.2.4	Effet de la pondération	145
5.3.2.5	Conclusion.....	148
5.3.3	Profil thermique en entrée de filière.....	148
5.3.3.1	Problème posé par l'hypothèse d'un profil thermique homogène en entrée de filière	148
5.3.3.2	Effet de la non-prise en compte du bon profil thermique sur l'inversion rhéologique.....	149
5.3.3.3	Effet de la pondération	153
5.3.3.4	Conclusion.....	156

5.3.4 Conclusion.....	156
5.4 Estimation de rhéologie par inversion de mesures expérimentales.....	156
5.4.1 Enoncé du problème traité.....	156
5.4.2 Application et résultats de la technique inverse.....	158
5.4.3 Discussion.....	161
5.5 Estimation de rhéologie par inversion de mesures expérimentales pour différentes conditions opératoires traitées simultanément.....	161
5.5.1 Cas expérimentaux considérés.....	161
5.5.2 Application et résultats de la technique inverse.....	162
5.5.3 Discussion.....	164
5.6 Conclusion.....	165
6 Conclusion.....	167
6.1 Bilan.....	167
6.2 Les perspectives.....	167
6.3 Conclusion.....	168
7 Bibliographie.....	169
8 Nomenclature.....	177
9 Annexe : Capteurs.....	181
10 Annexe : Loi de Student.....	183
11 Annexe : Pertes thermiques.....	185
<i>Traitement du rayonnement :.....</i>	<i>187</i>
<i>Traitement de la convection libre :.....</i>	<i>187</i>
<i>Problème de l'ailette.....</i>	<i>189</i>
<i>Problème de l'ailette bi-constituants ou bi-couches :.....</i>	<i>191</i>
<i>Filière.....</i>	<i>192</i>
<i>L'arrière de la filière (partie S₄):.....</i>	<i>195</i>
<i>Avant de la filière.....</i>	<i>196</i>
<i>Partie S₁ : isolant (16 mm de longueur, 40 de hauteur)......</i>	<i>197</i>
<i>Partie S₃ : acier, juste recouvert d'une épaisseur de résine (19 mm de longueur, 40 de hauteur).....</i>	<i>197</i>
<i>Partie S₂ : la connectique.....</i>	<i>198</i>

A_1	199
A_2	199
A_3	199
P_{sup}	200
P_{inf}	200
P_{At}	201
Bilan	202
<i>S4</i>	202
Détermination des coefficients d'échange pour l'intégration dans les termes sources volumiques d'Aquilon	203

1 Introduction

1.1 Introduction

Si la révolution industrielle de la fin du dix-neuvième siècle fut l'avènement de la fonte et de l'acier, nous vivons aujourd'hui dans un monde où les matières plastiques dominent : téléphones portables, stylos, meubles, etc... Ces matières désormais classiques appartiennent à la classe chimique des polymères, c'est à dire des macromolécules répétant de nombreuses fois les mêmes structures moléculaires. Les plus connus d'entre eux sont les plastiques mais les polymères interviennent aussi dans la composition des colles et de nombreux textiles synthétiques.

La première matière plastique est née en 1870. Il s'agit du nitrate de cellulose ou celluloïd, obtenu à partir du camphre et de la cellulose, qui fut utilisé par les frères Hyatt pour remplacer l'ivoire dans la fabrication des boules de billard. Néanmoins ce n'est que dans la première partie du vingtième siècle que fut développée la chimie de synthèse qui allait donner naissance aux « grands thermoplastiques » tels le Polystyrène ou le Polychlorure de Vinyle, dont les noms nous sont si familiers. Néanmoins avant de devenir des produits communs, il a fallu développer un certain nombre de procédés industriels de mise en forme de ces polymères. Notons à ce propos que la plasturgie (discipline qui étudie ces procédés de mise en forme) est née en France à Oyonnax (dans l'Ain) avec l'installation de la première presse à injecter, en 1930. Aujourd'hui Oyonnax abrite le Pôle Européen de Plasturgie (créé en 1990) et l'ancienne Ecole Supérieure de Plasturgie (1932) devenue aujourd'hui le Site de Plasturgie de l'INSA de Lyon, qui avec le lycée Arbez Carme forment une plate-forme dédiée à la plasturgie. Ajoutons qu'en France, environ 4000 entreprises travaillent dans la plasturgie.

Si les polymères connaissent aujourd'hui un tel succès, les procédés de mise en forme sont encore loin d'être parfaitement maîtrisés. En effet, les polymères sont des matériaux aux propriétés complexes, évoluant avec les contraintes appliquées, la température et la pression. Gonflements, retraits, déformations sont quelques uns des problèmes rencontrés lors de la mise en forme, que ce soit par moulage, extrusion ou autre. Ceci rend l'optimisation des procédés très difficile. Pour ajouter à cette situation, le prix d'un moule ou d'une filière d'extrusion est très élevé. Le moindre défaut de conception coûte extrêmement cher à l'entreprise et il n'est pas envisageable de tester plusieurs moules « juste pour voir ».

Fort heureusement le développement de l'informatique permet aujourd'hui de simuler des écoulements complexes dans des géométries tridimensionnelles élaborées. De fait, la simulation numérique constitue une alternative appréciable, notamment en termes de coût. Les résultats de cette technique sont toutefois fortement tributaires de la qualité de la modélisation et de la paramétrisation. Ainsi la simulation est d'autant plus fiable qu'on connaît avec précision la masse volumique, la loi de comportement rhéologique, les températures imposées, le débit, la pression etc... Bien entendu, il est souvent impossible de connaître avec précision tous ces paramètres. Ainsi la température imposée au moyen d'une chaufferette ne sera pas forcément homogène sur

tout l'espace recouvert. De même, la dépendance de la masse volumique à la température n'est pas forcément connue avec précision. Enfin la simulation numérique correspond à la résolution d'un système d'équations différentielles partielles et nécessite donc la connaissance des conditions limites, parfois difficiles voire impossibles à évaluer.

En pratique, on se retrouve donc contraint de faire un certain nombre d'approximations, ce qui limite les capacités prédictives de la simulation. Pour remédier à ces lacunes, on peut développer des techniques de mesures, mais l'instrumentation reste souvent délicate. Une autre méthode consiste à estimer ces paramètres par des mesures indirectes. On parle alors de technique inverse ou d'estimation de paramètres par inversion de mesures. Elle consiste à réaliser cette estimation à l'aide d'un algorithme de minimisation d'un critère, critère dépendant de mesures accessibles, par exemple en périphérie du système.

L'étude présentée ici porte justement sur le développement d'une telle méthode inverse appliquée au procédé industriel de l'extrusion. Mais avant d'en dire plus, nous allons faire quelques rappels sur les polymères et l'extrusion, afin de pouvoir expliciter les détails du sujet traité ici.

1.2 Vocabulaire et rappels sur les polymères

1.2.1 Qu'est-ce qu'un polymère ?

Un polymère est une macromolécule dans laquelle se répète un (ou plusieurs) motif(s) moléculaire(s). La chimie du carbone étant très adaptée à la création de longues chaînes atomiques, les polymères appartiennent aux espèces chimiques dites organiques, c'est à dire principalement constituées de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote, à la base de la chimie du vivant.

Les polymères peuvent être d'origine naturelle ou artificielle. La synthèse de telles molécules appartient à la chimie macromoléculaire dont Hermann Staudinger fut le précurseur dans les années 1920 à 1930. Elle passe par la modification chimique d'un polymère naturel ou bien l'utilisation d'une réaction de polymérisation. Cette polymérisation se décline en plusieurs types que nous ne développerons pas ici. Il nous suffit de retenir que la polymérisation consiste à établir des liaisons covalentes entre petites molécules (les motifs de base du polymère) appelées monomères. Les polymères peuvent être générés à partir d'un seul type de monomère (on parle alors d'homopolymère, c'est le cas du polyéthylène) ou de différents monomères (on parle cette fois-ci de copolymères). Ce dernier cas est utilisé pour combiner les propriétés physiques des différents monomères, permettant l'obtention d'un polymère aux propriétés « ajustées ».

Les polymères sont souvent classés en fonction de leurs propriétés thermomécaniques. On peut citer les classes suivantes à titre d'exemples :

- les thermoplastiques : deviennent malléables sous l'effet de la chaleur ce qui permet leur mise en forme.
- les thermodurcissables : durcissent sous l'effet de la chaleur.
- Les élastomères : déformables de manière réversible (à l'instar du caoutchouc).

Puisque les propriétés font partie intégrante de la définition des polymères, donnons plus de détails à leur sujet.

1.2.2 Quelques propriétés et caractéristiques

1.2.2.1 Distribution et représentation statistique

Compte tenu du mode de synthèse des polymères, la longueur de la chaîne est différente pour chaque macromolécule et on va donc parler de longueur de chaîne moyenne. Les propriétés « affichées » pour un polymère sont donc toutes des valeurs statistiques, calculées en considérant la distribution. Pour la masse molaire, on considère habituellement les deux valeurs suivantes :

- la masse molaire moyenne en nombre

$$\overline{M}_n = \frac{\sum_i N_i \cdot M_i}{\sum_i N_i} \quad (1.1)$$

- la masse molaire moyenne en poids

$$\overline{M}_w = \frac{\sum_i m_i \cdot M_i}{\sum_i m_i} = \frac{\sum_i N_i \cdot M_i^2}{\sum_i N_i \cdot M_i} \quad (1.2)$$

Où i est le degré de polymérisation (c'est à dire le nombre de motifs monomères que l'on retrouve dans une chaîne polymère), m_i la masse d'une chaîne de degré de polymérisation i et N_i le nombre de chaînes de masse molaire M_i . La figure 1.1 illustre pour un exemple simple ces notations.

Le degré moyen de polymérisation est lui aussi évalué en nombre et en poids :

- degré moyen de polymérisation en nombre

Il est égal au nombre moyen de motifs monomères dans les chaînes polymères :

$$\overline{DP}_n = \frac{\sum_i i \cdot N_i}{\sum_i N_i} \quad (1.3)$$

- degré moyen de polymérisation en poids

$$\overline{DP}_w = \frac{\sum_i i \cdot N_i^2}{\sum_i i \cdot N_i} \quad (1.4)$$

Pour qualifier la distribution des longueurs de chaîne, on peut définir l'indice de polydispersité I :

$$I = \frac{M_w}{M_n} \quad (1.5)$$

○ Monomère $i = 1, M_1$

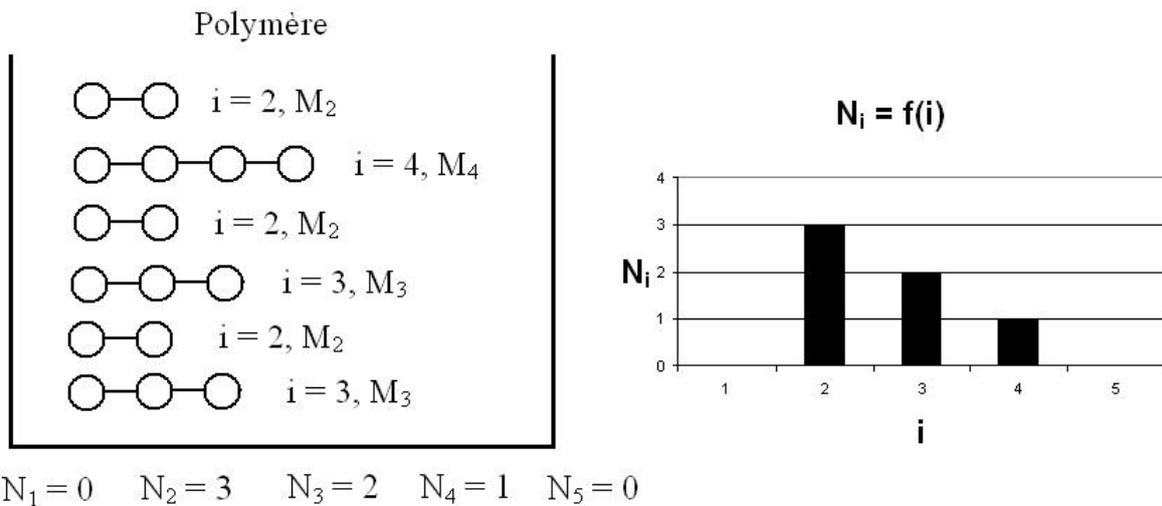


Figure 1.1: Schéma simplifié d'un mélange polymère, avec différents degrés de polymérisation (i) et donc des chaînes polymères de différentes tailles et masses molaires (M_i). N_i représente le nombre de chaînes de degré de polymérisation i .

1.2.2.2 Modules et viscoélasticité

La rigidité d'un polymère a été définie d'après les observations de Thomas Young (1773-1829). Celui-ci avait remarqué que pour une petite déformation, le rapport entre la contrainte de traction appliquée à un matériau et la déformation qui en résulte (allongement relatif) est constant, tant que la limite d'élasticité du matériau n'est pas atteinte. Cette constante, baptisée module d'Young ou module d'élasticité longitudinal, se calcule via la loi de Hooke :

$$\sigma = E\varepsilon \quad (1.6)$$

où σ est la contrainte, E le module d'Young et ε la déformation.

Le module d'Young est la valeur théorique de la contrainte mécanique (Pa) qui entraînerait un allongement de 100% de la longueur initiale d'un matériau. On dit d'un matériau dont le module d'Young est très élevé ($>10^5$ Pa) qu'il est rigide.

1.2.2.3 Rhéologie

La viscosité d'un fluide traduit l'évolution de la contrainte de cisaillement lorsque le taux de cisaillement augmente, ce qui se résume à la formulation suivante :

$$\mu(\dot{\gamma}) = \frac{\tau(\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}} \quad (1.7)$$

où μ est la viscosité dynamique en Pa.s, τ est la contrainte de cisaillement en Pa et $\dot{\gamma}$ le taux de cisaillement en s^{-1} . La viscosité est habituellement notée η par les rhéologues, mais nous emploierons au cours de cette étude la notation usuelle des mécaniciens des fluides μ .

Pour un fluide newtonien, la viscosité est une fonction constante, indépendante du taux de cisaillement. Mais les polymères fondus sont généralement non-newtoniens. L'étude de la variation de la viscosité en fonction du cisaillement, de la température et de la pression s'appelle la rhéologie.

Les polymères fondus sont constitués de l'entrelacs de plusieurs chaînes polymères de longueurs et de masses statistiques. Plus ces dernières caractéristiques sont grandes et plus la structure du fluide polymère est complexe. L'interprétation de ce phénomène est explicitée par [Graessley 1967] et [Bueche, 1968] qui s'appuient sur le concept d'enchevêtrement des macromolécules. En pratique, pour qu'un enchevêtrement se forme ou se déforme, il faut que le mouvement de la molécule dure au moins un certain temps λ . Or les mouvements des macromolécules sont la résultante des contraintes de cisaillement imposées au polymère. Donc le temps de contact entre deux macromolécules est une fonction du taux de cisaillement. Dès lors que le taux de cisaillement devient supérieur à $\frac{1}{\lambda}$, la densité d'enchevêtrement diminue et la viscosité également. Lorsqu'il est inférieur, la densité d'enchevêtrement reste constante et la viscosité aussi. On parle dès lors de plateau newtonien pour cette zone de viscosité « constante », nettement visible sur les courbes de viscosité en fonction du taux de cisaillement. Ces courbes d'écoulement sont généralement représentées sur une échelle logarithmique et la pente de la décroissance de viscosité définit l'indice de pseudoplasticité du polymère. Un schéma d'une telle courbe est donné en figure 1.2.

Au cours de notre étude, nous nous intéressons particulièrement à cet aspect pseudo-plastique. Néanmoins ce modèle ne permet pas d'expliquer tous les phénomènes observés comme le gonflement en sortie de filière. On parle alors de comportement viscoélastique. Ce comportement est usuellement formalisé selon l'analogie entre le comportement des milieux viscoélastiques et celui de systèmes composés de ressorts et d'amortisseurs [Mandel, 1966], [Ferry, 1970], [Bird et al., 1987], [Tanner, 1985], [Dealy et Wissbrun, 1990]. D'autres formalismes sont également disponibles [Han, 1976], [Bird et al., 1977], [Walters, 1978], [Tanner, 1985], [Dealy et Wissbrun, 1990].

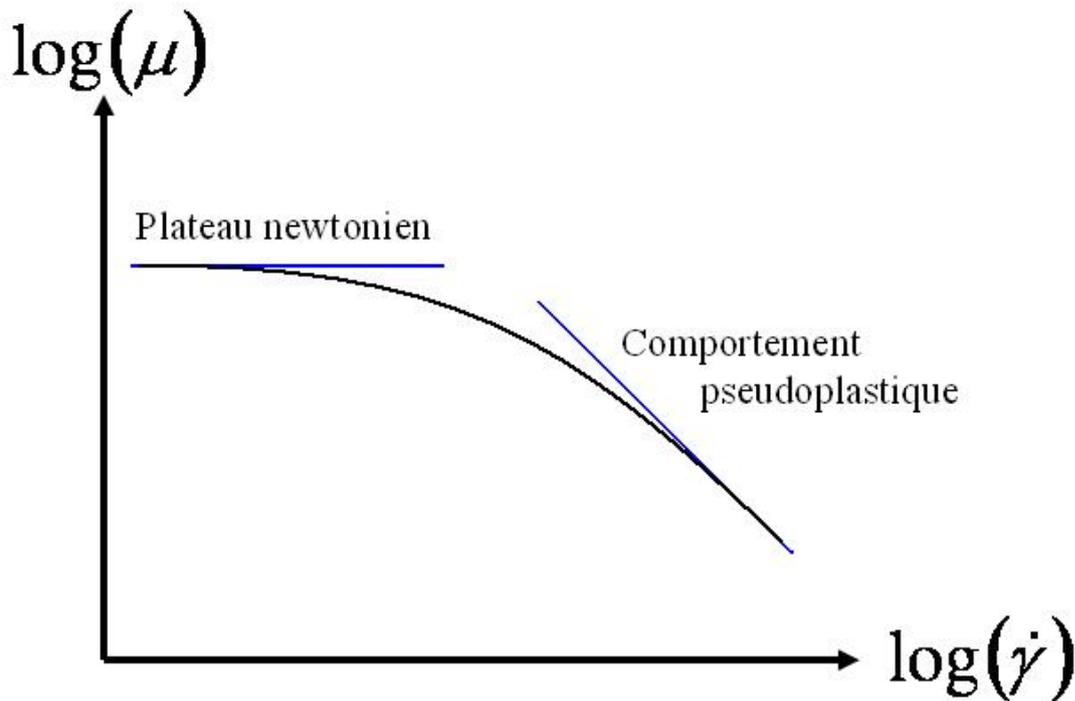


Figure 1.2: Allure générale d'une courbe d'écoulement de polymère fondu

S'il existe de nombreux modèles rhéologiques, quelques lois « classiques » reviennent principalement dans la littérature consacrée aux écoulements des polymères, et donc aux aspects plutôt pseudo-plastiques. Beaucoup de ces lois découplent les dépendances de la viscosité avec le cisaillement et la température, se focalisant sur un seul aspect. Le lien peut toutefois être rétabli par l'utilisation du principe d'équivalence temps-température. Nous allons commencer par rappeler quelques unes de ces lois les plus classiques :

1.2.2.3.1 Variation de la viscosité avec le cisaillement

1.2.2.3.1.1 Loi Ostwald – de Waele

Cette loi [Ostwald, 1923], [De Waele, 1923] est également appelée loi puissance et s'écrit traditionnellement sous la forme :

$$\mu = K \cdot |\dot{\gamma}|^{m-1} \quad (1.8)$$

où K est la consistance du matériau (en $\text{Pa}\cdot\text{s}^m$) et m est l'indice de pseudoplasticité ($m = 1$ pour un fluide newtonien ; $m = 0$ pour un corps rigide plastique). Cette loi a le défaut de ne pas présenter de plateau newtonien à faible taux de cisaillement. Elle est donc souvent complétée par

une valeur de viscosité seuil, pour les faibles taux de cisaillement. En revanche, cette loi est normalement bien adaptée pour les forts taux de cisaillement.

1.2.2.3.1.2 Loi de Cross

La loi de Cross [Cross, 1965] a l'avantage de présenter le plateau newtonien à faible taux de cisaillement.

$$\mu - \mu_{\infty} = \frac{\mu_0 - \mu_{\infty}}{1 + (\lambda \cdot \dot{\gamma})^m} \quad (1.9)$$

où λ est le temps caractéristique de l'enchevêtrement, μ_0 la viscosité du palier newtonien à faible taux de cisaillement et μ_{∞} un deuxième plateau newtonien à taux de cisaillement élevé. Ce dernier n'ayant jamais été observé pour un polymère fondu [Agassant, 1996], on prendra $\mu_{\infty} = 0$. Ce qui donne :

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + (\lambda \cdot \dot{\gamma})^m} \quad (1.10)$$

1.2.2.3.1.3 Loi de Carreau-Yasuda

La loi de Yasuda est une loi de Carreau généralisée. Elle s'exprime de la façon suivante :

$$\mu = \mu_0 \cdot \left(1 + (\lambda \dot{\gamma})^a\right)^{\frac{m-1}{a}} \quad (1.11)$$

où λ a le même sens que pour la loi de Cross. Le paramètre a sert à ajuster la transition plus ou moins rapide entre le plateau newtonien et la partie loi puissance. La loi de Carreau correspond à la valeur $a=1$ [Carreau, 1972], [Yasuda et al., 1981].

1.2.2.3.2 Variation de la viscosité avec la température

1.2.2.3.2.1 Loi de Williams, Landel et Ferry (WLF)

[WLF, 1955]

$$\mu = \mu_0(T_{ref}) \cdot \exp\left(\frac{-C \cdot (T - T_{ref})}{D + T - T_{ref}}\right) \cdot \dot{\gamma}^{m-1} \quad (1.12)$$

C et D sont deux paramètres caractéristiques du matériau étudié.

En pratique cette loi est applicable entre la température de transition vitreuse T_g et T_g+100 . Au-dessus, la loi d'Arrhénius est préférable. Dans la mise en forme des matières plastiques, d'Agassant et al., il est précisé quelques valeurs de C et D :

Tableau 1.1 : Exemples de paramètres pour la loi WLF

Polymères	T_g (K)	C	D (K)
Polystyrène	373.15	14	50
Polyacétate de vinyle	405.15	16	47
Polyméthacrylate de méthyle	388.15	32	80
Caoutchouc naturel	200.15	17	54
SBR	213.15	20	26

En cas de méconnaissance de ces paramètres C et D, [Bird et al., 1977] suggèrent l'utilisation des valeurs suivantes : C = 17.44 et D = 51.6 K (si la température de référence est prise à T_g).

1.2.2.3.2.2 Loi d'Arrhénius

$$\mu = \mu_0 e^{\frac{A}{T}} \quad (1.13)$$

On trouve aussi la formulation équivalente suivante :

$$\mu = \mu_0 (T_{ref}) e^{A_{ref} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)} \quad (1.14)$$

A représente le rapport de l'énergie d'activation et de R la constante des gaz parfaits. Les températures sont exprimées en K. [Agassant et al., 1996]. A_{ref} correspond à la valeur de A pour une température T_{ref} de référence.

A titre d'information, nous reprenons quelques lignes du tableau récapitulatif d'Agassant, qui donne des ordres de grandeur des énergies d'activation pour des polymères fondus :

Tableau 1.2 : Quelques énergies d'activation pour la loi d'Arrhénius

Polymère	Energie d'activation en kJ/mol à 100 K au dessus de la température de transition vitreuse.
PEHD	24-28
PEBD	61-67
PEBD linéaire	29-32
Polypropylène	36-50
Polystyrène	96

1.2.2.3.3 Variation de la viscosité en fonction du cisaillement et de la température couplés

[Bowers, 1986] propose un développement en série entière comme l'équation du Viriel en thermodynamique

$$\ln(\mu(\dot{\gamma}, T)) = \sum_{i,j} \alpha_{i,j} T^i \cdot (\ln \dot{\gamma})^j \quad (1.15)$$

1.2.2.3.4 Principe d'équivalence temps-température

L'observation physique montre que les comportements en fonction de la température et de la fréquence de sollicitation sont liés. On observe ainsi que de hautes fréquences de sollicitation amènent à un comportement équivalent à celui observé à basses températures. De même les basses fréquences sont équivalentes à des températures élevées. On résume cette observation par le principe d'équivalence temps-température.

Ce principe peut être utilisé pour la construction d'une courbe « maîtresse » à partir des translations de courbes expérimentales obtenues à différentes températures. Cette courbe maîtresse permet par la suite de déduire la propriété étudiée du polymère pour toute température et toute fréquence de sollicitation, dans les limites de validité du modèle.

[Blair et al., 2002] s'appuyant sur les ouvrages de [Bird et al., 1987] traduit ce principe d'équivalence temps-température par le tracé des courbes d'écoulement (viscosité μ en fonction du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$) sous la forme réduite $\frac{\mu}{a_\mu}$ en fonction de $a_T \dot{\gamma}$, en définissant a_μ et a_T de la sorte :

$$\begin{cases} a_\mu = \frac{\mu_0(T, \rho)}{\mu_0(T_{ref}, \rho_{ref})} \\ a_T = \frac{\mu_0(T, \rho)}{\mu_0(T_{ref}, \rho_{ref})} \frac{T_{ref} \rho_{ref}}{T \rho} = a_\mu \frac{T_{ref} \rho_{ref}}{T \rho} \end{cases} \quad (1.16)$$

Où l'indice 0 se reporte à un régime newtonien et l'indice ref correspond à une valeur de référence, choisie dans le but de réduire les données.

1.2.2.3.5 Variation de la viscosité en fonction de la pression

Sans reprendre tout le raisonnement présenté par [Agassant et al., 1996], nous nous contentons ici de rappeler une loi de piézodépendance.

$$\mu = \mu_0 e^{\lambda p}$$

(1.17)

où χ est le coefficient de piézodépendance.

On rappelle également quelques ordres de grandeur de χ :

Tableau 1.3: Exemples de facteur de piézo-dépendance

Polymère	T (K)	χ en 10^{-8} Pa ⁻¹	référence littérature
PVC	453.15	6	Wales (1975)
	463.15	4	
	473.15	3	
PEHD	463.15	2.31	Nakajima et Collins (1974)

1.2.3 Problème de la mesure

Les polymères sont des macromolécules aux caractéristiques complexes. A température ambiante, les polymères sont solides ou liquides. Au cours de cette étude, nous nous intéresserons aux polymères solides que nous ferons fondre pour leur mise en forme, travaillant à des températures de l'ordre de 500 K.

Nous avons noté que leur comportement visqueux est particulièrement sensible aux conditions opératoires. Or la viscosité est définie par le rapport de la contrainte par le taux de cisaillement. Par conséquent sa mesure va se faire par l'intermédiaire d'une mesure de contrainte pour un cisaillement donné, ou au contraire d'une mesure de cisaillement pour une contrainte donnée. Ces mesures sont effectuées aux moyens de rhéomètres. Il en existe plusieurs sortes : capillaire, plan-plan ou cône plan [Carrot et al., Techniques de l'ingénieur].

Le principe consiste à faire s'écouler le polymère au sein du rhéomètre choisi, à une température donnée, évaluée plus ou moins précisément. La difficulté vient du fait que le taux de cisaillement ou la contrainte de cisaillement ne sont pas directement accessibles. En pratique, on mesure donc des vitesses et des pressions, et on calcule des taux et des contraintes de cisaillement apparents à partir des équations de Navier-Stokes pour un fluide newtonien.

Comme les polymères sont rarement newtoniens, on doit effectuer une correction dite de Rabinovitch. Celle-ci consiste à calculer un indice de pseudo-plasticité pour chaque couple taux et contrainte de cisaillement. D'autres effets peuvent intervenir comme des pertes de charge dans les rhéomètres capillaires, provoquant un écart entre la pression mesurée et la pression réelle. On corrige empiriquement cette erreur à l'aide de la correction de Bagley, qui consiste à répéter plusieurs fois la mesure avec des rhéomètres capillaires de différentes longueurs. Cette nouvelle correction demande donc du matériel et nécessite du temps de mesure. Les détails de ces corrections sont illustrés et mis en pratique dans le chapitre 5 de cette étude. On peut également se référer à [Piau J-M., Article 710 des Techniques de l'Ingénieur], [Agassant et al., 1996], [CREPIM, 2003].

Par ailleurs, la mesure de température à l'intérieur du rhéomètre est généralement assurée par un unique thermocouple, situé en périphérie du système. On fait alors l'hypothèse d'isothermie. Cette hypothèse n'est pas systématiquement vérifiée en raison de la dissipation visqueuse, mais il est difficile de faire autrement.

Compte-tenu des approximations faites, il apparaît que les mesures les plus utiles pour prévoir le comportement d'un polymère au sein d'un procédé de mise en forme, devraient se faire sur un rhéomètre présentant une géométrie la plus proche possible du procédé. Dès lors, le rhéomètre capillaire sert habituellement de référence. Une autre solution consiste à instrumenter le procédé lui-même et l'utiliser comme rhéomètre. On peut alors réaliser une mesure en ligne, ou une estimation de mesures par technique inverse. [Lebaal et al., 2005] ont mis en place une telle technique pour estimer les coefficients d'une loi puissance dans un procédé d'extrusion.

L'usage d'une technique inverse s'appuie sur une comparaison entre des mesures et une simulation. Une telle technique est développée dans le chapitre 4 de cette étude et s'appuie sur la simulation de l'écoulement et des transferts thermiques dans le système considéré. Par rapport aux travaux de [Lebaal et al., 2005], il est fait le choix d'un modèle rhéologique original, permettant de s'affranchir d'une formule mathématique prédéfinie telle que la loi puissance. Ce choix stratégique permet de s'écarter du comportement purement pseudo-plastique et de caractériser le comportement rhéologique pour des taux de cisaillement relativement faibles. En pratique, la simulation permet d'avoir accès au champ de température, aux vitesses et aux taux de cisaillement. Dès lors, les différentes corrections appliquées lors des mesures classiques ne sont plus nécessaires, ce qui confère à cette méthode d'estimation un intérêt certain par rapport aux méthodes expérimentales traditionnelles.

Cette technique est développée et appliquée dans le cas d'une filière d'extrusion. Aussi allons-nous faire quelques rappels sur ce procédé industriel.

1.3 L'extrusion en deux mots

1.3.1 Le procédé industriel

Le mot extrusion fait référence à une large gamme de procédés. Nous allons nous limiter ici à l'extrusion monovis, dans le cadre de l'extrusion de polymère, qui correspond au cas traité au cours de cette étude.

Le principe d'une extrudeuse est celui d'une vis sans fin couplée à un système de chauffe. Son rôle consiste à transporter le polymère, à le fondre, à le mélanger, et à le monter en pression afin qu'il puisse par la suite, traverser la filière en sortie d'extrudeuse. L'objectif est d'obtenir un débit régulier, un matériau fondu homogène dont la température est celle déterminée par l'opérateur, de façon à avoir le meilleur compromis entre un haut débit et une basse consommation énergétique.

Si on observe l'état du polymère au cours du convoyage, on voit apparaître :

- une zone de convoyage solide, où le polymère se trouve encore sous la forme de granulés solides (en tête d'extrudeuse)
- une zone de pompage, en fin de filière où le polymère est totalement fondu
- une zone intermédiaire de fusion, entre les deux.

Ces zones sont illustrées en figure 1.3.

La fusion du polymère et sa mise en pression sont les résultantes de l'énergie mécanique, fournie par la vis et l'énergie thermique, fournie par la régulation du fourreau. [Vergnes et Puissant, Techniques de l'Ingénieur] mettent en évidence par le calcul du nombre de Brinkman que c'est l'énergie mécanique – source de déformations visqueuses au sein du polymère – qui est largement prépondérante.

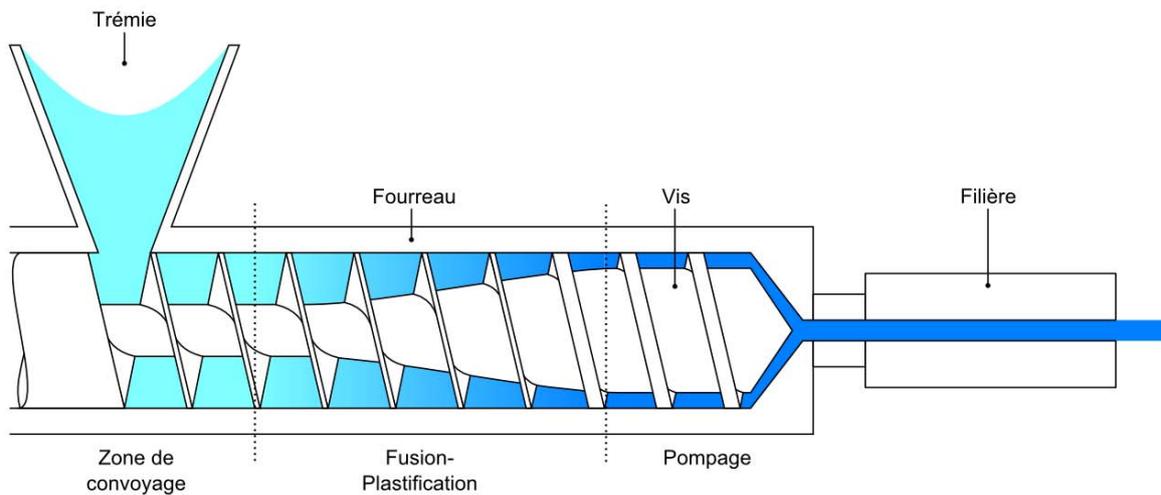


Figure 1.3: Schéma d'une extrudeuse monovis, avec description de l'état du polymère.

1.3.2 Applications concrètes

L'extrudeuse est associée à une filière qui donne au polymère la forme d'un profilé de grande longueur de section choisie. Bien qu'on s'intéresse particulièrement aux polymères, l'extrusion s'applique aux matériaux mais également aux pâtes alimentaires et à l'argile. Elle permet une mise en forme précise même pour des géométries complexes (parfois creuses). On l'utilise donc pour produire des tubes, des feuilles, des plaques, des profilés, des isolations de câbles électriques ou téléphoniques. A la sortie de la filière, le produit peut également subir d'autres traitements, par exemple le soufflage, technique qui permet de produire des films d'emballage plastiques.

1.3.3 Notion de filière

La filière conditionne la forme de l'extrudat à la fin du procédé. En plus de la géométrie, son rôle est d'assurer la plus grande homogénéité possible en température du produit. En effet, les hétérogénéités sont sources de défaut qui seront aggravés lors d'un traitement post-filière tels l'étirage, la conformation ou le refroidissement.

En fonction de l'application sélectionnée, il existe différentes géométries de filières. Pour plus de détails, [Agassant et al., 1996] fait le point sur chacune de ces géométries.

- les filières de gaines : souvent de géométrie hélicoïdale, elles servent à la production de films de faible épaisseur (de 10 à 300 μm).
- les filières de tubes : de géométrie axisymétrique, elles permettent la production de tubes de quelques millimètres à 2 m de diamètre.
- les filières de plaque : différentes géométries aux noms évocateurs (en T, en « queue de carpe », en « porte-manteau »...) qui permettent de fabriquer des produits plats de 0.2 à 25 mm.
- les filières de profilés : elles servent à produire des pièces de formes complexes et n'ont donc pas de géométrie fixée.
- les filières de câblerie : permettent l'isolation des câbles électriques ou téléphoniques.

1.3.4 Conclusion

L'extrusion est un procédé industriel de mise en forme des matériaux et en particulier des matières plastiques. Le polymère est convoyé par une vis (extrudeuse monovis) ou deux (extrudeuse bivis). Les effets conjoints de la température du fourreau et des forces de contraintes dans le polymère développées par la rotation de la vis assurent l'échauffement et la fusion du polymère. Celui-ci quitte alors l'extrudeuse pour la filière d'extrusion, dont la géométrie est choisie en fonction du produit fini désiré.

Nous avons maintenant rassemblé les éléments nécessaires à l'explication du sujet traité au cours de cette étude.

1.4 Objet de l'étude et annonce du plan

Cette étude s'intéresse à la simulation de l'écoulement d'un polymère fondu au sein d'une filière d'extrusion. L'objectif poursuivi est la reproduction numérique de l'écoulement et des transferts thermiques lors de la mise en œuvre du procédé. Pour parvenir à atteindre cet objectif, une connaissance complète de notre système est requise. Malheureusement certains paramètres du modèle sont indéterminés ou manquent de précision. En effet la sensibilité des caractéristiques du polymère au cisaillement, à la température et à la pression rendent leur évaluation difficile. C'est notamment le cas de la rhéologie. Lors de sa thèse, qui a précédé cette étude, Mustapha Karkri a estimé les profils thermiques en entrée de filière par inversion de mesures [Karkri, 2004]. De la même façon, une technique d'estimation de la rhéologie à partir de mesures expérimentales indirectes est mise en place.

L'exposé de cette étude commence par une présentation complète du volet expérimental de la thèse. Au cours de ce chapitre, un descriptif détaillé de la filière est donné, de sa conception à son instrumentation. La caractérisation des polymères utilisés est traitée et fournit les différentes données essentielles à une simulation aussi réaliste que possible. Le pilotage de l'acquisition y est expliqué ainsi que le post-traitement expérimental. Enfin ce chapitre montre

également les différents essais réalisés sur l'extrudeuse, afin d'obtenir les données numériques permettant d'alimenter la technique inverse.

Le chapitre suivant détaille le modèle et les outils numériques. Il justifie les approximations faites et précise les algorithmes utilisés. Il fixe également les paramètres numériques tels le maillage en se fondant sur une étude de celui-ci.

Ensuite vient un chapitre sur les techniques d'estimation par inversion de mesures. Dans ce chapitre, des définitions et des rappels sont donnés. Un aperçu de la littérature est montré avant de définir la méthode et la stratégie adoptées. La faisabilité de l'estimation est traitée au travers d'une étude de sensibilité. Enfin un certain nombre de tests numériques sont présentés afin de valider la méthode et définir ses limites.

Dès lors, les différents éléments sont assemblés pour passer au chapitre d'application de l'estimation par inversion de mesures expérimentales. Une analyse de l'impact de certaines approximations thermiques permet de voir les limites d'applications de la méthode, puis quelques estimations à partir de données réelles sont réalisées et analysées.

En conclusion, un bilan de cette technique avec ses points forts et ses limites, et une perspective de ce qu'il n'a pas été possible de faire et des suites probables de cette étude.

2 L'expérimental

2.1 Introduction

L'objet de cette étude repose sur le couplage entre la simulation et la partie expérimentale. L'estimation de données par la résolution d'un problème inverse nécessite d'une part, un modèle mathématique et numérique, représentatifs des conditions expérimentales et d'autre part, des mesures précises et sensibles aux paramètres à estimer. La connaissance et la maîtrise des données expérimentales est donc essentielle à la qualité de l'estimation. C'est pourquoi il est consacré un chapitre entier à cet aspect du travail de thèse, même s'il ne correspond qu'à quelques semaines de manipulations.

Dans le cas étudié, nous nous intéressons à l'extrusion d'un polymère dans une filière plate instrumentée. Au cours de ce chapitre, nous nous attacherons à décrire en plus amples détails la conception de cette filière par Karkri au cours de sa thèse [Karkri, 2004]. La caractérisation expérimentale des polymères utilisés y sera également décrite : elle fournit en effet des données cruciales pour la qualité de la modélisation et donc pour la simulation. Une grande partie des mesures et des photos présentée ici reprend – avec son accord – les résultats de Karkri [Karkri, 2004].

La première partie de ce chapitre traite de la filière elle-même et de ses dimensions.

La deuxième partie concerne l'instrumentation de la filière.

La troisième partie donne les propriétés physiques des éléments de la filière (à savoir le métal et l'isolant).

La quatrième partie s'intéresse à la caractérisation expérimentale des polymères. Nous nous intéressons particulièrement aux mesures de masse volumique, de capacité calorifique, de conductivité thermique et bien entendu aux mesures rhéologiques.

La cinquième partie de ce chapitre s'intéresse aux acquisitions avec la filière. Aux capteurs de pressions et thermocouples installés sur la filière s'ajoute une balance de précision. L'acquisition de l'ensemble des mesures est pilotée par informatique. Dans cette partie, nous indiquerons également comment a été conçue l'interface d'acquisition et les limites auxquelles nous nous sommes trouvés confrontés.

La sixième partie porte sur le post-traitement des données expérimentales. Elle explique l'analyse et le traitement des données, afin de pouvoir les utiliser au mieux lors de l'estimation de mesures.

Dans la septième et dernière partie, la filière est utilisée comme rhéomètre capillaire. Les résultats obtenus permettent de définir une exploitation maximale des mesures expérimentales pour l'estimation de mesures.

2.2 Structure de la filière

2.2.1 Idées de base

La filière est l'élément de la chaîne d'extrusion responsable de la mise en forme du matériau extrudé. Pour simplifier l'étude, une filière de section rectangulaire constante a été préférée (pas de changement de forme donc pas de problème de pertes de charge supplémentaires). Le changement de section nécessaire entre l'extrudeuse et la filière est assuré par un convergent en tête de filière. Ce dernier est circulaire du côté de l'extrudeuse et rectangulaire du côté de la filière.

2.2.2 Filière rectangulaire

La filière en elle-même est un bloc rectangulaire de $(200 \times 10^{-3}) \times (104 \times 10^{-3}) \times (40 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$, au milieu duquel se trouve le canal d'extrusion de dimensions $(200 \times 10^{-3}) \times (30 \times 10^{-3}) \times (2 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$, comme schématisée sur la figure 2.1.

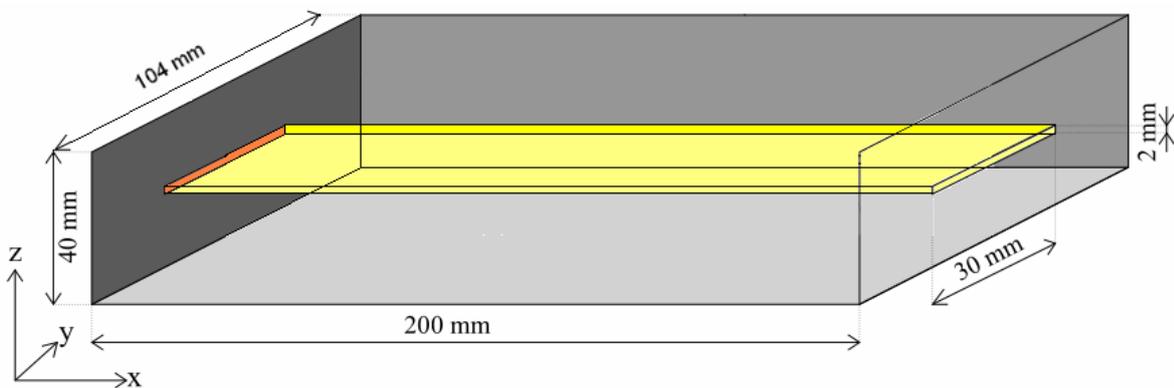


Figure 2.1 : Dimensions de la filière rectangulaire

2.2.3 Réalisation mécanique

En pratique, la filière est constituée de 4 blocs d'acier inox. A ces blocs sont ajoutées les chaufferettes qui vont permettre la régulation en température, et le convergent. Les chaufferettes sont situées au-dessus et en dessous de la filière, formant des plaques rectangulaires de dimensions $(240 \times 10^{-3}) \times (100 \times 10^{-3}) \times (10 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$, et en sortie de filière, plaque rectangulaire de $(104 \times 10^{-3}) \times (40 \times 10^{-3}) \times 10^{-3} \text{ m}^3$. On note que la longueur des chaufferettes inférieures et supérieures est plus grande que les dimensions préalablement données pour la filière. Cela vient

du fait que ces chauffettes ensèrent également le convergent qui prend sa place dans la filière. On ajoute à cela des plaques d'isolant situées sur les parois latérales de la filière.

Les différents éléments de la filière sont montrés en figure 2.2. Nous rappelons que cette photo comme un grand nombre de figures montrant les éléments de la filière, est issue de la thèse de Karkri [Karkri, 2004]. La chauffette ajoutée plus tard à l'arrière n'est pas représentée ici. La réalisation de la filière s'est faite pour moitié au Laboratoire de Thermocinétique de Nantes et pour moitié dans l'entreprise Kayme. La manière de procéder a été quelque peu différente, ce qui explique pourquoi on a un bloc supérieur et 2 blocs inférieurs.

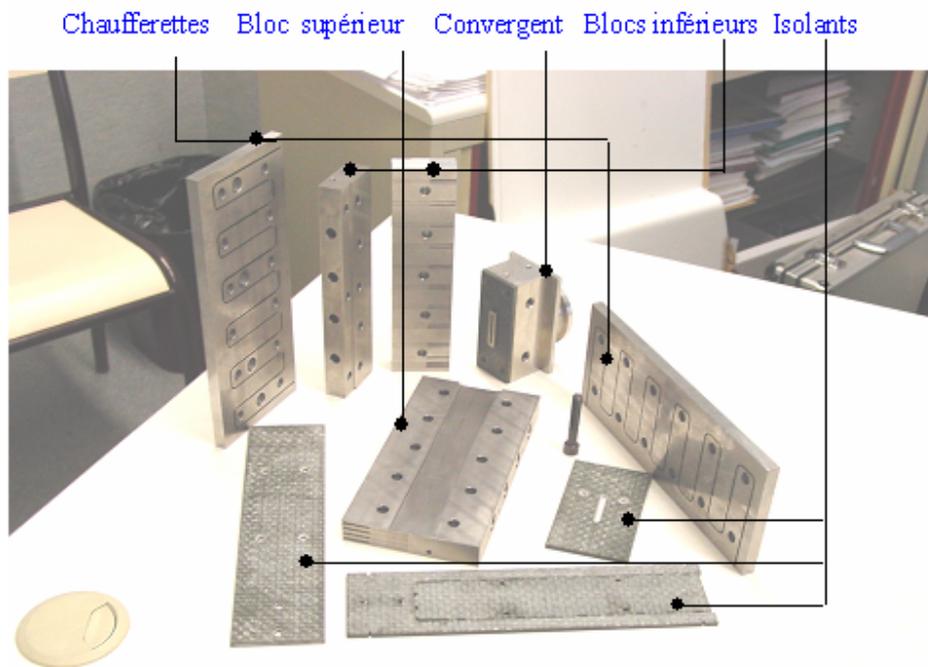


Figure 2.2: Les différents éléments constitutifs de la filière, Laboratoire de Thermocinétique de Nantes

L'agencement des différentes pièces est représenté sur la figure 2.3.

En définitive, la filière complète a donc pour dimensions $(240 \times 10^{-3}) \times (108 \times 10^{-3}) \times (60 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$.

La filière présente alors l'aspect décrit par la figure 2.4. En plus des plaques de résine époxy apposées le long des parois latérales, on ajoute une couche d'un autre isolant poreux (« foam glass » ou mousse expansée) de 30 mm d'épaisseur. La vue de dessus de la filière ainsi isolée est représentée en figure 2.5.

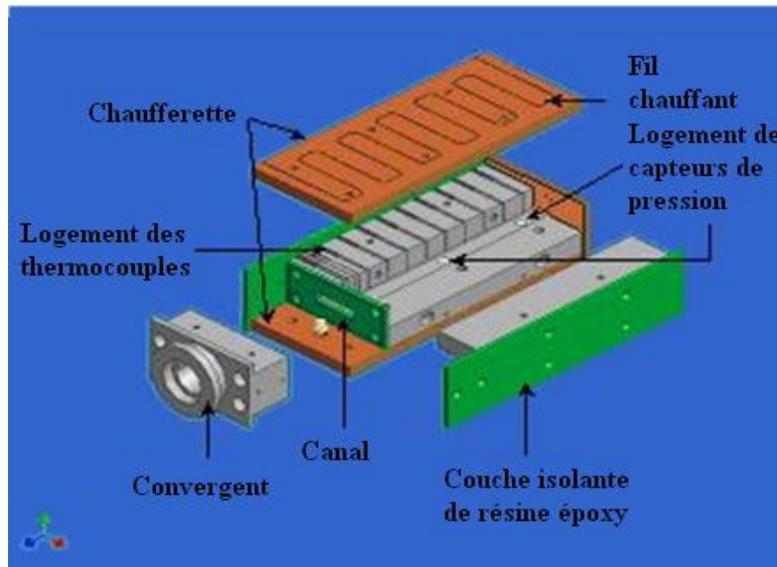


Figure 2.3 : Dessin éclaté de la filière d'extrusion

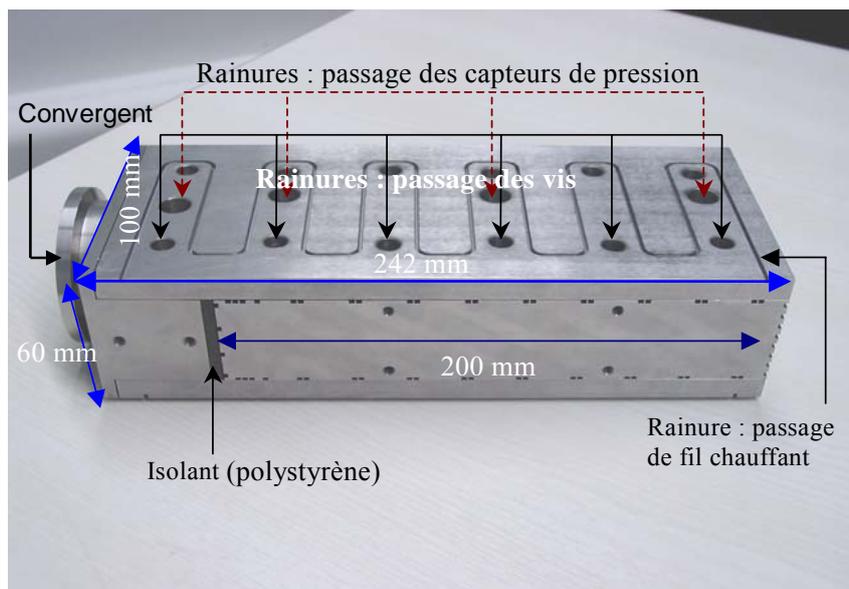


Figure 2.4 : Filière non instrumentée, sans l'isolant recouvrant les parois latérales

L'objectif de la conception de cette filière est l'obtention de données expérimentales. Nous allons donc nous intéresser à son instrumentation.

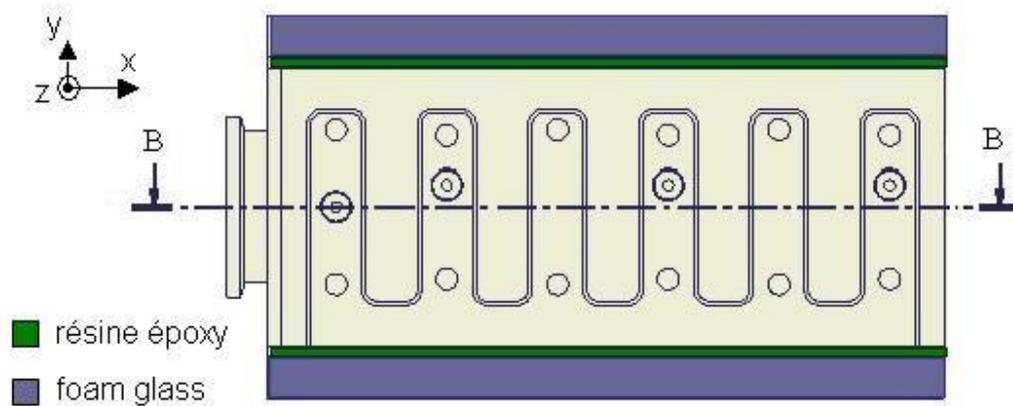


Figure 2.5 : Vue de dessus de la filière isolée

2.3 Instrumentation

2.3.1 Les capteurs de la filière

Nous pouvons considérer deux « phénomènes » physiques dans la filière : l'écoulement et le transfert thermique.

La connaissance du champ de vitesse dans la filière caractériserait parfaitement l'écoulement. Malheureusement la mesure de la vitesse locale est très difficile d'accès. Pour obtenir un maximum d'informations sur l'écoulement, nous avons donc mesuré le débit au moyen d'une balance programmable et la pression via des capteurs de pression. Ces derniers sont situés sur le plan médian de la filière (correspondant à la coupe (B-B) indiquée sur la figure 2.5 et représentée en figure 2.6).

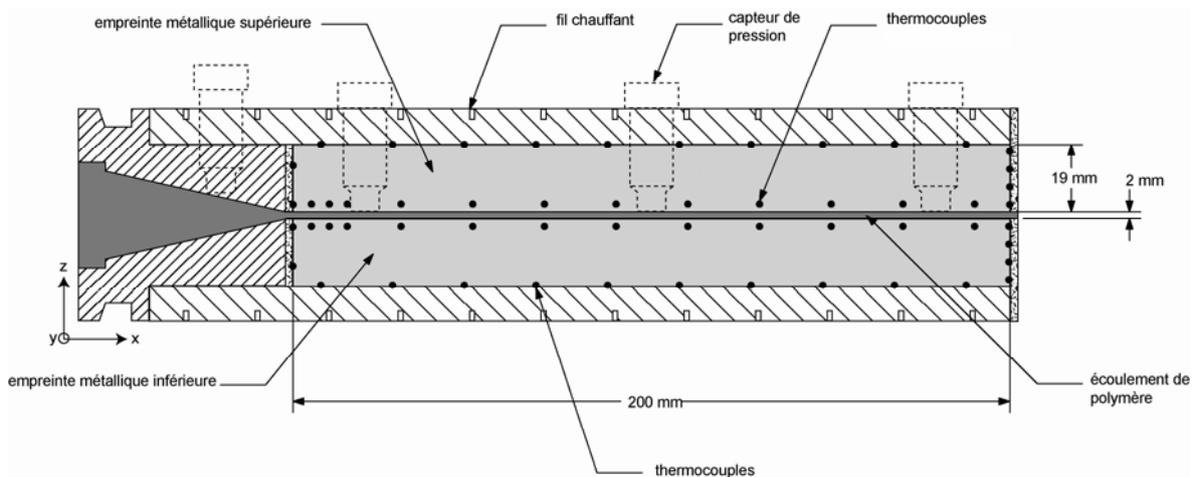


Figure 2.6 : coupe (B-B) transversale de la filière et position des capteurs de pression et des thermocouples.

Pour suivre les transferts thermiques, la filière a été équipée de nombreux thermocouples. Leur répartition est illustrée sur la figure 2.6.

Si on excepte la partie de la filière relative au convergent, on constate que les thermocouples ont été placés en périphérie du système : aux interfaces filière/chaufferettes, autour de l'entrée du polymère, et le long du canal d'extrusion, à 1 mm de l'interface acier/canal. Ces derniers étaient destinés à alimenter la méthode inverse développée par Karkri.

2.3.2 Les thermocouples

2.3.2.1 Les thermocouples à 1 mm de l'interface acier/canal d'extrusion

Ils sont au nombre de 12 par interface. On les trouve à 1 mm des interfaces acier/canal d'extrusion, ce qui leur confère une ordonnée de $(18 \text{ et } 22) \times 10^{-3} \text{ m}$, si l'ordonnée 0 est prise à l'interface chaufferette inférieure/filière. Les 2×12 thermocouples sont positionnés de façon symétrique autour du canal d'extrusion aux abscisses suivantes : $(5, 10, 15, 30, 50, 70, 90, 110, 130, 150, 170 \text{ et } 190) \times 10^{-3} \text{ m}$ en situant l'origine des abscisses à l'interface convergent/filière. Le référentiel est indiqué en rouge sur la figure 2.7 pour ne pas affecter la lisibilité de la figure 2.6.

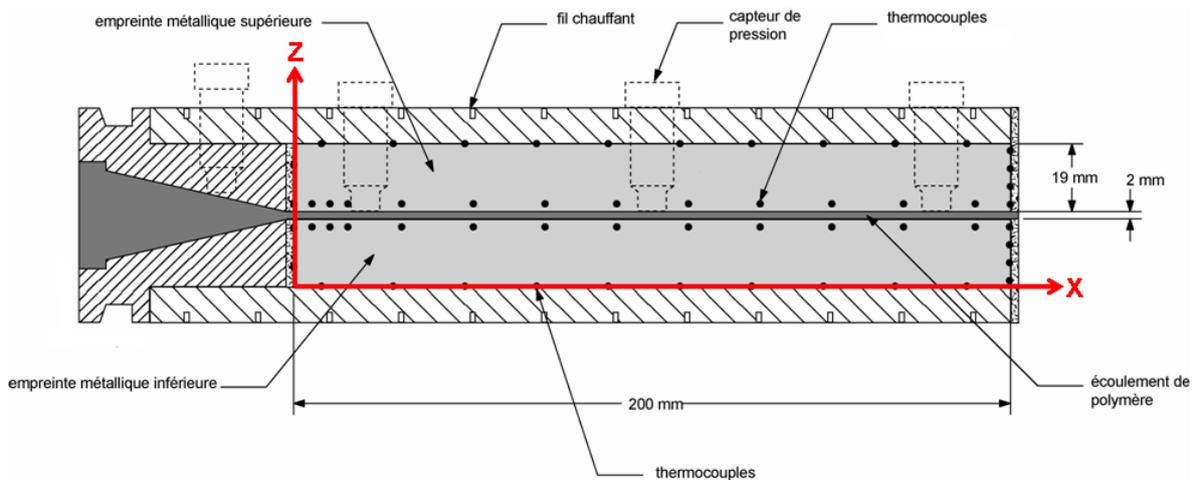


Figure 2.7 Axes et référentiel dans la coupe (B-B)

2.3.2.2 Les thermocouples aux périphéries supérieures et inférieures

Ils sont au nombre de 10 par interface chaufferettes/filière. On les trouve donc aux ordonnées $(0 \text{ et } 40) \times 10^{-3} \text{ m}$. Eux aussi sont positionnés symétriquement aux abscisses suivantes : $(7.5, 27.5, 47.5, 67.5, 87.5, 107.5, 127.5, 147.5, 167.5, 187.5) \times 10^{-3} \text{ m}$. Ils permettent de connaître la température imposée en périphérie du système. Deux d'entre eux (c'est à dire un par interface) sont reliés chacun à un régulateur PID afin de réaliser la régulation thermique.

En figure 2.8, on peut voir l'usinage d'un bloc de la filière pour l'installation des thermocouples autour du canal d'extrusion et à l'interface filière/chaufferette.

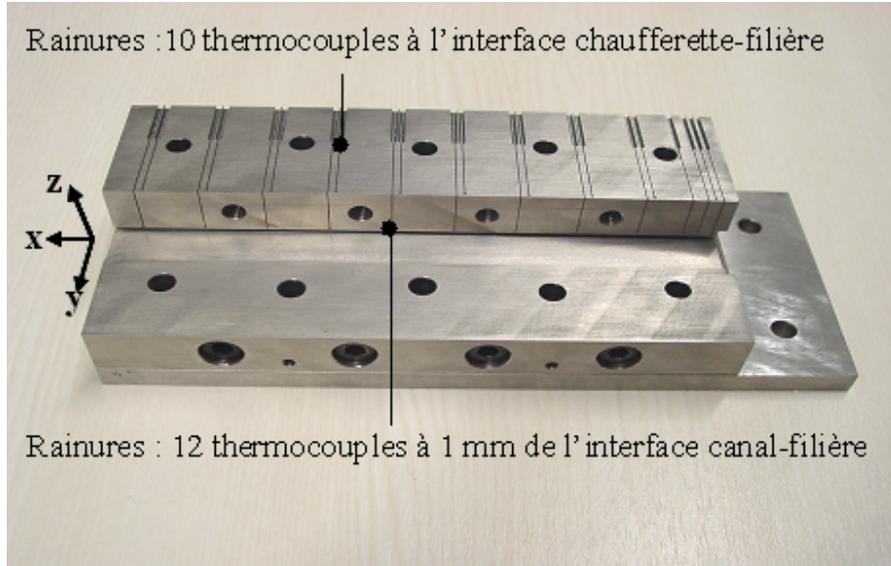


Figure 2.8 : Position des thermocouples dans un bloc de la filière

2.3.2.3 Les thermocouples en entrée de filière

Il y en a 2x2, répartis autour de l'entrée du canal d'extrusion. Placés à l'abscisse 0, ils ont pour ordonnées $(2.5, 13.5, 26.5 \text{ et } 37.5) \times 10^{-3}$ m. La figure 2.9 indique où ils sont placés dans la filière.

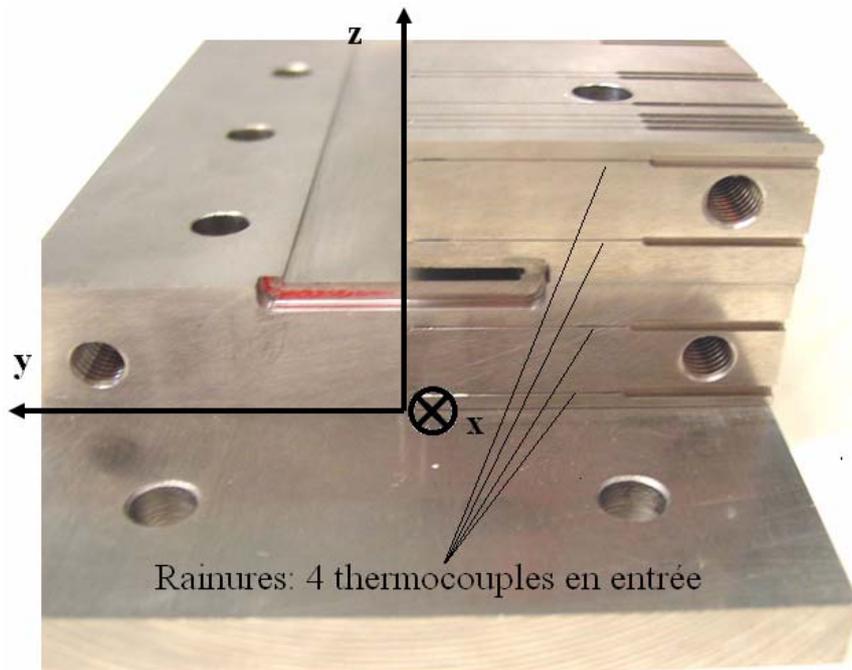
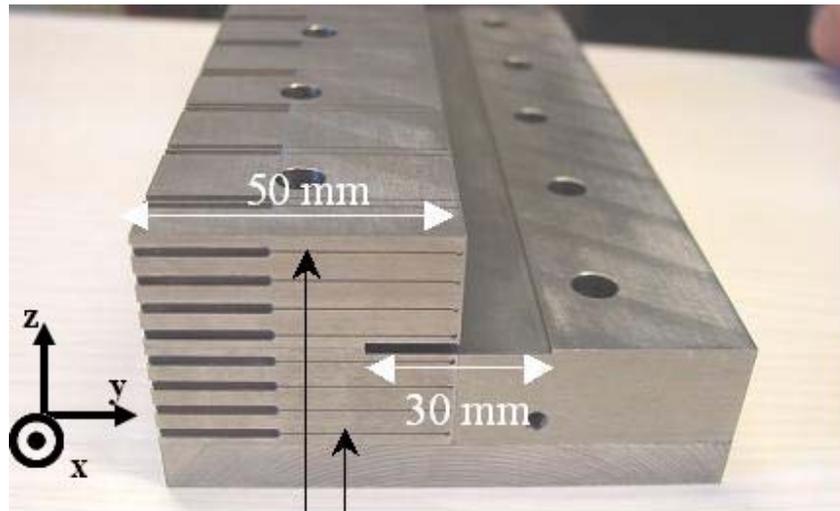


Figure 2.9 : Thermocouples en entrée de filière

2.3.2.4 Les thermocouples en sortie de filière

Ils sont 2×4 répartis de part et d'autre du canal d'extrusion en sortie de filière. Leur abscisse est donc de 0.2 m. On peut trouver les thermocouples aux ordonnées suivantes : (2.5, 7.5, 12.5, 17.5, 22.5, 27.5, 32.5 et 37.5)×10⁻³ m. La figure 2.10 montre comment la filière a été usinée pour l'installation de ces thermocouples.



Rainures: 8 thermocouples en sortie

Figure 2.10 : Thermocouples en sortie de filière

2.3.2.5 La connectique des thermocouples

Nous avons en tout 56 thermocouples qu'il faut relier à un système d'acquisition électronique. Lors de la conception de la filière, la connectique a été installée sur le flanc « droit » de la filière si on regarde de l'entrée vers la sortie. La filière avec la connectique et l'isolant est dessinée sur la figure 2.11.

2.3.2.6 Soudure et positions réelles des thermocouples

L'instrumentation thermique est réalisée avec des thermocouples Chromel-Alumel de type K, de 50 µm de diamètre (la plage de température couverte va de -270°C à 1250°C). Ils passent par des rainures de diamètre 0.4 mm, représentées sur les figures 2.8 à 2.10, et sont soudés par points dans des trous d'1 mm de diamètre. Différentes photos (Annexe 4 de la thèse de Karkri) permettent d'évaluer avec une précision submillimétrique la position des thermocouples. Il apparaît alors que les positions réelles des thermocouples diffèrent quelque peu des positions théoriques données plus haut. En pratique, les positions théoriques sont valables au dixième de millimètre près.

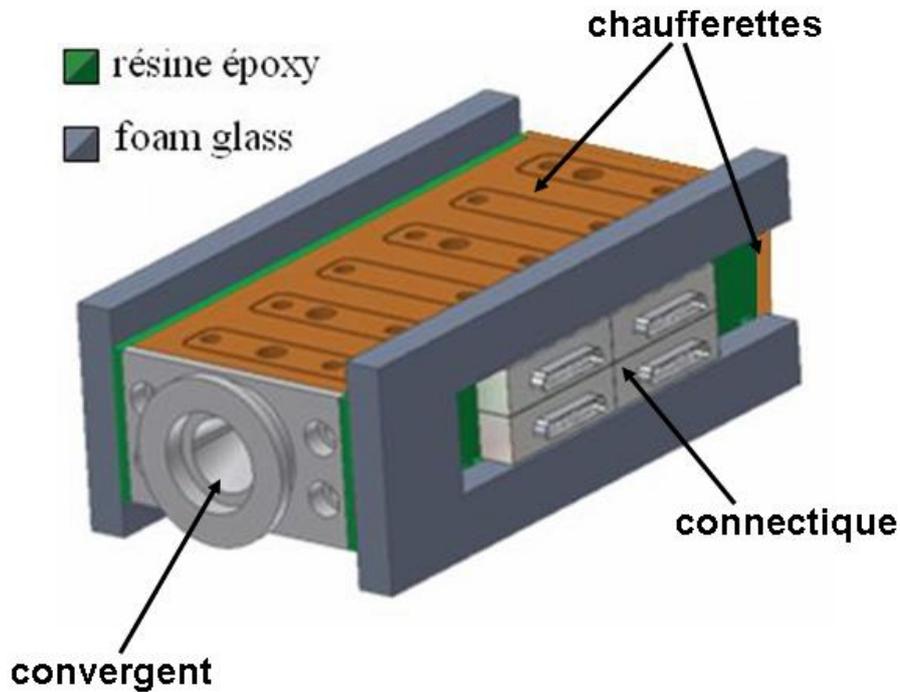


Figure 2.11 : Filière avec connectique

2.3.3 Les capteurs de pression

On remarque sur les figures 2.4 à 2.6 qu'il y a quatre emplacements possibles pour des capteurs de pression. Pour le moment, seuls deux d'entre eux sont utilisés : celui qui se trouve à 20 mm de l'entrée de la filière et celui qui se trouve à 20 mm de la sortie. Les deux logements supplémentaires (au niveau du convergent et au centre de la filière) pourront être utilisés pour améliorer l'évaluation de la différence de pression entre les extrémités de la filière.

Les capteurs de pression employés ont été choisis spécialement pour les mesures concernant les matières plastiques fondues : ils peuvent supporter des températures jusqu'à 400°C et la gamme de pression va de 0 à 517×10^5 Pa. Leur précision est de $\pm 0.5\%$ de la pleine échelle.

2.4 Propriétés physiques des éléments de la filière

La filière est constituée de 4 blocs d'acier. A ceci s'ajoutent les plaques de résine époxy et les plaques de foam glass. Nous allons donc donner leurs caractéristiques physiques moyennes : tableaux 2.1 et 2.2.

Tableau 2.1: Caractéristiques de l'acier de la filière

caractéristique	acier
Masse volumique (kg.m^{-3})	7800
Capacité calorifique ($\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$)	460
Conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	16

Tableau 2.2: Conductivités thermiques des isolants utilisés dans la filière

	résine époxy	foam glass
Conductivité thermique ($\text{W. m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	0.3	0.04

2.5 Caractérisation des polymères étudiés

Au cours de notre étude, nous avons étudié 2 polymères : un polyéthylène basse densité (PEBD) référencé Dowlex® 2042E et un polystyrène (PS) référencé Arkema Lacqrene® 1070. La caractérisation complète n'a toutefois pu être faite que pour le PEBD.

2.5.1 Mesures de masses volumiques

La masse volumique intervient à la fois dans les équations de Navier-Stokes et dans celle l'énergie. Sa valeur peut varier de façon importante en fonction des conditions de pression et de température. Cette variation s'exprime au travers des diagrammes PVT ou PpT comme dans la figure 2.12. Cette figure a été réalisée à partir des données tirées de Moldflow pour un PEBD Dowlex 1045 A, grade injection. Les valeurs indiquées dans ce graphique ne sont donc pas exactement celles correspondant à notre PEBD (qui est un Dowlex 2042 E, grade extrusion). Néanmoins l'allure et l'ordre de grandeur sont similaires.

Dans le modèle choisi et lors des simulations réalisées, nous avons volontairement négligé les variations de la masse volumique dans un souci de simplification. Néanmoins pour nous rapprocher de la réalité expérimentale, les masses volumiques ont été mesurées aux températures expérimentales. On voit en effet sur le diagramme de la figure 2.12 que la masse volumique varie de façon importante (0.2 g.cm^{-3}) entre la température ambiante et la température de travail (autour de 473.15 K). En revanche, entre la pression atmosphérique et les $2 \times 10^7 \text{ Pa}$ mesurés dans le canal d'extrusion, la variation de la masse volumique est inférieure à 0.05 g.cm^{-3} (variation entre la courbe bleue foncée et la courbe verte). Aussi avons-nous négligé la différence.

La mesure de masse volumique a été effectuée à l'aide d'un plastomère d'extrusion schématisé en figure 2.13. En pratique, on mesure la masse du polymère extrudé sous l'action d'un poids de 5310 g à travers une filière cylindrique de $2.2 \times 10^{-3} \text{ m}$ de diamètre, à température constante.

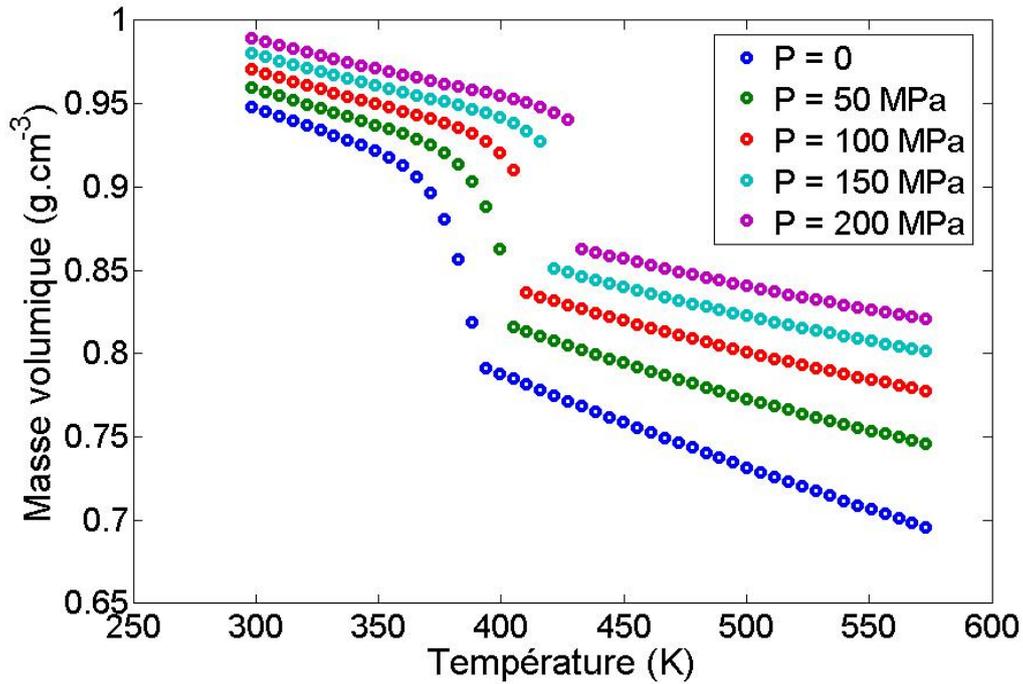


Figure 2.12 : Evolution de la masse volumique du PEHD avec température à différentes pressions.

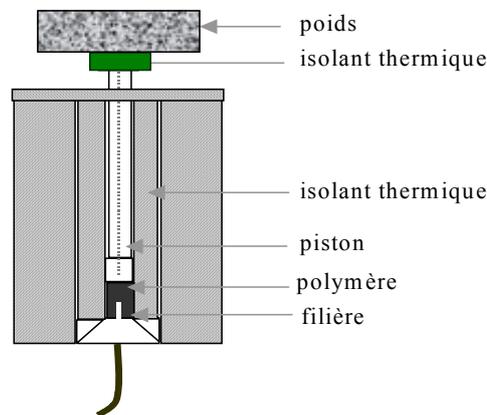


Figure 2.13 : Schéma de l'appareil de mesure de la masse volumique des polymères fondus.

Les résultats obtenus par M. Karkri pour le polyéthylène sont reportés dans le tableau 2.3. La balance est précise au mg, mais la température à l'ordre du degré. Quant au volume, il est estimé visuellement par le biais de repère sur l'appareil de mesure. On estime que la précision de la mesure est de l'ordre de 2 centièmes.

Tableau 2.3: Mesures de masses volumiques du PEBD à pression atmosphérique.

essais	masse volumique (g.cm^{-3}) à 473.15 K	masse volumique (g.cm^{-3}) à 493.15 K
1	0.78	0.72
2	0.78	0.72
3	0.77	0.72
<i>moyenne</i>	<i>0.78 ±0.02</i>	<i>0.72 ±0.02</i>

2.5.2 Mesures de propriétés thermiques

2.5.2.1 Mesures de la conductivité thermique

Nous reprenons ici les résultats obtenus par M. Karkri. Ce dernier a utilisé une méthodologie et un appareil développé au laboratoire de Thermocinétique [Jurkowski, 1997]. Ce système de mesure a été développé spécifiquement pour mesurer la conductivité thermique des polymères dans les procédés de mise en forme. En pratique, l'appareil est constitué d'un moule d'injection dans lequel est intégré le dispositif dit « de la plaque calorimétrique », comme illustré en figure 2.14.

Comme la diffusivité thermique de la plaque centrale est de l'ordre de 100 fois supérieure à celle du polymère, on peut considérer la température uniforme le long de l'épaisseur de la plaque. On obtient alors le flux thermique de la plaque vers l'échangeur par bilan enthalpique. L'application d'une technique inverse [Jurkowski et al., 1997] permet alors de déterminer la conductivité du polymère. Cette méthode et le conductivimètre associé ont fait l'objet d'un brevet [Jurkowski et al., 1992].

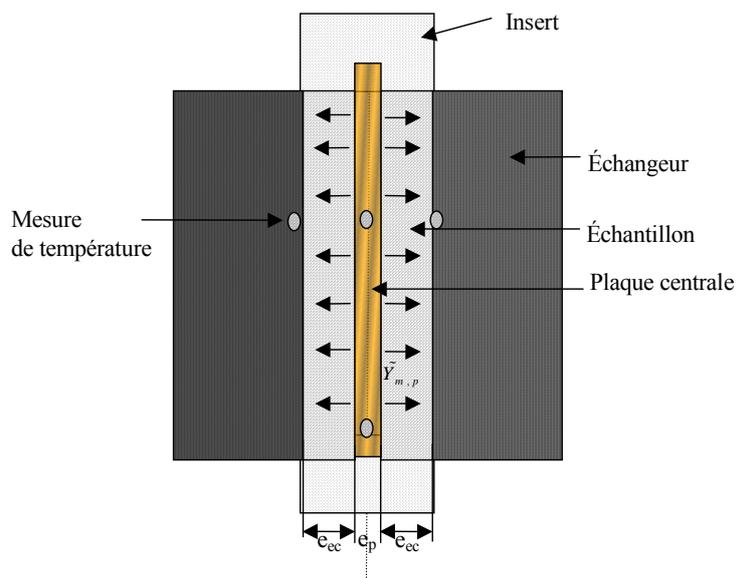


Figure 2.14 : Schéma de principe de la plaque calorimétrique

Le conductivimètre est équipé de thermocouples, de capteurs de pression et de capteurs de flux afin de nourrir la technique inverse. Ceux-ci sont implantés dans la plaque métallique et dans la cavité moulante. Le moule ainsi obtenu est représenté sur la figure 2.15.

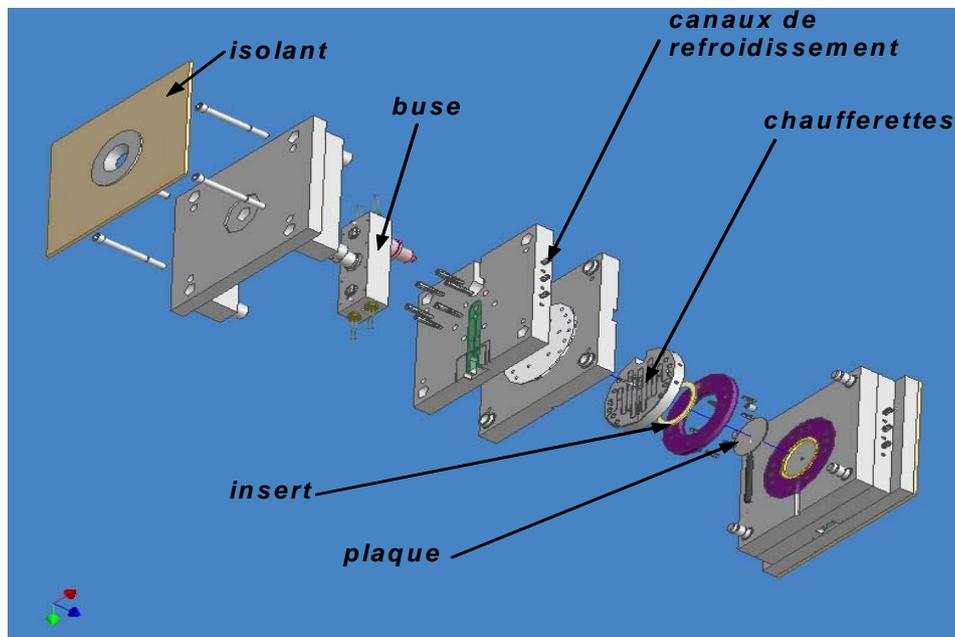


Figure 2.15 : Dessin du conductivimètre en ligne, [Karkri, 2004]

La variation étant assez faible avec la température [Karkri, 2004], nous choisissons une valeur unique de conductivité, donnée dans le tableau 2.4.

Tableau 2.4: conductivité thermique du PEBD

polymère	PEBD
conductivité ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	0.30

2.5.2.2 Mesures de la capacité calorifique

La capacité calorifique a été déterminée par Calorimétrie Différentielle à Balayage (en anglais DSC pour Differential Scanning Calorimetry) à compensation de puissance [Elégant et al., Techniques de l'Ingénieur]. Cet appareil permet l'analyse du comportement thermique des matériaux tels les changements de phase. L'appareil est constitué d'un four, dans lequel il y a deux creusets. L'un d'entre eux contient un échantillon de référence (c'est le creuset de référence), tandis qu'on met le polymère étudié (ou n'importe quel matériau) dans l'autre (figure 2.16.). Chaque creuset du four est équipé d'un thermocouple qui enregistre l'évolution de température lorsque le four chauffe. Les deux creusets n'étant pas équivalents (puisque l'un contient l'échantillon de référence et l'autre contient du polymère), on observe une différence de température qui est enregistrée par l'ordinateur. Connaissant la masse volumique du polymère et la vitesse de chauffage, on peut en déduire la capacité calorifique.

L'évolution de la capacité calorifique par rapport à la température est approximativement linéaire lorsqu'on est suffisamment loin des zones de changement de phase (figure 2.17). La pente n'est pas aussi faible qu'on pourrait le souhaiter pour notre hypothèse de valeur constante, néanmoins ce premier travail devait commencer par une simplification des hypothèses afin de mettre en place la méthode inverse. Par conséquent, nous prendrons une capacité calorifique constante à la valeur indiquée dans le tableau 2.5, prise pour une température de 473.15 K.

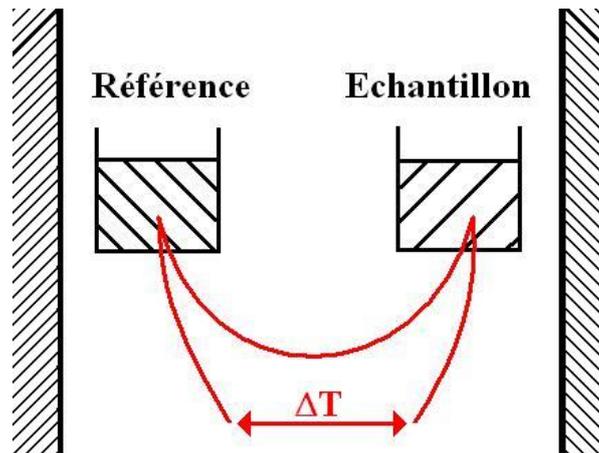


Figure 2.16 : Schéma explicatif du fonctionnement de la DSC.

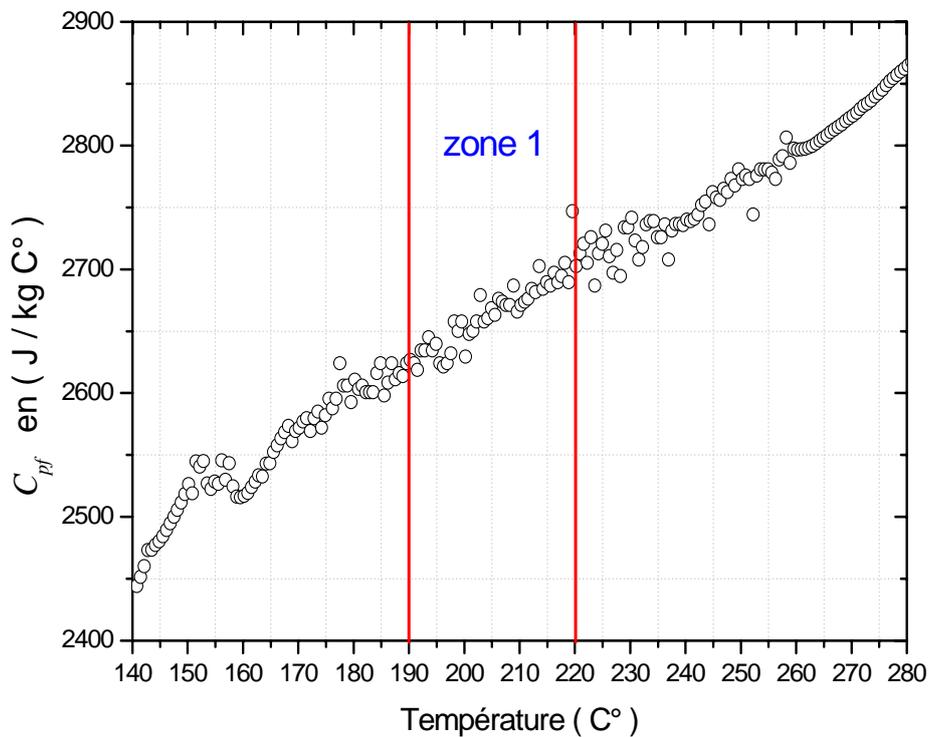


Figure 2.17 : Capacité Calorifique du PEBD en fonction de la température.

Tableau 2.5: conductivité du PEBD

polymère	PEBD
capacité calorifique ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	2650

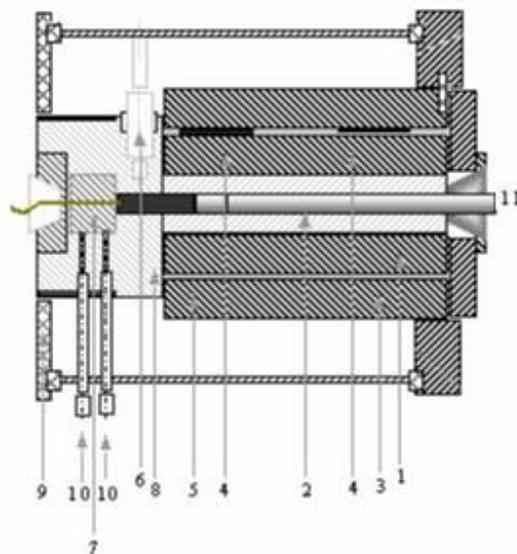
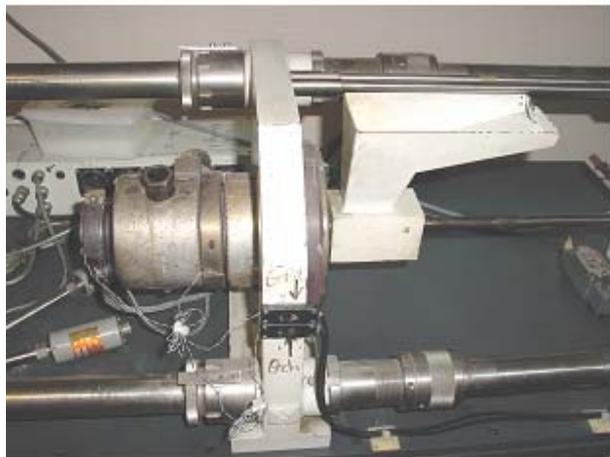
2.5.3 Rhéologie

La rhéologie est un point clef de notre étude, attendu qu'on cherche à l'estimer par technique inverse. Afin d'avoir une référence expérimentale, nous avons procédé à différentes mesures rhéologiques qui nous permettront de valider les résultats de notre estimation. Rappelons que la viscosité est définie par le rapport de la contrainte de cisaillement par le taux de cisaillement.

Pour les mesures, nous avons principalement utilisé un rhéomètre capillaire et un rhéomètre cône-plan. Pour le polyéthylène, des mesures à fort taux de cisaillement ont également été conduites à l'aide d'une buse rhéométrique, dont le principe rejoint celui du rhéomètre capillaire, mais qui permet d'imposer des débits et donc des taux de cisaillement plus élevés.

2.5.3.1 Rhéomètre capillaire

Le principe de la mesure repose sur l'écoulement de Poiseuille dans un capillaire. On extrude le polymère, placé dans un réservoir, au moyen d'un piston se déplaçant à vitesse constante (on parle dans ce cas de rhéomètre à vitesse imposée) réglable. A l'aide d'un capteur de pression situé en entrée de la filière, on obtient la pression d'extrusion. Le système utilisé, situé à l'IUT de Nantes est illustré par la figure 2.18.



(1) Chambre, (2) Cylindre, (3) Chauffage (zone 1), (4) sonde de température, (5) Chauffage (zone 2), (6) Capteur de pression, (7) Capillaire, (8) Adaptateur du capillaire, (9) Chauffage (zone 3), (10) Thermocouple, (11) Piston.

Figure 2.18 : rhéomètre capillaire de l'IUT de Nantes, à gauche en photo, à droite le schéma explicatif.

En faisant l'hypothèse d'une condition d'adhésion parfaite à la paroi, les données de vitesse de piston permettent le calcul d'un gradient de vitesse apparent :

Pour un fluide newtonien dans une conduite cylindrique de rayon R , la vitesse V ne dépend que de r et s'exprime de la sorte :

$$V(r) = 2\bar{V} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \text{ avec } \bar{V} \text{ la vitesse moyenne.}$$

Sachant que le débit Q vaut $Q = \pi R^2 \bar{V}$, on déduit une autre expression de V :

$$V(r) = 2 \frac{Q}{\pi R^2} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

donc

$$\frac{dV(r)}{dr} = 2 \frac{Q}{\pi R^2} \frac{-2r}{R^2}$$

Ce qui nous permet de déduire le taux de cisaillement apparent aux parois de notre cylindre, et donc du rhéomètre :

$$\dot{\gamma}_{app} = \frac{4Q}{\pi R_c^3} \tag{2.1}$$

Avec	$Q = \pi \cdot V \cdot R_{res}^2$	débit
	R_c	rayon du capillaire
	R_{res}	rayon du réservoir
	V	vitesse du piston

Les mesures de pression permettent le calcul d'une contrainte apparente :

$$\tau_{app} = \frac{\Delta P \cdot R_c}{2 \cdot L_c} \tag{2.2}$$

Avec	L_c	longueur du capillaire
	P	pression mesurée en entrée de filière

Bien sûr, le taux de cisaillement n'est pas homogène dans le capillaire (maximal à la paroi et nul sur l'axe de symétrie) et cette méthode pose de sérieux problèmes d'interprétations dans le cas des matériaux hétérogènes. En revanche, la géométrie et la sollicitation sont proches de celles impliquées dans les procédés de mise en forme des matériaux ; la corrélation avec les informations recherchées est dès lors immédiate. De plus, cette méthode permet de réaliser des courbes d'écoulement sur une large gamme de taux de cisaillement, ce qui contribue à en faire une méthode couramment utilisée dans l'industrie.

Néanmoins lorsqu'on réduit le diamètre du capillaire ou qu'on augmente le débit afin d'augmenter le gradient de vitesse, le phénomène d'autoéchauffement par dissipation visqueuse n'est plus négligeable.

Enfin cette méthode nécessite l'emploi de 2 types de corrections :

- la correction de Bagley** : le passage d'un réservoir de grand diamètre à un capillaire de faible section provoque une réorientation des lignes de courant. Cette réorientation est considérée comme équivalente à une prolongation virtuelle de la filière dans le réservoir, ce qui se traduit par une perte de charge en entrée. En pratique, cela revient à dire que la pression mesurée en entrée de la filière (P) est la somme de la perte de charge dans le capillaire (P_c) et de la perte de charge en entrée de celui-ci (P_e) : $P = P_c + P_e$. Afin d'évaluer cette perte de charge en entrée, on trace alors la pression en fonction du rapport L_c/R_c pour différents débits, comme illustré sur la figure 2.19. L'extrapolation à longueur de filière nulle donne l'évaluation de P_e ou de la correction de Bagley e , définie comme l'excédent de rapport longueur sur diamètre L_c/R_c dans le réservoir. En corrigeant la pression mesurée de la sorte (ou de façon équivalente la longueur de la filière), on obtient les valeurs réelles de la contrainte au lieu des valeurs apparentes indiquées précédemment.

$$\tau = \frac{(P - P_e) \cdot R_c}{2 \cdot L_c} = \frac{P}{2 \cdot \left(\frac{L_c}{R_c} + e \right)} \quad (2.3)$$

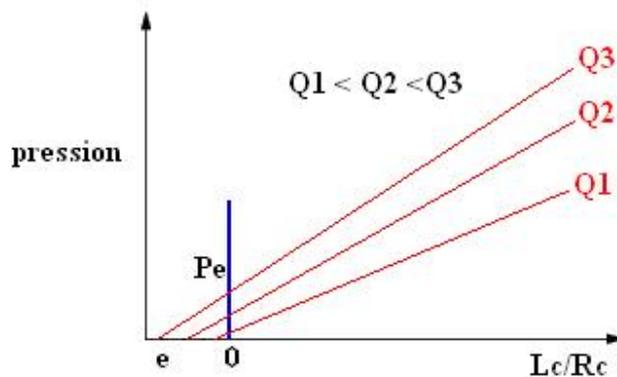


Figure 2.19 : Correction de Bagley

- la correction de Rabinovitch** : l'expression (2.1) est valable dans le cas d'un fluide newtonien (écoulement de Poiseuille). Mais les polymères le sont rarement en raison de leur structure. La correction de Rabinovitch porte donc sur le gradient de vitesse apparent. Elle consiste à faire l'hypothèse d'une rhéologie pseudoplastique locale, c'est à dire que la tangente à la loi de l'écoulement suit une loi puissance $\tau = K \cdot \dot{\gamma}_{app}^m$.

Pour chaque point de mesure, on va alors calculer ce n local et en déduire la valeur réelle du taux de cisaillement :

$$\dot{\gamma} = \frac{3m+1}{4m} \dot{\gamma}_{app} \quad (2.4)$$

avec

$$m = \frac{\partial(\ln \tau)}{\partial(\ln \dot{\gamma}_{app})} \quad (2.5)$$

En pratique m est obtenu par dérivation numérique entre deux points de mesures successifs.

[Carrot et al., techniques de l'ingénieur]

2.5.3.2 Rhéomètre cône-plan

Le système est constitué d'un disque plan de rayon R et d'un cône d'angle α de quelques degrés (figure 2.20). Le cisaillement est obtenu en appliquant une vitesse de rotation Ω constante au plan. Le taux de cisaillement est alors donné par l'expression suivante :

$$\dot{\gamma} = \frac{\Omega}{\tan \alpha} \quad (2.6)$$

La contrainte de cisaillement τ et le couple appliqué Γ sont liés par la relation suivante :

$$\Gamma = \frac{2\pi \cdot R^3}{3} \tau(\dot{\gamma}) \quad (2.7)$$

Précisons que ce rhéomètre est surtout utile pour de faibles valeurs de cisaillement. En effet, pour de forts gradients de vitesse (supérieurs à 10 s^{-1}), il y a risque d'éjection de matière ou d'existence d'instabilités.

[Carrot et al., techniques de l'ingénieur]

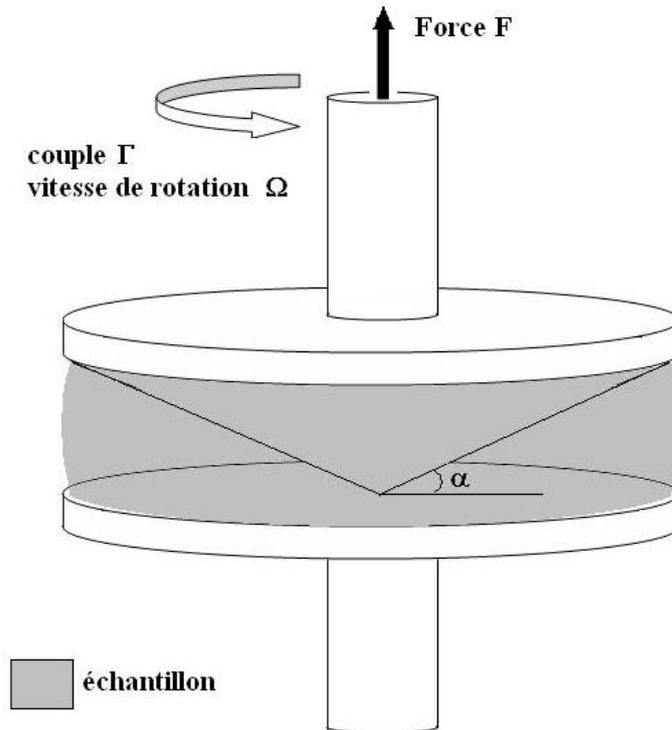


Figure 2.20 : schéma de fonctionnement d'un rhéomètre cône-plan.

2.5.3.3 Loi de Cox Merz

La difficulté se trouve maintenant dans le rassemblement des données. En effet, le rhéomètre capillaire permet d'effectuer des mesures en régime permanent tandis que le rhéomètre cône-plan procède en régime dynamique. On va alors utiliser le formalisme complexe pour tenter de réconcilier ces deux approches.

Lors d'une mesure en oscillation, le déplacement γ imposé génère une contrainte résultante τ dont l'amplitude varie sinusoïdalement avec un déphasage δ par rapport au déplacement :

$$\gamma = \gamma_0 \cdot \cos(\omega t) \quad (2.8)$$

$$\tau = \tau_0 \cdot \cos(\omega t + \delta) \quad (2.9)$$

τ_0 et γ_0 sont respectivement les amplitudes maximales de la contrainte (Pa) et du déplacement (sans unité). ω s'exprime en $\text{rad}\cdot\text{s}^{-1}$.

En appliquant le formalisme complexe, on a alors :

$$\gamma^* = \gamma_0 \cdot e^{i\omega t} \quad (2.10)$$

$$\tau^* = \tau_0 \cdot e^{i(\omega t + \delta)} \quad (2.11)$$

$$\mu^* = \frac{\tau^*}{\dot{\gamma}^*} = \frac{G^*}{i\omega} = \mu' - i\mu'' \quad (2.12)$$

où G^* est le module complexe de rigidité du polymère, μ' et μ'' sont les composantes respectives réelle et imaginaire de la viscosité complexe μ^* .

L'intérêt de ce modèle réside dans le fait que les composantes réelle et imaginaire G' et G'' de G sont les valeurs obtenues expérimentalement ainsi que le déphasage δ . Si G''/G' est constant lorsqu'on augmente la vitesse angulaire, alors le matériau est chimiquement stable et on peut appliquer la relation empirique de Cox Merz :

$$|\mu^*(\omega)| = \sqrt{\mu'^2(\omega) + \mu''^2(\omega)} = \mu(\dot{\gamma}) \quad \text{pour} \quad \dot{\gamma} = \omega \quad (2.13)$$

[Mesures des caractéristiques rhéologiques des polymères thermoplastiques, CREPIM]

2.5.3.4 Mesures

A l'aide de ces différents rhéomètres, M. Karkri a réalisé des mesures sur une large gamme de cisaillements pour le polyéthylène et nous avons de notre côté fait quelques mesures sur le polystyrène. Ce dernier a toutefois présenté un caractère non newtonien plus difficile d'accès que le polyéthylène et nos mesures au rhéomètre capillaire se sont révélées décevantes. Nous obtenons tout de même les graphes représentés en figures 2.21, 2.22 et 2.23.

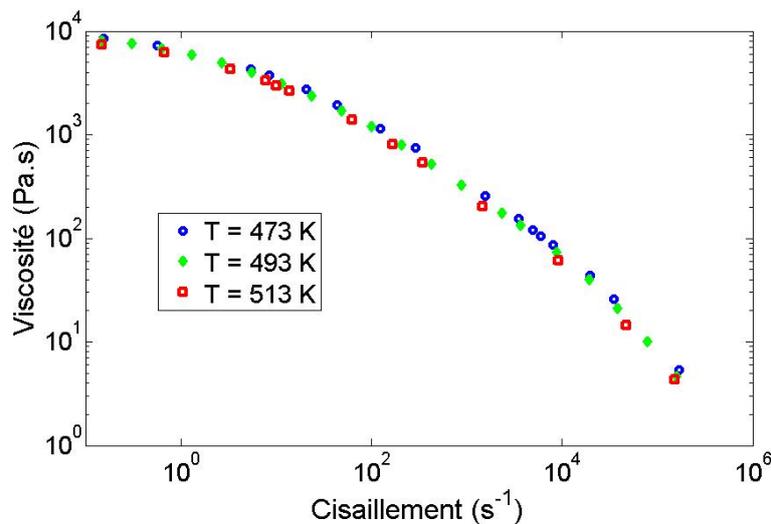


Figure 2.21 : rhéologie du PEBD

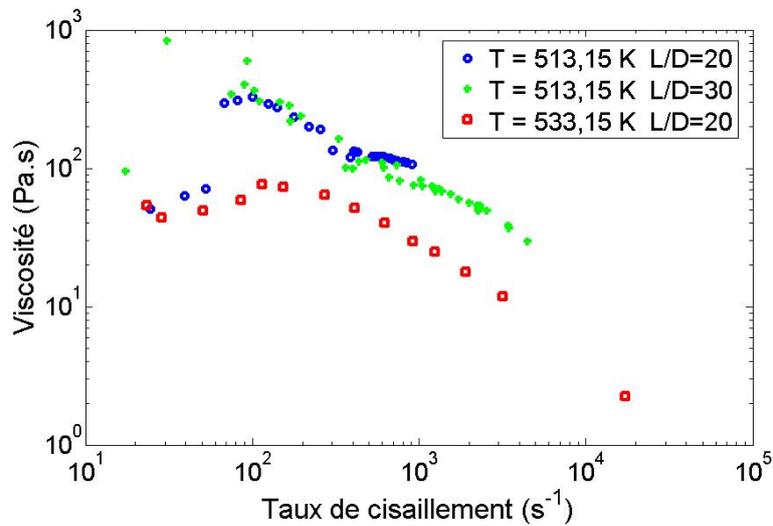


Figure 2.22 : Mesures rhéologiques du PS obtenues avec le rhéomètre capillaire pour 2 rapports (Longueur de filière)/(Diamètre de filière), et 2 températures. La correction de Bagley n'a pas été employée ici.

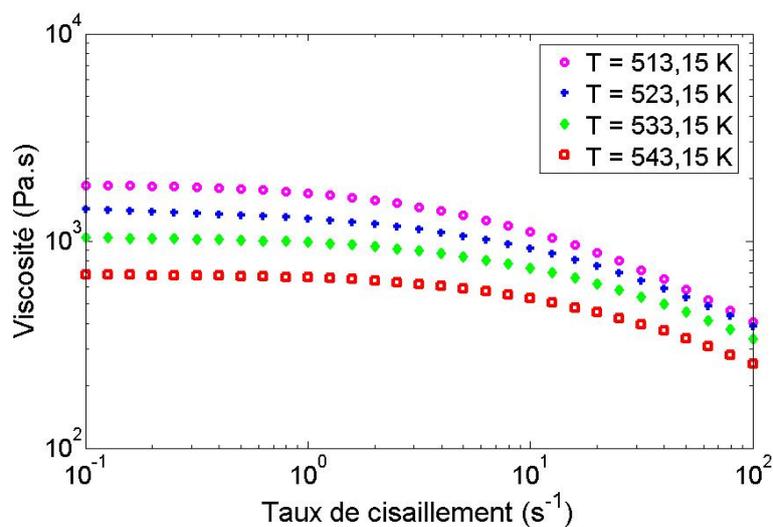


Figure 2.23 : Mesures rhéologiques du PS obtenues avec le rhéomètre cône-plan après utilisation de la loi de Cox Merz, pour 4 températures différentes.

Ne disposant pas d'un nombre suffisant de filières pour le rhéomètre capillaire avec lesquelles nous parvenions à obtenir des mesures (les premiers tests avec un rapport longueur sur diamètre de filière de 40 n'ont rien donné : pression trop élevée, instabilité des mesures, etc...), nous nous sommes trouvés dans l'impossibilité d'appliquer la correction de Bagley. Sur la figure 2.24 nous avons réuni les courbes d'écoulement obtenues pour le rhéomètre capillaire et pour le

rhéomètre cône-plan. Malgré des mesures au rhéomètre capillaire pas très régulières, on observe une bonne « continuité » avec les mesures réalisées au rhéomètre cône-plan pour une température de 513.15 K. Ces courbes illustrent la règle de Cox-Merz. Pour 533.15 K, l'accord est nettement moins bon. On remarque toutefois que le rapport longueur sur diamètre n'est que de 20. Or l'accord observé à 513.15 K est bien meilleur pour le rapport de 30 que de 20. Le manque de temps n'a pas permis de réitérer ces mesures à 533.15 K pour un rapport de 30.

C'est pourquoi, compte-tenu des incertitudes sur les mesures effectuées au rhéomètre capillaire, nous nous appuyons de préférence sur les valeurs obtenues via le rhéomètre cône-plan, en admettant que la règle de Cox Merz s'applique.

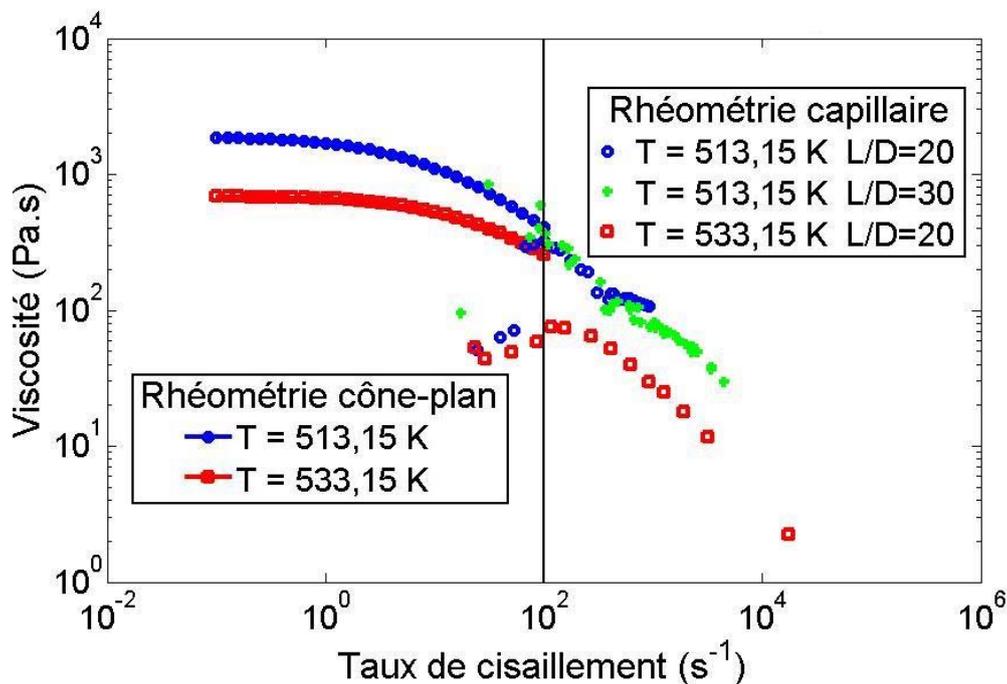


Figure 2.24: L'ensemble des mesures rhéométriques réalisées pour le PS à 513,15 et 533,15 K.

2.5.3.5 Modèles rhéologiques

Les données rhéologiques obtenues pour le polyéthylène et le polystyrène ont été utilisées pour des communications, notamment sur l'estimation de la condition limite de température en entrée ([Pujos et al., 2005 (a,b et c), 2006 (a et b)]). Ces modèles ont été choisis selon deux critères : la minimisation de l'écart des moindres carrés entre le logarithme des mesures et des valeurs estimées (expression 5.14) et la minimisation du nombre de paramètres du modèle.

$$J = \sum_{i=1}^{\text{Nombre de mesures}} \left(\ln \mu_i^{\text{modèle}} - \ln \mu_i^{\text{mesures}} \right)^2 \quad (2.14)$$

Les modèles obtenus ont des écarts relatifs inférieurs à 15% sur toute la gamme de cisaillement considérée.

Le modèle adopté pour le PEBD est du type Carreau-Yasuda avec une thermodépendance suivant une loi d'Arrhénius :

$$\mu = \frac{784.82 \cdot e^{\frac{1404.15}{T}}}{\left(1 - (0.0106 \cdot \dot{\gamma})^{0.298}\right)^{\frac{1}{0.298}}} \quad (2.15)$$

Le modèle adopté pour le PS est du type Cross, avec une thermodépendance suivant une loi d'Arrhénius modifiée pour tenir compte du principe de superposition temps-température en s'appuyant sur les travaux de [Blair et al., 2002].

$$\mu(\dot{\gamma}, T) = \frac{1403 \cdot e^{\left(\frac{76063}{8.314} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{473.15}\right)\right)}}{1 + \left(0.043 \cdot \frac{473.15}{T} \cdot e^{\left(\frac{76063}{8.314} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{473.15}\right)\right)} \cdot \dot{\gamma}\right)^{1-0.284}} \quad (2.16)$$

2.5.3.6 Conclusion

Nous avons rappelé les différentes techniques et notions utilisées pour caractériser nos polymères et nous avons précisé les paramètres retenus. Ceux-ci seront la base de la simulation. Nous sommes conscients que leur précision n'est pas aussi bonne que nous pourrions le souhaiter et que cela aura forcément des répercussions sur l'estimation de paramètres par inversion de mesures.

A présent, passons aux mesures réalisées aux cours de l'expérimentation avec la filière.

2.6 Acquisitions avec la filière

Nous avons vu dans le paragraphe 2.3 comment la filière est instrumentée. Nous allons maintenant nous attacher à l'automatisation des acquisitions. Pour rendre son utilisation conviviale, Karkri a développé une interface graphique qui permet de commander le nombre d'acquisitions. Nous avons quelque peu modifié cette interface pour l'adapter à nos besoins. Sans entrer dans les détails de la programmation, nous allons en dire quelques mots. Mais avant cela, nous allons décrire la chaîne d'acquisition.

2.6.1 La chaîne d'acquisition

Des thermocouples à l'opérateur informatique, l'information suit un parcours décrit schématiquement par la figure 2.25 :

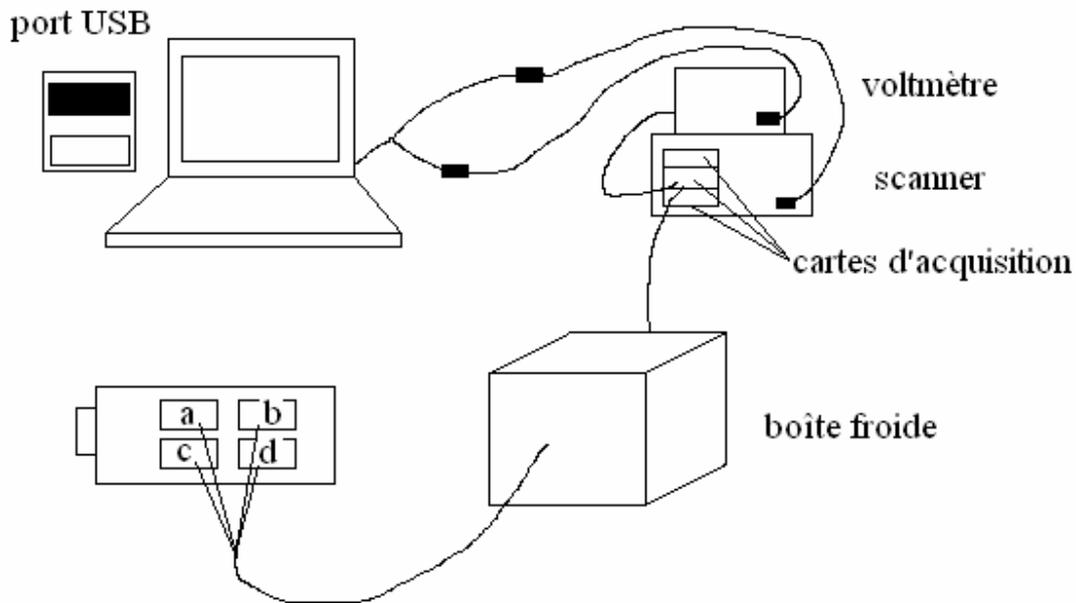


Figure 2.25: Schéma de la chaîne d'acquisition des thermocouples au PC.

Pour des problèmes de ports, nous avons utilisé un connecteur permettant d'obtenir 2 ports séries pour un port USB. Ces ports séries permettent de faire la liaison entre l'ordinateur, le voltmètre et le scanner (en photo figure 2.26).

Le scanner HP 34970A permet d'associer un multimètre numérique externe à des voies du multiplexeur afin de produire un balayage. C'est donc cet instrument qui nous permet de faire nos acquisitions sur chaque capteur. Il se sert pour cela du voltmètre. Au cours du balayage, le scanner assure la connexion entre le voltmètre et chaque voie du multiplexeur, ce qui lui permet de réaliser une mesure sur chaque voie. A chaque balayage, on récupère donc une valeur pour chaque thermocouple et chaque capteur de pression sélectionné au niveau de l'interface informatique.

Les thermocouples délivrent une tension proportionnelle à l'écart entre la température de la jonction de mesure (T_{Jmes}) et la température de la jonction de référence (T_{Jref}), placée dans la boîte froide.

$$U \propto (T_{Jmes} - T_{Jref})$$

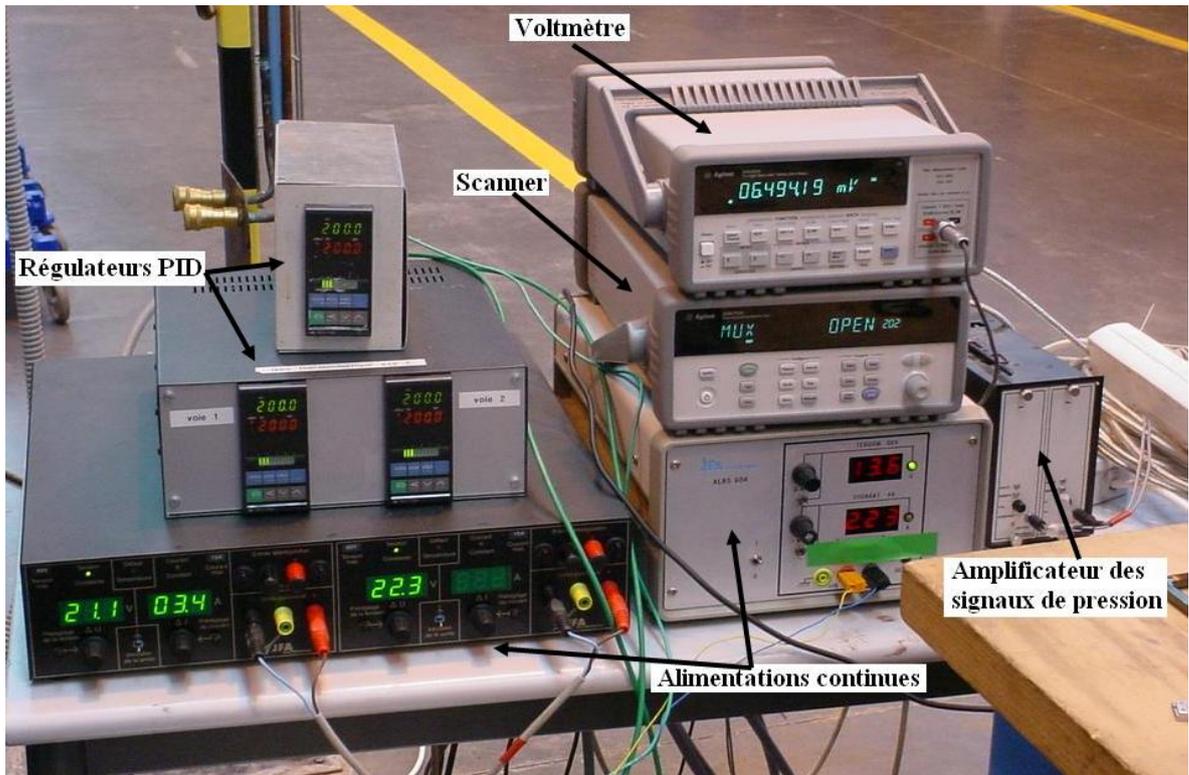


Figure 2.26: Appareillage électronique de la chaîne d'acquisition.

Grâce à une sonde platine placée dans la boîte froide, nous avons connaissance de la T_{Jref} . Pour obtenir la T_{Jmes} qui est finalement la mesure qui nous intéresse, il nous faut mesurer la tension.

Pour ce faire, nous utilisons un multimètre Nano-volt/Micro-ohm du type HP 34420A, qui nous permet de mesurer les tensions avec une grande résolution, afin d'avoir la mesure de température la plus précise possible. Un autre paramètre important pour la qualité de la mesure est le temps d'intégration, spécifié en nombres de cycles secteur (NPLC pour Number of Power Line Cycles). Plus le NPLC est important, plus le temps d'acquisition sera long et plus la résolution sera grande. Karkri avait pris un NPLC de 10 pour avoir la meilleure résolution possible, mais le temps d'acquisition pour la soixantaine de capteurs était de l'ordre de 3 minutes, ce que nous avons estimé un peu long. Malheureusement la diminution du NPLC se traduit rapidement par une perte de qualité de la mesure, phénomène illustré en figure 2.27, et nous nous sommes donc arrêté à un NPLC de 2 pour lequel la dégradation est faible : deux mesures consécutives sur le même capteur à l'état stationnaire varient de 0.3°C contre 0.2°C pour la configuration retenue par Karkri. Il ne nous faut à présent plus qu'une minute pour faire le balayage de tous les capteurs.

Il convient de noter que les temps d'acquisition sont beaucoup plus longs que ceux auxquels on pourrait s'attendre. Il semble que la communication entre l'interface informatique, le scanner et le voltmètre soit plus longue que prévue. A ce titre, la valeur de NPLC n'est utilisée ici que dans le but de donner une référence expérimentale, mais ne permet pas d'en déduire le temps d'acquisition.

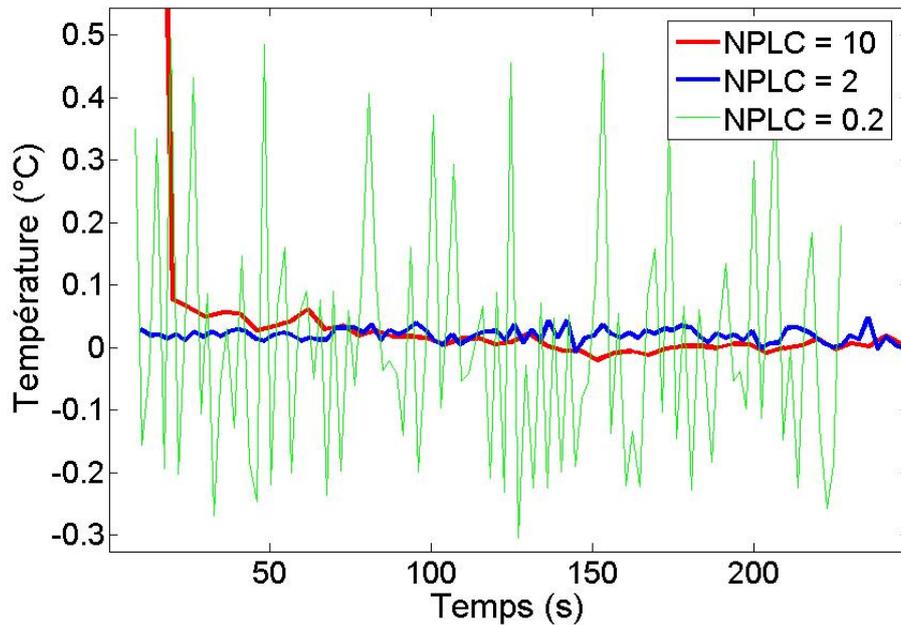


Figure 2.27: Influence de la valeur du NPLC sur la précision des mesures en prenant un thermocouple qu'on plonge dans de l'eau avec des glaçons.

Il reste à rappeler que les différentes voies sont réparties sur 3 cartes d'acquisition insérées dans le scanner. 2 voies sont réservées aux capteurs de pression et 2 autres voies sont réservées à la sonde platine. Ajoutons que des thermocouples sont placés aux interfaces chaufferettes/filière et sont reliés à des régulateurs PID de façon à assurer la régulation thermique. Ces thermocouples ne sont pas visibles sur la figure précédente, car ils sont branchés à l'arrière des régulateurs comme indiqué sur la figure 2.28. :

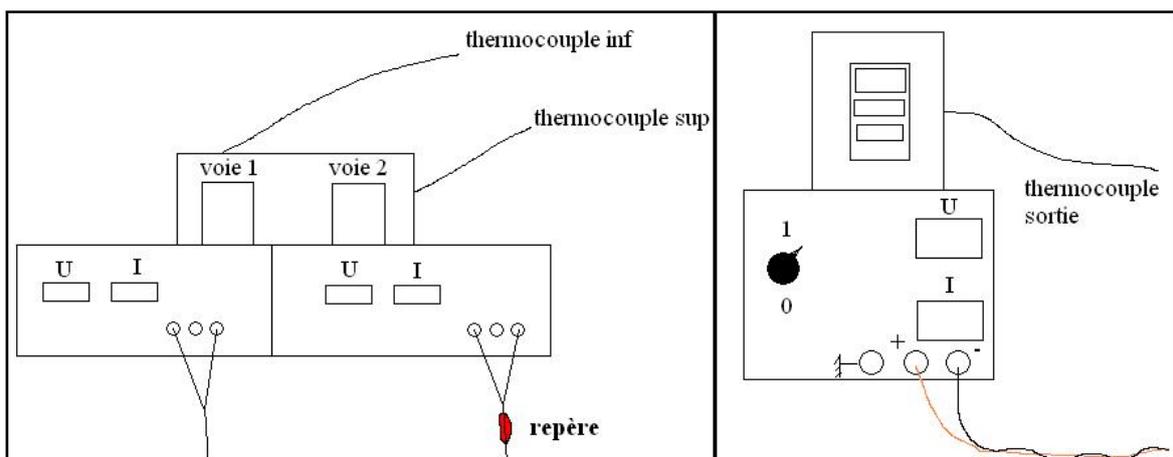


Figure 2.28: Schéma des branchements relatifs aux régulateurs PID.

2.6.2 Logiciel d'acquisition

2.6.2.1 Langage

L'interface d'acquisition a été programmée sous HP VEE, sous environnement Windows. Le programme permet de configurer le scanner et le voltmètre, de convertir les mesures en données intéressantes et de les sauvegarder. Nous avons notamment modifié l'organisation du programme pour que la sauvegarde des données soit faite dans un unique fichier.

2.6.2.2 Organisation

Sur HP VEE, on utilise une programmation objet. Le schéma général du programme est ainsi représenté en figure 2.29. Sur la figure, on remarque que le programme est divisé en grands éléments, chacun contenant une ou plusieurs fonctions.

- **Start** : bouton de départ. Lorsqu'on appuie dessus, il transmet une impulsion qui sert de référence au timer pour la mesure du temps.
- **Compteur** : Le compteur active le voltmètre et compte le nombre d'acquisitions (c'est lui qui correspond à la première boucle de l'algorithme).
→ Sur l'interface, on peut suivre le numéro d'acquisition en direct.
- **Sonde Platine** : Déclenchement du scanner et du voltmètre pour la mesure de température de référence à la sonde Platine. Elle servira de correction à toutes les autres mesures de température.
→ Dans Pt valeurs est assurée la transmission de cette information. Le suivi de cette température peut se faire en direct dans l'interface.
- **Nombre de voies** : correspond aux données de la 2^{ème} boucle, contrôlée par l'intervalle de balayage. Cette fonction dit qu'il faut aller du premier au 60^{ième} capteur en passant par chacun.
- **Intervalle de balayage** : Assure la 2^{ème} boucle (de 1 à N_{capt}), initiée par le nombre de voies.
- **Format de fichier** : Conditionne l'écriture du fichier de sortie (mesures.txt). Quelques données expérimentales peuvent y être ajoutées par le biais d'un fichier de données (données.txt) comme un titre, la pression matière, la température de vis...
- **Timer** : s'occupe du suivi du temps par différence entre l'impulsion donnée par le Start et celle donnée par l'intervalle de balayage.
→ le temps d'acquisition peut être suivi en direct de l'interface.
- **Choix de cartes** : La connectique s'étend sur 3 cartes d'acquisition. Cette partie du programme permet de choisir la carte appropriée.
- **Chaîne de mesures** : en fonction du capteur sollicité (et donc de la carte d'acquisition), cette fonction s'occupe de la transformation du signal électrique (en mV) en signal physique (Pression (bars) ou Température (°C)).

→ La valeur trouvée sur la voie courante (capteur sollicité à l'instant j) peut être contrôlée sur l'interface.

- **Résultats** : Récupération et impression des résultats dans le fichier mesures.txt

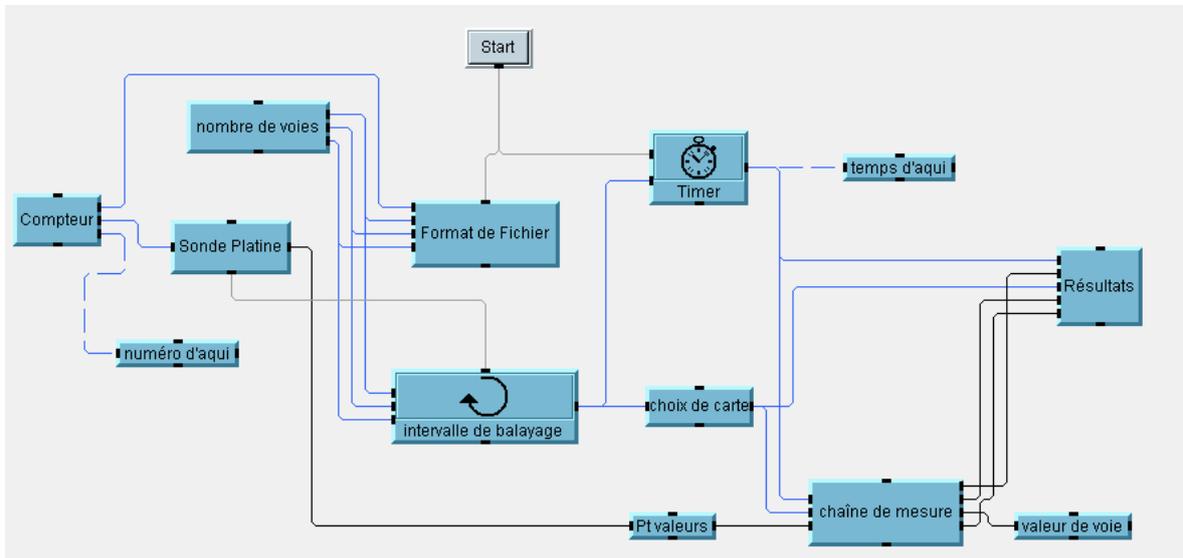


Figure 2.29: Schéma général de l'organisation du programme de l'interface.

On applique alors l'algorithme suivant :

Initialisation et définition des données

N_{capt} : le nombre de capteurs

NA : le nombre d'acquisition souhaité (1 acquisition signifie 1 mesure pour chacun des N capteurs)

dt : intervalle de temps entre les mesures, dt est fonction de la fréquence d'échantillonnage.

Préparation du fichier de sortie

Récupération de la date, du nom et de quelques données expérimentales

Ordonnancement des colonnes et formatage du fichier de mesures

Mesures

For i = 1 : NA

 For j = 1 : N_{capt}

 Mesure du temps t

 Lorsque t correspond aux instants de mesures choisis

 Mes(j)

 Selon j, mes(j) → Pression (opération de conversion)

 mes(j) → Température (opération de conversion et correction via la sonde platine)

 Inscription du couple t(j), MES(j) dans le fichier de données

 Si j = N_{capt} , alors on revient à la ligne

 End

End

2.6.2.3 Limites

La limite principale observée est la durée d'échantillonnage particulièrement importante. La cause de cette durée n'est toujours pas clairement identifiée.

2.6.3 Les capteurs de pression

Au cours des essais à différentes températures, nous avons remarqué une dérive du zéro de pression. Afin d'éliminer cet effet parasite, avant chaque expérience, nous faisons le recalibrage des capteurs de pression : pour cela, nous prenons à zéro la pression de la filière pleine sans écoulement mais à température de régulation, puisque ce qui nous intéresse, c'est la pression liée à la rotation de la vis d'extrusion.

De plus, les capteurs de pression sont placés à 20 mm de l'entrée et de la sortie. Or ce qui nous intéresse, c'est la différence de pression dans la filière. En faisant l'hypothèse d'incompressibilité, et sachant qu'à la sortie de la filière on est à pression atmosphérique, on extrapole la pression d'entrée par régression linéaire.

2.6.4 La balance de précision

Si on considère un fluide newtonien, il apparaît que la viscosité est connue dès lors qu'on connaît la pression et la vitesse moyenne ou le débit volumique. Bien que la rhéologie des polymères soit thermodépendante, des informations supplémentaires sur la dynamique de l'écoulement semblent cruciales.

Dans les premières mesures effectuées par Karkri, les débits avaient été évalués en pesant la masse du polymère écoulé pendant un temps connu de l'ordre de quelques minutes. Afin d'automatiser cette mesure, nous avons ajouté une balance de précision à ce dispositif. Cette balance électronique OHAUS C-11 est reliée à l'ordinateur et via une autre interface définie cette fois-ci avec Labview, elle nous permet d'enregistrer l'évolution de la masse en fonction du temps. A partir de là, nous obtenons l'évolution du débit en fonction du temps. A noter que la précision de la mesure est au gramme près.

La balance est représentée en figure 2.30.



Figure 2.30: Balance électronique de précision.

On pose alors un bac sur la balance puis on fait la mise à zéro. Ensuite on lance l'acquisition des masses et l'extrudeuse. La situation est alors schématisée par la figure 2.31.

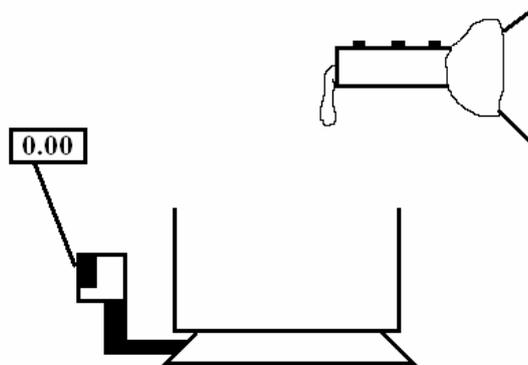


Figure 2.31: Disposition de la balance de précision par rapport à la filière d'extrusion.

Il convient de préciser quelques difficultés qui se posent en procédant de la sorte. Tout d'abord, il y a un retard entre la première mesure de masse et le moment où est actionnée l'extrudeuse, lié au temps de propagation du polymère dans la filière puis au temps nécessaire à sa chute dans le bac. Ce retard est d'autant moins important que le débit est rapide. De plus lorsque le débit est trop lent, le polymère se refroidit et se vitrifie, ce qui peut entraîner des cisaillements aboutissant à la rupture du flot de polymère illustrée par la figure 2.32 et donc générer des discontinuités de masse, ou des forces de tension qui s'opposent au poids et faussent la mesure, comme illustré par la figure 2.33.

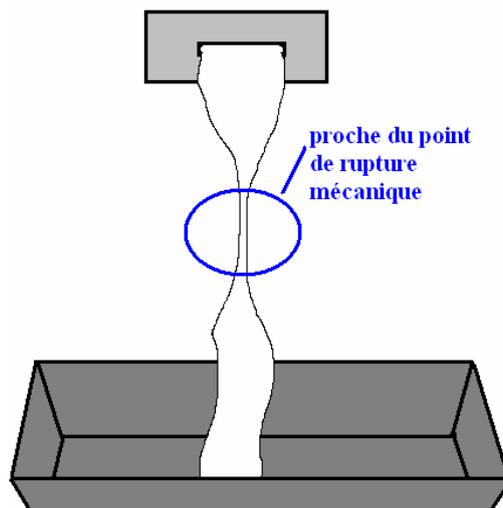


Figure 2.32: Rupture du ruban de polymère dû à un refroidissement trop rapide en raison d'un débit trop lent.

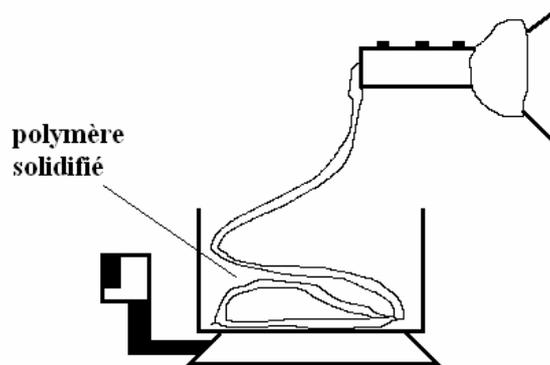


Figure 2.33: La solidification du polymère génère des forces qui s'opposent à son poids.

Pour des débits un peu plus rapides, la vitrification est plus lente mais les forces de tension génèrent des trajectoires de grande amplitude pour le flot de polymère, ce qui a tendance à le faire sortir du bac, comme illustré dans la figure 2.34.

Travailler à haute température fluidifie plus le polymère, ce qui permet d'obtenir des mesures de masse correctes à faible débit.

Enfin, lorsque le débit est trop important, le bac se remplit très vite, et il faut donc le vider régulièrement.

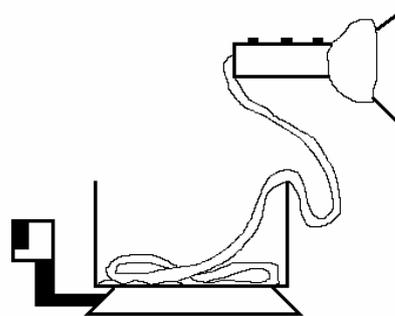


Figure 2.34: Débordement du bac avec un débit rapide.

Malgré les quelques difficultés pratiques qui engendrent un certain bruit de mesure, cette méthode permet d'obtenir une évaluation du débit massique satisfaisante et automatique.

Une difficulté non résolue ici concerne la détermination du débit volumique à partir du débit massique. En effet la masse volumique dépend de la température et le polymère se trouvant dans le bac n'est pas à température homogène. Régler ce problème nécessite une étude complète qui n'a pu être menée. Nous faisons donc l'hypothèse que la masse volumique est constante et égale à la masse volumique déterminée pour la température de régulation (0.78 g.cm^{-3} pour 473.15 K comme le précise le tableau 2.3).

2.6.5 Quelques mots sur l'extrudeuse

La filière est montée sur une extrudeuse monovis de l'IUT de Nantes. Elle est représentée avec son tableau de commande sur la figure 2.35. On peut fixer la température du fourreau et la vitesse de rotation de la vis. A la sortie de l'extrudeuse, un capteur de température et de pression permettent de mesurer la température et la pression de la matière en entrée de filière.



Figure 2.35: L'extrudeuse de l'IUT de Nantes et son tableau de commande.

A titre d'information, on peut donner quelques caractéristiques techniques de l'extrudeuse :

- sa vitesse maximale de vis est de 100 tr/min
- le diamètre de la vis mesure 30 mm
- la longueur de la vis est de 780 mm.

La jonction avec la filière est assurée au moyen d'un col représenté en figure 2.36.

2.6.6 Conclusion

Nous avons récapitulé les caractéristiques et les utilisations des différents maillons de notre chaîne d'acquisition. On peut donc à présent se concentrer sur la collecte des données et le post-traitement.

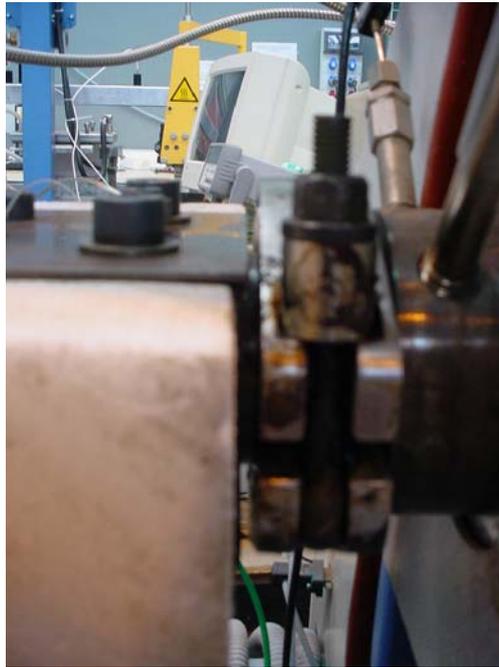


Figure 2.36: Liaison filière (à gauche) et extrudeuse (à droite). On aperçoit à droite le capteur de pression permettant de mesurer la pression matière.

2.7 Analyse des données et traitements

2.7.1 *Modus operandi*

Maintenant que nous avons défini l'appareillage, il convient de préciser le protocole opératoire :

- La première étape consiste à régler les régulateurs de température.
- Ensuite on attend au moins une demi-heure que la filière monte en température de façon homogène, ce qu'on peut vérifier en faisant une acquisition sans débit.
- Une fois la température souhaitée atteinte, on fait le zéro pour les capteurs de pression.
- On lance l'acquisition de masse, puis on monte la vitesse de rotation de la vis. Une fois choisie, on conserve cette vitesse de rotation pendant une demi-heure, temps estimé suffisant pour atteindre un régime stabilisé (plutôt que stationnaire). Au cours de cette demi-heure, on relève la consigne en vitesse de vis et la vitesse de vis effective, la température et la pression de la matière. On surveille également le remplissage du bac sur la balance de façon à le vider à un temps opportun (par exemple au milieu d'une période de 30 min plutôt qu'au moment où on va changer la consigne). Enfin on relève également à la main les tensions et intensités des alimentations des régulations. Un enregistrement de ces valeurs est possible mais n'a pas été mis en place par manque de temps et indisponibilité du matériel. Ces valeurs nous permettront de vérifier la puissance consommée et donc de faire un bilan thermique sur la filière. On vérifie également qu'il n'y a pas de fuite de polymère ou

- de détérioration du matériel. Toutes les 30 min, on change la vitesse de vis en l'augmentant.
- A la fin de l'acquisition, on arrête la vis d'extrusion, puis la régulation thermique et on laisse refroidir. La purge de la filière n'est effectuée qu'en fin de semaine, après avoir réalisé toutes les acquisitions envisagées.

2.7.2 Les essais réalisés

Nous avons concentré nos essais sur le polyéthylène basse densité et avons pu élargir la gamme de température et de pression atteinte par rapport aux travaux de Karkri. Les caractéristiques de nos différents essais sont résumées dans le tableau 2.6.

Dans la première colonne, on trouve la température de régulation, imposée par les chauffettes. En deuxième colonne, la température indiquée est celle mesurée par le thermocouple à la sortie de l'extrudeuse. On remarque que cette température augmente avec la vitesse de vis. La troisième colonne donne la vitesse effective, c'est à dire celle appliquée, légèrement différente de la consigne de vitesse de vis. En quatrième colonne est donnée la pression mesurée en sortie d'extrudeuse. En cinquième colonne, il s'agit du différentiel de pression le long de la filière, obtenu par extrapolation linéaire. En sixième et septième colonne, on trouve la température ambiante et le débit volumique, obtenu par traitement des enregistrements de masse en fonction du temps.

2.7.3 Post-traitement

Une partie du post-traitement est déjà donnée dans le tableau précédent : ainsi la pression extrapolée et le débit volumique sont obtenus à partir des pressions mesurées et des mesures de masse.

Une des difficultés rencontrées pour l'utilisation des mesures vient du fait qu'elles sont asynchrones. La première étape consiste donc à considérer l'évolution de chaque mesure, capteur par capteur et de faire une interpolation temporelle, afin d'obtenir des valeurs aux mêmes temps pour chaque capteur. Cette interpolation n'est normalement pas nécessaire pour un régime stationnaire. Néanmoins elle permet de lisser les valeurs de température et de diminuer l'influence du bruit de mesure. Ensuite souvenons nous qu'une des utilisations des mesures est l'obtention des conditions limites en température. On prend alors les valeurs correspondant à la condition limite considérée et on les interpole spatialement afin d'obtenir une valeur par nœud du maillage. La même technique est également utilisée pour les valeurs de température servant à l'inversion : elle nous permet d'avoir au moins autant de valeurs à injecter que de valeurs à estimer (Cette interpolation était déjà utilisée par Karkri afin d'estimer les 39 points de sa condition limite alors qu'il n'avait que 24 capteurs). Le lissage introduit par l'interpolation filtre le bruit de mesure et régularise la technique inverse.

2.7.4 Conclusion

Nous avons à présent un grand nombre de cas susceptibles d'alimenter la technique d'estimation par inversion de mesures.

Tableau 2.6: Caractéristiques des essais

Température chaufferettes consigne	Température matière extrudeuse	Vitesse de vis effective	Pression matière extrudeuse	Pression matière extrapolée filière	Température ambiante	Débit volumique
K	K	tr/min	$\times 10^5 Pa$	$\times 10^5 Pa$	K	m^3/s
473.15	473.15	9	23	22.55	291.98	3.97E-08
	474.15	12	99	81.68	291.99	2.01E-07
	475.15	17	136	119.35	292.02	3.29E-07
	476.15	23	169	149.26	292.05	4.54E-07
	477.15	28	199	176.95	292.09	5.87E-07
	478.15	33	224	199.45	292.17	7.11E-07
493.15	494.15	9	58	47.35	292.61	1.36E-07
	494.15	12	80	71.09	292.72	2.23E-07
	495.15	17	113	102.62	292.85	3.43E-07
	495.15	23	145	126.54	292.97	4.67E-07
	496.15	28	169	149.57	293.14	5.97E-07
	497.15	33	191	170.35	293.26	7.20E-07
	498.15	38	212	187.14	293.39	8.49E-07
	499.15	43	229	203.91	293.52	9.79E-07
513.15	513.15	9	28	23.65	292.82	8.31E-08
	513.15	12	72	60.46	292.81	2.22E-07
	514.15	17	98	84.45	292.80	3.49E-07
	515.15	23	121	105.33	292.80	4.71E-07
	516.15	28	142	124.96	292.80	6.01E-07
	516.15	33	160	141.13	292.84	7.25E-07
	517.15	38	177	158.13	292.92	8.54E-07
	518.15	43	194	173.59	293.00	9.84E-07
	518.15	48	211	186.97	293.09	1.11E-06
	519.15	54	225	200.08	293.19	1.24E-06
	520.15	59	238	209.67	293.27	1.37E-06
533.15	532.15	9	44	37.10	293.54	1.55E-07
	533.15	17	84	72.43	293.63	3.59E-07
	535.15	33	139	121.90	293.71	7.26E-07
	538.15	54	194	170.45	293.78	1.25E-06
	539.15	64	216	190.49	293.85	1.51E-06

2.8 Détermination rhéologique avec la filière par comparaison avec le rhéomètre capillaire

Par la nature même de la conception de l'outillage, la filière peut être utilisée comme un rhéomètre plan puisque la pression et le débit sont mesurés. Nous pouvons donc calculer une contrainte et un cisaillement apparents. L'application de la correction de Rabinovitch nous permet alors d'obtenir la contrainte réelle. Dans le cas de la filière, la pression est mesurée directement au sein du canal et permet de s'affranchir de la correction de Bagley.

Dans le cas d'un écoulement plan :

$$\dot{\gamma}_{app} = \frac{6Q}{W \cdot h^2} \quad (2.17)$$

Avec	$Q = V \cdot h \cdot W$	débit
	W	largeur de la filière
	h	hauteur de la filière
	V	Vitesse moyenne du polymère

Les mesures de pression permettent le calcul d'une contrainte apparente :

$$\tau_{app} = \frac{\Delta P \cdot h}{2 \left(1 + \frac{h}{W}\right) \cdot L} \quad (2.18)$$

L	longueur de la filière
P	pression mesurée en entrée de filière

La correction de Rabinovitch n'est pas modifiée dans sa mise en œuvre.

Enfin les expériences réalisées avec le polystyrène ont été conduites par M. Karkri, et n'ont donc pas bénéficié de la présence de la balance de précision. De ce fait, cette évaluation n'a donc pu être faite que pour le PEBD. Les mesures ainsi obtenues sont reportées dans la figure 2.37.

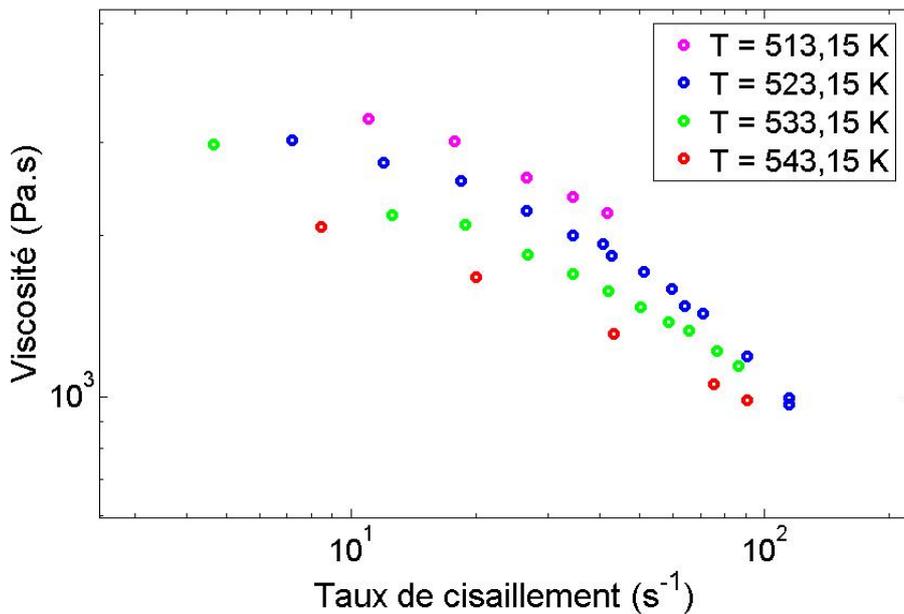


Figure 2.37: Mesures de viscosité obtenues avec la filière d'extrusion pour le PEBD.

Afin d'évaluer la qualité de notre estimation de la rhéologie via la filière utilisée comme rhéomètre, nous avons superposé les mesures avec la filière et celles obtenues avec les différents systèmes rhéométriques présentés précédemment sur la figure 2.38.

Soulignons la façon dont les températures sont mesurées pour chacune des mesures. Pour le rhéomètre, il s'agit d'un thermocouple situé en sortie du rhéomètre. Pour la filière, la température indiquée est la température de régulation imposée par les chauffettes. On sait que la température du polymère n'est pas homogène dans la filière et qu'elle augmente en raison de la dissipation visqueuse. Cette différence de température peut expliquer en partie les divergences des courbes lorsque les taux de cisaillement diminuent.

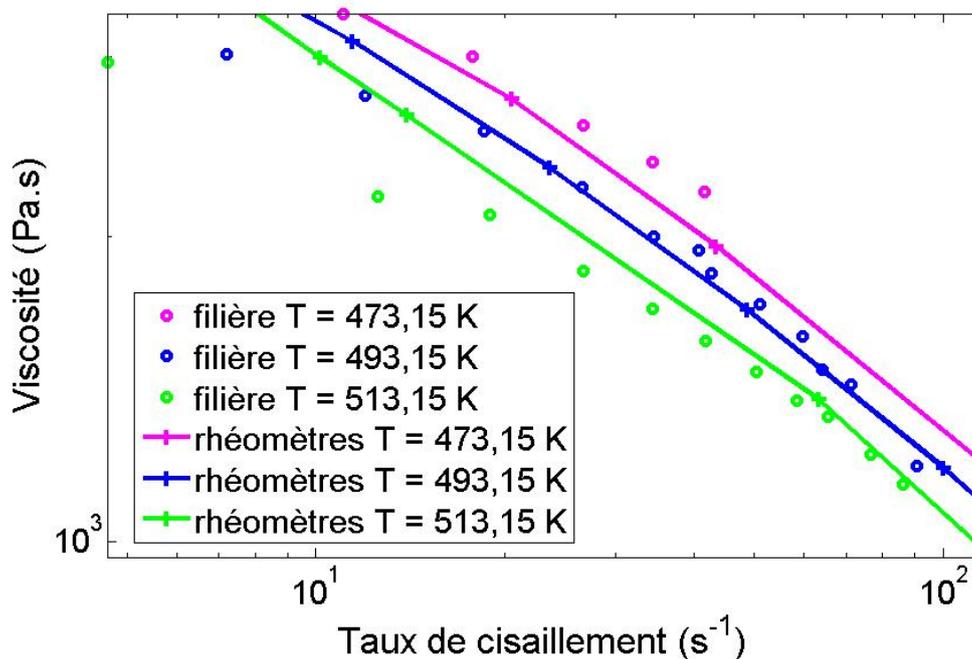


Figure 2.38: Comparaison entre les mesures de viscosité réalisées avec la filière et le rhéomètre capillaire pour 3 températures.

En définitive, les mesures avec la filière d'extrusion sont de bonne qualité : la mesure du débit et surtout de la pression sont plus précises que celle du rhéomètre capillaire. L'incertitude sur la température lui confère les mêmes défauts de mesure que le rhéomètre, mais cette façon de procéder présente l'avantage de mesurer une viscosité en accord avec le procédé utilisé.

D'un point de vue pratique, ces mesures peuvent donner une excellente initialisation pour notre algorithme d'estimation de rhéologie par inversion de mesures.

2.9 Conclusion

La filière mise en place au cours de la thèse de doctorat de Karkri est une filière plate de section rectangulaire. Conçue pour fournir des données susceptibles d'alimenter une technique inverse, elle est instrumentée au moyen de thermocouples et de capteurs de pression. La régulation thermique de la filière est assurée par 3 chaufferettes situées au-dessus, en dessous et en sortie de filière. La connectique se trouve sur le flanc droit par rapport à l'entrée. L'isolation est assurée au moyen de laine de verre en entrée, de résine époxy et de « foam glass » (mousse expansée) sur les côtés. Les caractéristiques de l'acier et des isolants ont été rappelées. Le PEBD utilisé est caractérisé. La chaîne d'acquisition et son fonctionnement sont décrits. Les données expérimentales utilisables sont répertoriées. Enfin l'utilisation de la filière comme rhéomètre a été validée. Les mesures obtenues ont les mêmes défauts que sur un rhéomètre classique (correction de Rabinovitch, incertitude sur la température de mesure) mais peuvent servir d'initialisation pour l'estimation de la rhéologie.

3 Modélisation et Simulation

3.1 Introduction

Le problème étant la simulation d'un écoulement de polymère fondu, nous allons maintenant nous intéresser aux outils numériques. Toutefois, quel que soit le code employé, la valeur de la simulation est relative au modèle choisi. Il importe donc de le définir avec précision.

Au cours de ce chapitre, nous définissons le problème étudié, notamment en termes d'équations. Un examen des nombres adimensionnels nous permet de faire un certain nombre d'approximations, qui délimitent la validité de notre modèle. Une fois cela fait, nous présentons le code de calcul utilisé et décrivons les méthodes employées pour la résolution des équations du modèle. Enfin nous évaluons la qualité du code en résolvant quelques cas académiques dont les solutions sont connues en fonction du maillage.

Mais commençons par le commencement, et traduisons le problème étudié en problème numérique.

3.2 Problème étudié et nombres adimensionnels

3.2.1 Système étudié

Notre système est défini par la filière représentée sur la figure 3.1. Il s'agit d'un parallélépipède rectangle de dimension $(200 \times 10^{-3}) \times (100 \times 10^{-3}) \times (40 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$, à l'intérieur duquel se situe le canal de la même forme mais de dimension $(200 \times 10^{-3}) \times (30 \times 10^{-3}) \times (2 \times 10^{-3}) \text{ m}^3$. A l'intérieur de ce canal s'écoule un polymère aux propriétés rhéologiques complexes. Notre objectif est de simuler cet écoulement ainsi que les échanges thermiques à l'intérieur de la filière.

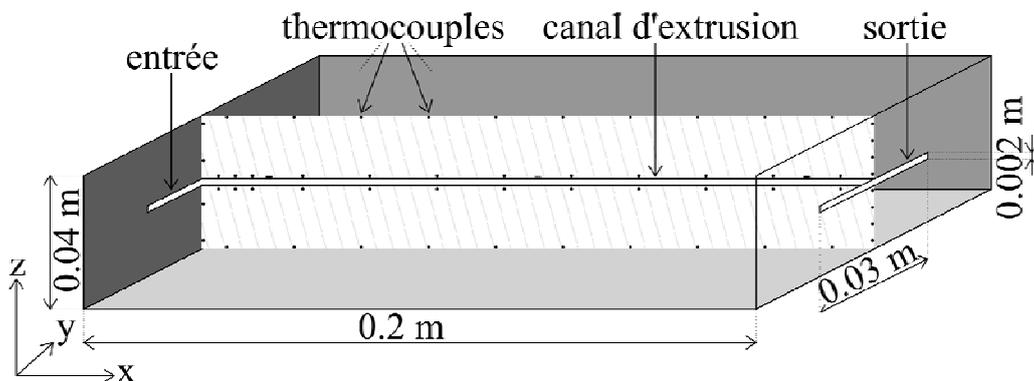


Figure 3.1 : Schéma tridimensionnel de la filière plate avec ses dimensions.

3.2.2 Traduction en équations

La simulation d'un écoulement fait appel à la résolution des équations de Navier-Stokes :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \cdot \vec{V} \right) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \left[\mu \cdot \left(\overline{\nabla \vec{V}} + {}^t \overline{\nabla \vec{V}} \right) \right] \\ \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

où ρ est la masse volumique (kg.m^{-3}), \vec{V} le vecteur vitesse (m.s^{-1}), p la pression (Pa), \vec{g} le vecteur gravité (m.s^{-2}), μ la viscosité (Pa.s).

Pour ce qui est du suivi des échanges de chaleur, nous résoudrons l'équation de l'énergie :

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \cdot T \right] = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \Phi + S \quad (3.2)$$

où C_p est la capacité calorifique ($\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$), T est la température (K), λ est la conductivité thermique ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$), Φ la dissipation visqueuse (W.m^{-3}) et S un terme source (W.m^{-3}).

Néanmoins la résolution de ce problème en 3 dimensions reste complexe. Aussi allons nous examiner plus en détails les termes de ces équations au regard de quelques données expérimentales et en déduire quelles approximations sont légitimes.

3.2.3 Etude de quelques grandeurs caractéristiques

Avant toute chose, il nous faut définir les ordres de grandeur des valeurs expérimentales que nous allons utiliser. Celles-ci s'appuient sur les mesures réalisées expérimentalement.

Bien que la filière soit utilisable avec plusieurs polymères, la plupart des mesures ont été réalisées avec un polyéthylène basse densité. Nous nous servirons donc de ses caractéristiques physiques lorsque nous aurons besoin de valeurs relatives aux propriétés du polymère.

Les températures de travail se situent autour de 473.15 K. A cette température, la masse volumique du PEBD considéré vaut 780 kg.m^{-3} . Sa rhéologie non newtonienne varie avec la vitesse de cisaillement. Néanmoins pour de faibles taux de cisaillement (inférieurs à 100 s^{-1}), la viscosité reste supérieure à 1000 Pa.s. Ajoutons à cela que la vitesse moyenne de l'écoulement est de l'ordre de 10^{-2} m.s^{-1} . Cette valeur a été déterminée à partir de mesures de débit massique, évalué grâce à une balance électronique programmable. D'un point de vue propriétés thermiques, la capacité calorifique du PEBD est de $2650 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$ et la conductivité de $0.3 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

De toutes ces informations, on peut déduire plusieurs nombres adimensionnels caractéristiques des phénomènes physiques étudiés.

3.2.3.1 *Le nombre de Reynolds*

Le nombre de Reynolds permet de savoir si on se trouve dans un cas d'écoulement laminaire ou turbulent. Il représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. On considère que l'écoulement dans un canal est laminaire lorsque le nombre de Reynolds est inférieur à 2000.

$$Re = \frac{\rho \cdot \bar{V} \cdot h}{\mu} \leq \frac{780 \times 10^{-2} \times 2 \times 10^{-3}}{10^3} = 1.60 \times 10^{-5} \quad (3.3)$$

Cette faible valeur nous indique que l'écoulement est laminaire. Cela signifie qu'il n'est pas nécessaire d'intégrer la turbulence au modèle.

3.2.3.2 *Le nombre de Stokes*

Le nombre de Stokes permet d'avoir une idée de l'importance de la force de gravité par rapport aux contraintes de cisaillement dues à la viscosité de l'écoulement.

$$St = \frac{\mu \cdot \bar{V}}{\rho \cdot g \cdot h^2} \geq \frac{10^3 \times 10^{-2}}{780 \times 10 \times 4 \times 10^{-6}} = 3.20 \times 10^2 \quad (3.4)$$

Le nombre de Stokes est très supérieur à 1, ce qui signifie que l'influence de la gravité est négligeable devant les forces de contraintes visqueuses. Nous pouvons donc simplifier l'équation de Navier-Stokes en supprimant le terme lié à la gravité, ce qui symétrise l'équation par rapport au plan médian horizontal de la filière.

3.2.3.3 *Le nombre de Péclet*

Le nombre de Péclet permet de comparer le transfert de chaleur par convection dont l'ordre de grandeur est donné par le terme $\rho C_p \bar{V} \frac{\Delta T}{L}$ et la conduction dont l'ordre de grandeur du terme est donné par le terme $\lambda \frac{\Delta T}{(distance\ caractéristique)^2}$. La distance caractéristique est relative à la direction selon laquelle on étudie la conduction thermique (L pour la conduction thermique selon l'axe X).

Le nombre de Péclet selon l'axe X, axe d'écoulement est alors :

$$Pe^x = \frac{\rho \cdot C_p \cdot \bar{V} \cdot L}{\lambda} = \frac{780 \times 2.65 \times 10^3 \times 10^{-2} \times 0.2}{0.3} = 1.38 \times 10^4 \quad (3.5)$$

Dans le sens de l'écoulement, l'influence de la conduction est négligeable par rapport à la convection.

Si on compare maintenant la convection à la conduction thermique selon Z (la plus petite dimension, dont la taille caractéristique est la demi-hauteur), on obtient :

$$Pe^Z = \frac{\rho \cdot C_p \cdot \bar{V} \cdot h^2}{\lambda \cdot L} = \frac{780 \times 2.65 \times 10^3 \times 10^{-2} \times (1 \times 10^{-3})^2}{0.3 \times 0.2} = 0.355 \quad (3.6)$$

et selon Y (dont la taille caractéristique est la demi-largeur) :

$$Pe^Y = \frac{\rho \cdot C_p \cdot \bar{V} \cdot d^2}{\lambda \cdot L} = \frac{780 \times 2.65 \times 10^3 \times 10^{-2} \times (1.5 \times 10^{-2})^2}{0.3 \times 0.2} = 7.75 \times 10^2 \quad (3.7)$$

Il apparaît dès lors que la conduction suivant les axes X et Y est négligeable devant la convection. Ceci est particulièrement intéressant dans la direction Y, car cela nous permet de nous affranchir de la troisième dimension pour le problème thermique, en négligeant les effets de bord pour revenir à un modèle 2D, beaucoup plus pratique à manipuler. Ajoutons à cela que le rapport de forme $\frac{\text{largeur}}{\text{hauteur}} = \frac{W}{h} = 15$ est suffisamment important pour négliger les effets de bord lorsqu'on considère l'écoulement [Agassant et al., 1996].

En conclusion, le problème initialement 3D peut se ramener à un problème 2D (plan (XZ)), ce qui allège considérablement le temps de calcul. Toutefois le calcul du nombre de Péclet ne donne d'informations que sur le canal d'extrusion. Les échanges thermiques éventuels dans le métal selon la direction Y sont alors à traduire par l'utilisation de termes sources.

3.2.3.4 Le nombre de Cameron

Le nombre de Cameron est un indicateur du régime thermique dans la filière dans le cas d'une régulation parfaite [Agassant et al., 1996]. En pratique, il correspond à l'inverse du nombre de Péclet selon Z et permet de savoir si la température dans le polymère est régie par la régulation thermique ou par la convection. On détermine ainsi trois régimes thermiques :

- $Ca < 10^{-2} \Rightarrow \bar{T}$ évolue linéairement dans l'écoulement. Le régime est dit adiabatique.
- $Ca > 1 \Rightarrow T$ constante. Le régime est dit d'équilibre et la température maximale est atteinte au centre de la filière. La température est contrôlée par la régulation.
- Ca intermédiaire \Rightarrow régime transitoire.

$$Ca = \frac{\lambda \cdot L}{\rho \cdot C_p \cdot \bar{V} \cdot h^2} = \frac{0.3 \times 0.2}{780 \times 2.65 \times 10^3 \times 10^{-2} \times (10^{-3})^2} = 2.90 \quad (3.8)$$

Le nombre de Cameron est supérieur à 1, ce qui indique un régime d'équilibre. Toutefois une augmentation de la vitesse moyenne d'écoulement du polymère (il suffit que cette vitesse soit doublée) suffit à « tomber » dans le régime transitoire. Expérimentalement on se situe donc dans un régime thermique oscillant entre le régime transitoire et le régime d'équilibre.

3.2.4 Autres hypothèses simplificatrices

On sait par ailleurs que les polymères sont faiblement compressibles à fortes pressions [Laun, 2003]. Cela se traduit entre autres par une augmentation de la viscosité avec la pression. Néanmoins cet effet est négligeable pour des pressions de l'ordre de 200×10^5 Pa. Dès lors, nous supposons que le polymère est incompressible, ce qui se traduit par une simplification de l'équation de conservation de la masse, qui devient :

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (3.9)$$

Nous négligerons également les variations de C_p , ρ et λ en fonction de la température. Au paragraphe 2.5, nous avons vu que ces propriétés physiques varient, mais si on reste au voisinage de la température de régulation, la variation est faible. Cette approximation est faite pour pouvoir mettre en place la technique inverse sans ajouter de difficultés supplémentaires. Néanmoins cela reste un facteur à prendre en considération lors de l'analyse des inversions à différentes températures de régulation.

3.2.5 La rhéologie du polymère

Les polymères sont connus pour leur comportement rhéologique complexe. Nous nous sommes affranchis de la compressibilité du polymère, néanmoins la viscosité reste une fonction de la vitesse de cisaillement et de la température. La littérature [Agassant et al., 1996] fait référence à un grand nombre de lois classiques permettant de décrire les comportements rhéologiques des polymères. Quelques exemples de ces lois ont été donnés dans le chapitre d'introduction.

On se rappelle que notre objectif vise à estimer les paramètres d'un modèle rhéologique décrivant le comportement du polymère dans la filière. On peut alors faire les constats suivants : tout d'abord, aucune des lois classiques ne permet de décrire le comportement rhéologique de tous les polymères (bien qu'en prenant une forme de Bowers (1.2.2.4.3) à un ordre suffisamment avancé, on doit certainement s'en sortir...). Ensuite ces lois font appel à des paramètres mathématiques dont les ordres de grandeur sont très différents, ce qui rend l'estimation de ces paramètres très difficile.

Nous avons donc décidé de procéder autrement pour nous affranchir de ces difficultés : au lieu de définir des coefficients d'une loi mathématique, nous allons définir des valeurs de viscosité associées à des valeurs de taux de cisaillements, comme pour un tableau de la forme suivante :

Tableau 3.1 : Modèle rhéologique

Taux de cisaillement (s^{-1})	Viscosité (Pa.s)
$\dot{\gamma}_1$	μ_1
$\dot{\gamma}_2$	μ_2
...	...
$\dot{\gamma}_i$	μ_i

$$\begin{array}{ccc} \dots & & \dots \\ \dot{\gamma}_N & & \mu_N \end{array}$$

Les valeurs des taux de cisaillement conditionnent la qualité du modèle et leur choix reste délicat : il faut couvrir un gamme suffisante de taux de cisaillement pour capter le mieux possible le comportement rhéologique et la répartition régulière (sur une échelle logarithmique) n'est pas forcément la mieux adaptée, sauf lorsqu'on a un très grand nombre de points. Plusieurs simulations directes peuvent aider à améliorer le choix.

Ce modèle en forme de tableau présente l'inconvénient d'être une fonction discrète. Il faut donc la rendre continue (par morceaux) (figure 3.2). La représentation graphique classique des lois rhéologiques se fait en diagramme logarithmique, c'est pourquoi nous poserons comme relation de continuité une interpolation « linéaire » dans l'espace logarithmique :

$$\text{Si } \dot{\gamma} \in [\dot{\gamma}_i; \dot{\gamma}_{i+1}], \text{ alors } \ln\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right) = \frac{\ln\left(\frac{\mu_{i+1}}{\mu_i}\right)}{\ln\left(\frac{\dot{\gamma}_{i+1}}{\dot{\gamma}_i}\right)} \cdot \ln\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_i}\right) + \ln\left(\frac{\mu_i}{\mu_0}\right)$$

où μ_0 est une constante de normalisation. On essaiera par la suite de prendre μ_0 correspondant à la viscosité du plateau newtonien, ce qui permet d'avoir des paramètres μ_i inférieurs ou égaux à 1.

Si $\dot{\gamma} < \dot{\gamma}_1$ tel que $\dot{\gamma}_1 = \min(\dot{\gamma}_i, i \in [1; N])$, alors $\mu = \mu_1$
C'est la traduction du plateau newtonien.

$$\text{Si } \dot{\gamma} > \dot{\gamma}_N \text{ tel que } \dot{\gamma}_N = \max(\dot{\gamma}_i, i \in [1; N]), \text{ alors } \ln\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right) = \frac{\ln\left(\frac{\mu_N}{\mu_{N-1}}\right)}{\ln\left(\frac{\dot{\gamma}_N}{\dot{\gamma}_{N-1}}\right)} \cdot \ln\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_N}\right) + \ln\left(\frac{\mu_N}{\mu_0}\right)$$

Cette relation traduit la continuité de la courbe.

Le tableau définit les limites du modèle :

- plus le tableau a de points et meilleure est l'interpolation,
- plus les bornes du tableau sont éloignées et moins on a de chances de devoir utiliser l'extrapolation par continuité ou le seuil du plateau newtonien.

Une paramétrisation équivalente peut être formulée ainsi :

$$\mu(\dot{\gamma}) = \sum_{i=1}^N \mu_i \cdot \sigma_i(\dot{\gamma})$$

où A est le paramètre d'Arrhénius, les $\sigma_i(\dot{\gamma}^k)$ forment une base de dimension N, telles que si

$$\dot{\gamma}^k = \dot{\gamma}_i, \text{ alors } \sigma_i(\dot{\gamma}^k) = 1.$$

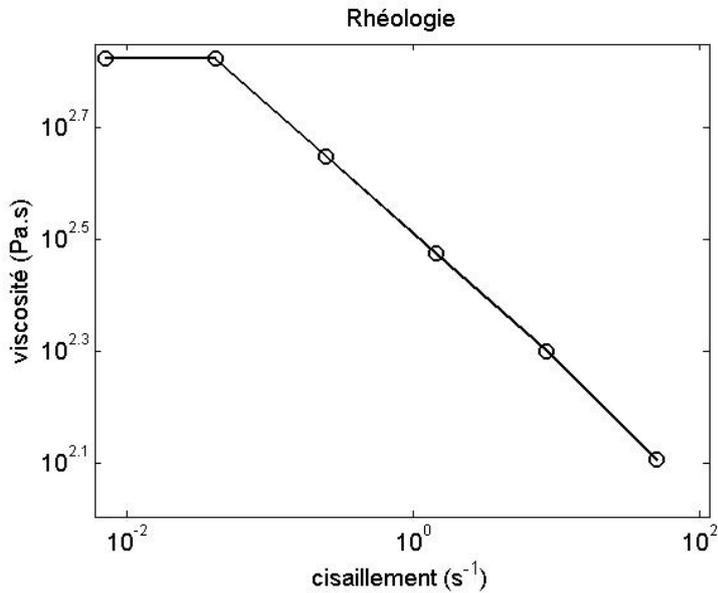


Figure 3.2: Exemple de rhéologie représentée avec le modèle de type "tableau": les points indiquent les valeurs du tableau et la courbe en trait plein indique la fonction rendue continue par morceaux.

Ce tableau ne permet toutefois de traduire que la relation vitesse de cisaillement – viscosité. Compte tenu des difficultés du problème d'inversion (détaillées au chapitre 4), nous adoptons une thermodépendance traduite par une loi d'Arrhénius, avec le projet dans l'avenir d'appliquer le même type de description à la thermodépendance :

Tableau 3.2 : Modèle rhéologique thermodépendant

Viscosité (Pa.s ⁻¹)		Température (K)				
		T ₁	...	T _j	...	T _M
Taux de cisaillement (s ⁻¹)	$\dot{\gamma}_1$	μ_{11}		μ_{1j}		μ_{1M}
	...					
	$\dot{\gamma}_i$			μ_{ij}		μ_{iM}
	$\dot{\gamma}_N$	μ_{N1}		μ_{Nj}		μ_{NM}

3.2.6 Les conditions limites

Pour compléter notre modèle, nous devons à présent définir les conditions aux limites du système. Pour plus de lisibilité, nous allons nous appuyer sur le schéma en figure 3.3, afin de définir la nomenclature des limites du système étudié.

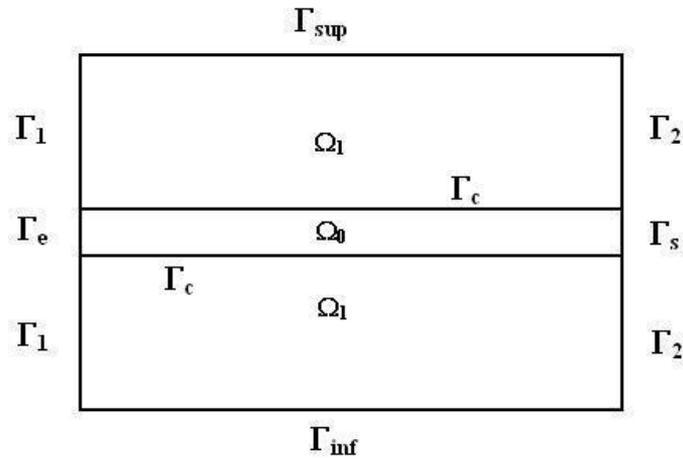


Figure 3.3 : Nomenclature des limites du système

Ω représente le système dans sa globalité et se subdivise en Ω_0 et Ω_1 , respectivement le canal d'extrusion et la partie métallique de la filière.

Γ_e désigne l'entrée de la filière par laquelle le polymère est injecté.

Γ_s désigne la sortie de la filière par laquelle s'échappe le polymère.

Γ_{sup} et Γ_{inf} désignent les parois supérieure et inférieure de notre système. Elles correspondent à la position de chaufferettes sur le matériel expérimental.

Γ_1 désigne la limite gauche du système, privée de l'entrée, c'est à dire les parois métalliques au-dessus et au-dessous de l'entrée.

Γ_2 désigne la limite gauche du système, privée de la sortie, c'est à dire les parois métalliques au-dessus et au-dessous de la sortie. Elle correspond également à la position d'une chaufferette.

Γ_c correspond aux parois du canal d'extrusion, soit $\Gamma_c = \Omega_0 \cap \Omega_1$

Comme nous visons à estimer des paramètres par inversion de mesures expérimentales, nous allons définir ces conditions limites en accord avec les données expérimentales.

Rapport à l'écoulement, nous faisons l'hypothèse de non glissement. De plus, le métal étant un solide immobile, sa vitesse est nulle. Par ailleurs, la filière est équipée de capteurs de pression situés à 20 mm de l'entrée et de la sortie de la filière. Une balance électronique donne le débit, mais nous n'avons pas accès au profil de vitesse. Nous imposons donc le différentiel de pression sur la filière et imposons à la vitesse d'être normales aux surfaces limites d'entrée et de sortie du canal. On peut alors résumer ces conditions limites sous la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \Gamma_e : \begin{cases} p = p_e \\ \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = \vec{0} \end{cases} \\
 \Gamma_s : \begin{cases} p = p_s \\ \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = \vec{0} \end{cases} \\
 \Gamma_1 : \vec{V} = \vec{0} \\
 \Gamma_2 : \vec{V} = \vec{0} \\
 \Gamma_c : \vec{V} = \vec{0}
 \end{array} \right. \quad (3.10)$$

Pour l'équation de l'énergie, nous disposons des capteurs de température. Grâce aux enregistrements, nous pouvons interpoler les conditions de Dirichlet imposées au-dessus, au dessous et autour de la sortie. Ces interpolations nous permettent d'avoir des conditions aussi proches de la réalité que possible.

Expérimentalement l'entrée a été isolée avec de la laine de verre installée autour du convergent, entre l'extrudeuse et la filière. Donc nous appliquons une condition adiabatique autour de l'entrée de la filière.

Le profil de température de sortie est inconnu, de même que le flux. Mais l'étude du nombre de Péclet a montré que la conduction thermique est négligeable selon l'axe X (axe de l'écoulement). Nous prendrons une condition d'adiabaticité pour cette raison.

Le profil de température en entrée de la filière – résultante de l'écoulement et des échanges thermiques dans l'extrudeuse [Pujos et al., 2006 b] – est quelque chose d'assez complexe et difficilement prédictible comme le montrent les travaux de Mustapha Karkri [Karkri, 2004]. Ce profil sera imposé et le choix du profil se fera en fonction de ce que nous voulons faire.

Ces différentes conditions limites peuvent alors se résumer sous la forme des équations 3.11:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \Gamma_e : T(z) = T_e(z) \\
 \Gamma_s : \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \\
 \Gamma_1 : \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \\
 \Gamma_2 : T(z) = T_2(z) \\
 \Gamma_{\text{sup}} : T(x) = T_{\text{sup}}(x) \\
 \Gamma_{\text{inf}} : T(x) = T_{\text{inf}}(x)
 \end{array} \right. \quad (3.11)$$

3.2.7 Conclusion

Nous avons détaillé les équations physiques et répertorié les différentes approximations commises. Il reste à présent à les mettre en œuvre au moyen d'un code de calcul. Ajoutons tout de suite que les codes de calcul modernes n'appliquent pas toutes ces approximations. Ainsi bien que le nombre de Stokes permette de négliger la gravité, les solveurs sont aujourd'hui suffisamment robustes pour résoudre l'écoulement en en tenant compte sans difficulté particulière. En revanche, dire que la gravité est négligeable permet de symétriser le problème et donc de réduire le calcul à une demi-filière 2D (l'aspect 2D étant justifié par l'étude du nombre de Péclet et du rapport de forme du canal d'extrusion).

3.3 Aquilon

3.3.1 La philosophie

Aquilon est un code de calcul développé au sein du laboratoire depuis une quinzaine d'années, au cours desquelles il a reçu de nombreux apports issus des travaux des membres du laboratoire, permanents ou non.

Avant toute chose, Aquilon a été conçu pour la simulation numérique d'écoulements multiphysiques. Il traite désormais des problématiques aussi diverses que les écoulements incompressibles et faiblement compressibles, laminaires et turbulents, mono- et multiphasiques, mais également les transferts thermiques, les transports de scalaires inertes ou réactifs et les milieux poreux. L'objectif final est d'aboutir à un code capable de traiter le couplage de ces différents phénomènes physiques dans des géométries diverses à 2 ou 3 dimensions.

Aquilon n'est pas qu'une alternative aux codes commerciaux de simulation. Il est également un projet fédérateur susceptible de rassembler les connaissances d'un laboratoire en un outil performant pour des usages multiples. Si son utilisation pour la recherche est l'objet de son apparition dans cette thèse, Aquilon trouve également des applications industrielles auprès des partenaires de notre laboratoire, et pédagogiques auprès des étudiants de l'Ecole Nationale

Supérieure de Chimie et Physique de Bordeaux (ENSCP), un des organismes de tutelle du laboratoire TREFLE.

Nous allons à présent nous attarder sur le fonctionnement de ce code, la traduction des équations physiques et les méthodes de résolution.

3.3.2 Volumes finis et stratégies numériques

La méthode de discrétisation des volumes finis consiste à subdiviser le domaine d'étude en volumes élémentaires sur lesquels sont intégrées les différentes équations de conservation [Patankar, 1980]. Cela revient à faire le bilan des flux traversant la surface fermée du volume de contrôle, exercice courant pour le physicien.

La méthode des volumes finis présente l'avantage d'être conservative. Néanmoins l'application de cette méthode nécessite l'interpolation des caractéristiques sur les faces du volume de contrôle. Afin de réduire ce nombre d'interpolations mais également d'éviter des problèmes d'oscillations numériques, un maillage décalé de type MAC (Marker and Cell) est utilisé [Harlow et al., 1965].

3.3.2.1 Maillage décalé

Notons d'abord que la géométrie étudiée est projetée selon un maillage cartésien rectangulaire. Ce maillage est donc en quelque sorte indépendant de la géométrie du système. Pour décrire celle-ci avec précision, il peut être alors nécessaire de raffiner localement le maillage, ce qui augmente considérablement le nombre de nœuds. Dans les cas d'une géométrie complexe, il est aujourd'hui possible d'importer des maillages réalisés à l'aide de maillages plus traditionnels (comme Gambit). Cela peut s'avérer intéressant notamment pour la réduction du nombre de nœuds inutiles, dans le cas où le système n'est pas rectangulaire.

Le maillage ainsi défini correspond à la grille de pression. Chaque nœud est le centre d'un volume de contrôle, associé aux champs scalaires du problème physique (pression, température...). Au centre des faces de ce volume de contrôle sont définies les grandeurs vectorielles ou flux (vitesse selon $x...$). La viscosité est enfin interpolée aux coins du volume de contrôle. Ce maillage et les positions d'interpolations sont illustrés en figure 3.4.

Ce choix de maillage provoque l'apparition de nœuds inutiles situés à l'extérieur du domaine physique.

La résolution usuelle de ce type de problème consiste à résoudre les équations dans des sous-domaines homogènes, ce qui nécessite des lois de raccordement aux interfaces. Dans Aquilon, les équations sont résolues sur l'ensemble du domaine de calcul. Toutefois afin de conserver la cohérence physique du problème, un système de pénalisation permet de différencier les différentes zones du domaine, et d'imposer – par exemple – une vitesse nulle dans les parties solides.

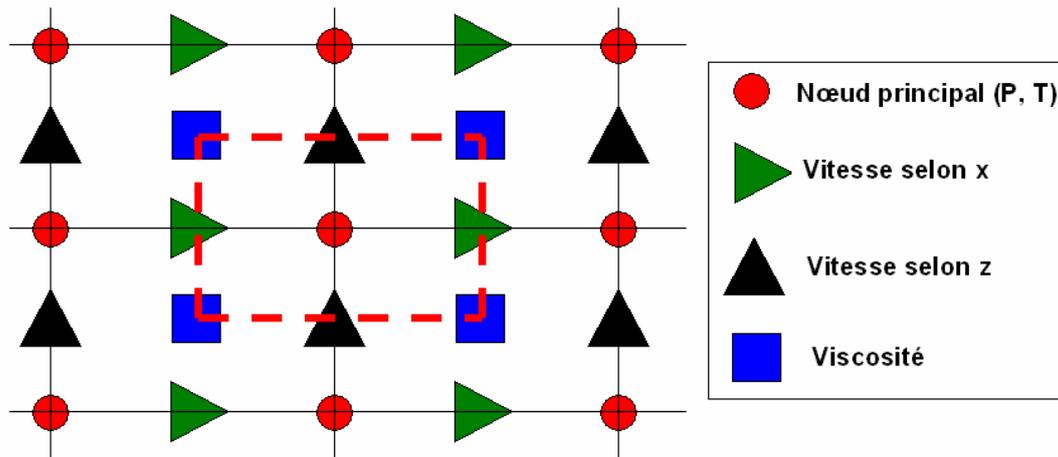


Figure 3.4: Maillage décalé dans Aquilon. La surface délimitée par le périmètre en pointillés rouges représente un volume de contrôle.

3.3.2.2 Pénalisation et équations numériques

L'idée de ce terme de pénalisation provient de la théorie de Brinkman en mécanique des fluides [Arquis, 1984]. Elle revient à considérer le domaine de calcul comme un milieu poreux, dont la perméabilité est une fonction de l'espace. Lorsque la perméabilité est grande ($K \rightarrow \infty$), le milieu est équivalent à un fluide. Lorsqu'elle est nulle, en revanche, le milieu est assimilable à un milieu solide imperméable. Une valeur intermédiaire permet de modéliser un milieu poreux de perméabilité K . Notons que ce système de pénalisation permet de modéliser des géométries complexes (mais les approxime sous forme de marches d'escaliers), et des obstacles mobiles.

Complétée de la sorte, l'équation de Navier-Stokes devient une équation de Navier-Stokes-Brinkman :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \cdot \vec{V} \right] - \frac{\mu}{K} \vec{V} = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\overline{\nabla \vec{V}} + {}^t \overline{\nabla \vec{V}} \right) \right] \end{cases} \quad (3.12)$$

On a ainsi traduit la porosité du milieu mais également la possibilité d'intégrer au modèle des obstacles solides. D'autres termes peuvent toutefois s'avérer nécessaires comme l'existence d'une source, l'introduction d'un terme de frottement proportionnel à la vitesse et la prise en compte des conditions limites. Ce qui donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{V} = 0 \\ \rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \cdot \vec{V} \right] + \alpha \vec{V} - \frac{\mu}{K} \vec{V} - Bi_V (f_{\text{lim}}(\vec{V}) - \vec{V}_0) + \vec{S} \\ = -\vec{\nabla} p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\overline{\nabla \vec{V}} + {}^t \overline{\nabla \vec{V}} \right) \right] \end{array} \right. \quad (3.13)$$

Le terme $Bi_V (f_{\text{lim}}(\vec{V}) - \vec{V}_0)$ sert à définir les conditions limites [Angot, 1998]. Lorsque Bi_V est très grand, ce terme devient prépondérant et le solveur donne alors $f_{\text{lim}}(\vec{V}) = \vec{V}_0$, ce qui correspond à l'imposition d'une condition limite de Dirichlet. A l'inverse, pour obtenir une condition de Neuman, on prendra Bi_V nul. Enfin un choix judicieux de Bi_V et V_0 permet de reproduire des conditions de Fourier. A noter que f_{lim} est une combinaison de \vec{V} découlant du maillage décalé et permettant l'imposition d'une vitesse sur la limite physique.

De même, on obtient pour l'équation de l'énergie la forme suivante :

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \cdot T \right] + \alpha T - Bi_T (T - T_0) = \nabla \cdot (\lambda \overline{\nabla T}) + \Phi + S \quad (3.14)$$

Ce système de pénalisation nous permet donc de définir les conditions limites et les différentes phases physiques du problème. Des termes supplémentaires sont alors ajoutés aux équations physiques pour la mise en œuvre de cette pénalisation. Ce travail de stratégie numérique mis en place, nous allons pouvoir nous attaquer à la phase numérique à proprement parler, en commençant par les problèmes de discrétisation.

3.3.3 Discrétisation spatiale et temporelle

3.3.3.1 Discrétisation temporelle

Deux stratégies de discrétisation temporelles s'offrent à nous : une discrétisation explicite, qui consiste à exprimer les inconnues au temps $n+1$ en fonction des inconnues au temps n et la discrétisation implicite, où toutes les inconnues sont exprimées au temps $n+1$. La discrétisation explicite permet de s'affranchir de la résolution d'un système linéaire, ce qui représente un gain important en termes de temps de calcul. Toutefois le choix du pas de temps doit respecter la condition de Courant-Friedrichs-Lewy qui dit que :

$$\vec{V} \cdot \vec{e}_i \frac{\Delta t}{\Delta x_i} < 1 \quad \text{pour toute maille et toute direction } i \quad (3.15)$$

Où \vec{V} est la vitesse, \vec{e}_i un vecteur de la base soutenant la direction i , Δt le pas de temps, et Δx_i la taille d'une maille dans la direction i .

Le pas de temps apparaît dès lors comme fortement contraint. C'est pour cette raison que la discrétisation temporelle choisie ici est implicite. Inconditionnellement stable, elle permet d'atteindre rapidement des régimes stationnaires en prenant des pas de temps très grands. Elle nécessite toutefois la résolution du système linéaire dont la taille et le conditionnement peuvent s'avérer problématiques. Les forts gradients de viscosité et de masse volumique affectent notamment le conditionnement.

La forme générale de la discrétisation temporelle d'une fonction f au pas de temps $n + 1$ s'écrit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)^{n+1} = \frac{a_1 \cdot f^{n+1} + a_2 \cdot f^n + a_3 \cdot f^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.16)$$

où a_1 , a_2 et a_3 sont les coefficients à définir.

Rappelons que pour un schéma d'Euler d'ordre 1, ces coefficients sont définis par

$$a_1 = 1 \quad , \quad a_2 = -1 \quad \text{et} \quad a_3 = 0$$

Pour un schéma de Gear d'ordre 2, ces coefficients prennent alors les valeurs suivantes :

$$a_1 = \frac{3}{2} \quad , \quad a_2 = -2 \quad \text{et} \quad a_3 = \frac{1}{2}$$

Il ne reste donc plus qu'à linéariser les équations en écrivant les termes non linéaires à deux instants différents n et $n + 1$. La masse volumique ρ et la viscosité μ peuvent également s'avérer source de non-linéarité et sont donc évaluées à l'instant n . De cette manière, les équations s'expriment de la sorte :

$$\begin{aligned} \rho^n \left[\frac{V^{n+1} - V^n}{\Delta t} + (\vec{v}^n \nabla) \cdot \vec{v}^{n+1} \right] + \alpha \vec{v}^{n+1} - \frac{\mu^n}{K} \vec{v}^{n+1} - B_i (\vec{v}^{n+1} - \vec{v}_0) + \vec{S} \\ = -\overline{\nabla p^{n+1}} + \rho^n \vec{g} + \nabla \cdot \left[\mu^n \left(\overline{\nabla \vec{v}^{n+1}} + {}^t \overline{\nabla \vec{v}^{n+1}} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

La linéarisation de certains termes (ρ et μ) fait qu'on parle de méthode semi-implicite de discrétisation temporelle.

3.3.3.2 Couplage vitesse-pression

La résolution des équations de Navier-Stokes pose le problème du traitement du couplage vitesse-pression. En effet, aucune équation explicite ne permet le calcul de la pression. La stratégie choisie ici consiste à résoudre l'équation de conservation de la masse sous contrainte de l'équation de conservation de la quantité de mouvement par la technique du Lagrangien augmenté [Fortin et Glowinski, 1982]. La pression, découplée de la vitesse, joue alors le rôle de

multiplicateur de Lagrange. Utilisée au laboratoire MASTER puis TREFLE ([Vincent, 1999], [Glockner, 2000], [Breil, 2001]), cette méthode se matérialise par l'usage des paramètres dp et dr qui permettent le contrôle de l'équation d'incompressibilité. Les itérations (notées k) sont répétées jusqu'à ce que la valeur moyenne de la divergence de la vitesse dans l'ensemble du domaine soit suffisamment petite. En notant K le nombre maximal d'itérations nécessaire à la satisfaction du critère, l'algorithme itératif d'Uzawa pour le Lagrangien Augmenté donne :

- **Initialisations:** $\vec{V}|^{k=0} = \vec{V}|^n$ et $p|^{k=0} = p|^n$
- **Itérations:** pour $k = 0$ à $K-1$, faire
 - Calcul de $\vec{V}|^{k+1}$ solution de l'équation:

$$\rho|^n \left(\frac{\vec{V}|^{k+1}}{\Delta t} + \vec{V}^k \cdot \overline{\nabla} \vec{V}^{k+1} \right) + \overline{Bi}_v \left(f_{\text{lim}}(\vec{V}|^{k+1}) - \vec{V}_\infty \right)$$

$$= \rho|^n \vec{g} - \vec{\nabla} p|^k + \nabla \cdot \left[\mu|^n \left(\overline{\nabla} \vec{V}|^{k+1} + {}^t \overline{\nabla} \vec{V}^{k+1} \right) \right] + \rho|^n \left(\frac{\vec{V}^n}{\Delta t} \right) + dr \vec{\nabla} (\nabla \cdot \vec{V}^{k+1})$$
 - Calcul de $p|^{k+1}$ à partir de l'équation:

$$p|^{k+1} = p|^k - dp \nabla \cdot \vec{V}^{k+1}$$
- **Solutions:**
Avec K le nombre maximal d'itérations nécessaire à la satisfaction du critère

$$\vec{V}|^{n+1} = \vec{V}|^{k=K} \quad \text{et} \quad p|^{n+1} = p|^{k=K}$$

Lorsque les équations sont au préalable adimensionnées, c'est à dire lorsque les grandeurs physiques associées au champ de vitesse \vec{V} et à la pression p , sont de l'ordre de un, les deux paramètres sont également de cet ordre. Cependant, Aquilon est développé en variables réelles et les paramètres numériques dp et dr demandent un ajustement « manuel ». Plus ces paramètres sont importants et plus la résolution favorise une divergence de vitesse nulle. Malheureusement c'est au détriment de la résolution des équations de conservation de la quantité de mouvement.

Il est à noter que l'algorithme du Lagrangien Augmenté permet de s'affranchir des conditions limites sur la pression.

3.3.3.3 Discrétisation spatiale

Concernant l'interpolation spatiale, les termes de diffusion et du Lagrangien Augmenté rencontrés dans l'équation de Navier-Stokes sont discrétisés selon un schéma d'ordre 2.

Diverses méthodes d'interpolation conduisent aux schémas numériques classiques suivants :

- le schéma centré

C'est le plus simple qui soit. La variable $\Phi|_{i+1/2}$ à l'interface est évaluée linéairement à partir d'une formule de Taylor tronquée à l'ordre 2. Cela revient à faire une moyenne pondérée entre les nœuds $\Phi|_i$ et $\Phi|_{i+1}$.

$$\Phi|_{i+1/2} = \frac{\Delta xc_{i+1} \Phi|_i + \Delta xc_i \Phi|_{i+1}}{2\Delta xg_{i+1}} \quad (3.18)$$

Où Δxg est la distance entre deux nœuds, tandis que Δxc est la longueur du volume de contrôle autour du nœud considéré. La figure 3.5 illustre la définition de ces longueurs.

Cette expression devient une simple moyenne arithmétique dans le cas d'un maillage uniforme.

- **le schéma upwind ou simple amont**

La valeur $\Phi|_{i+1/2}$ est remplacée par celle située en amont de l'interface.

$$\Phi|_{i+1/2} = \begin{cases} \Phi|_i & \text{si } V_x|_{i+1} > 0 \\ \Phi|_{i+1} & \text{si } V_x|_{i+1} < 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

- **le schéma hybride**

Il est basé sur le nombre de Péclet exprimant le rapport entre les forces convectives et les forces diffusives. Ce nombre détermine le type de schéma utilisé:

- dans le cas où $Pe \leq 2$, il est équivalent au schéma centré
- lorsque $Pe \gg 2$, son comportement se rapproche du schéma upwind.

- **le schéma quick**

L'évaluation de l'inconnue sur la face $i+1/2$ du volume de contrôle est basée sur une interpolation quadratique à partir de deux nœuds situés en amont et d'un nœud situé en aval de l'interface.

- dans le cas où la vitesse $V_x|_{i+1/2}$ est négative, une interpolation polynomiale à partir des valeurs $\Phi|_i$, $\Phi|_{i+1}$ et $\Phi|_{i+2}$ est effectuée:

$$\Phi|_{i+1/2} = \frac{(\Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_{i+2})\Delta xc_{i+1}}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1})(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_{i+2})} \Phi|_i + \frac{1}{2} \frac{\Delta xc_i \Delta xc_{i+1}}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1})\Delta xg_{i+2}} \Phi|_{i+1} - \frac{1}{2} \frac{\Delta xc_i \Delta xc_{i+1}}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_{i+2})\Delta xg_{i+2}} \Phi|_{i+2} \quad (3.20)$$

- dans le cas où la vitesse $u|_{i+1/2}$ est positive, une interpolation polynomiale à partir des valeurs $\Phi|_{i-1}$, $\Phi|_i$ et $\Phi|_{i+1}$ est effectuée:

$$\Phi|_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \frac{\Delta xc_i \Delta xc_{i+1}}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_i)\Delta xg_{i+2}} \Phi|_{i-1} + \frac{1}{2} \frac{(\Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_{i+2})\Delta xc_{i+1}}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1})\Delta xg_i} \Phi|_i + \frac{(\Delta xc_i + 2\Delta xg_i)\Delta xc_i}{(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1})(\Delta xc_i + \Delta xc_{i+1} + 2\Delta xg_i)} \Phi|_{i+1} \quad (3.21)$$

Les différents schémas numériques sont représentés sur la figure 3.5.

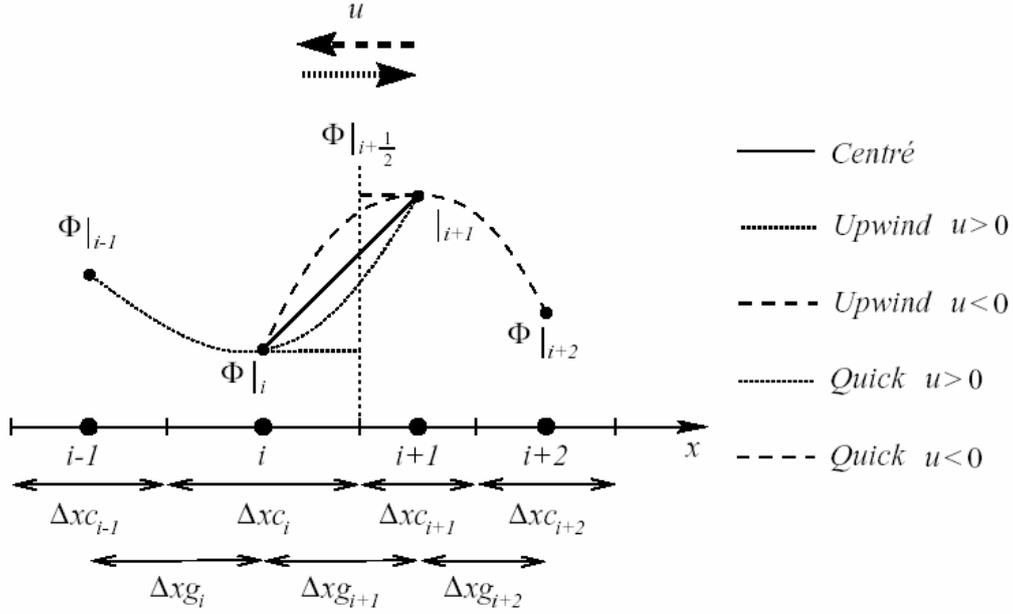


Figure 3.5 : Schémas numériques pour l'évaluation de Φ à l'interface $i+1/2$.

Nous avons finalement opté pour un schéma de type upwind pour les équations de Navier-Stokes (pas d'oscillation, stabilité et bonne convergence observée) et de type hybride pour l'équation de l'énergie (en rapport avec le Nombre de Péclet, ce schéma s'adapte bien à notre configuration thermique).

3.3.4 Solveurs et algorithmes de résolutions

Le calcul de Φ^{n+1} passe par la résolution du système linéaire. Différentes méthodes peuvent alors s'appliquer telles les méthodes directes (LU, Cholesky) ou les méthodes itératives classiques (Jacobi, Gauss-Seidel, relaxation, gradient conjugué...).

Nous intéressants à des écoulements stationnaires fortement visqueux sous haute pression, nous avons rencontré des difficultés à converger avec le solveur itératif de type bi-gradient conjugué classiquement utilisé dans Aquilon pour ses performances élevées ([Vandervorst, 1992]). Nous avons finalement opté pour l'utilisation d'un solveur direct (SuperLU, MUMPS).

3.4 Validation du code et choix du maillage

Le chapitre 3 de la thèse de doctorat de Karkri [Karkri, 2004] fait une première validation du code de calcul Aquilon pour l'écoulement de polymère fondu dans une filière plate, notamment sur l'aspect du calcul thermique en comparant les résultats de la simulation aux solutions analytiques proposées par Agassant [Agassant et al, 1996]. Nous nous sommes donc concentrés sur l'aspect écoulement de la simulation, directement relié à la rhéologie du polymère.

Deux aspects de cet écoulement nous concernent particulièrement : la résolution du champ de vitesse que l'on souhaite aussi exacte que possible, et la valeur du débit, accessible expérimentalement. Le débit obtenu lors d'une simulation numérique est calculé par une méthode des trapèzes et dépend donc directement du champ de vitesse et du maillage appliqué. L'examen de ces paramètres va donc nous permettre de sélectionner un maillage adéquat pour le canal d'extrusion.

Avant toute chose, nous avons effectué notre validation sur un écoulement newtonien dans notre filière plate, dont la solution analytique est connue :

$$\begin{cases} V_x(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\Delta p}{\mu L} \left[\left(\frac{h}{2} \right)^2 - z^2 \right] & \text{si } z \in \left[-\frac{h}{2}; \frac{h}{2} \right] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ V_z = 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

Avec V_x et V_z les vitesses selon les axes x et z , Δp le différentiel de pression imposé d'une extrémité à l'autre de la filière plate, μ la viscosité, L la longueur de la filière, h la hauteur et z l'ordonnée dont la référence se trouve au centre de la filière.

Les travaux de Samuel Fin [Fin, 2004] ont montré que l'écoulement d'un polymère fondu (de forte viscosité) est symétrique par rapport à l'axe (x) et qu'il suffit donc de faire le calcul sur une demi-filière. Sur la figure 3.6, nous présentons la résolution de l'écoulement ainsi défini, pour un maillage à pas constant. La viscosité est prise à 5000 Pa.s pour une pression de 2×10^7 Pa. La longueur L et la hauteur h de la filière sont conservées (respectivement 0.2 et 2×10^{-3} m). La vitesse moyenne de l'écoulement est de 6.67×10^{-3} m.s⁻¹.

Le premier graphe montre un excellent accord du champ de vitesse calculé avec la solution analytique : l'écart en norme infinie est de 10^{-10} même pour un maillage de 10 mailles pour le demi-canal. Le deuxième montre que la précision du calcul du débit dépend fortement du maillage selon z . Néanmoins même pour 10 mailles pour le demi-canal le débit est obtenu avec une précision de 0.2%. On constate également la convergence du premier ordre de la solution avec le nombre de mailles selon z . Le choix du maillage sera donc un compromis entre la précision nécessaire (choisie en fonction des mesures expérimentales) et le temps de calcul qu'il génère : un maillage de 200 mailles dans le demi-canal serait certainement excellent, mais aurait à terme un impact sur le temps de calcul qu'il ne justifierait pas.

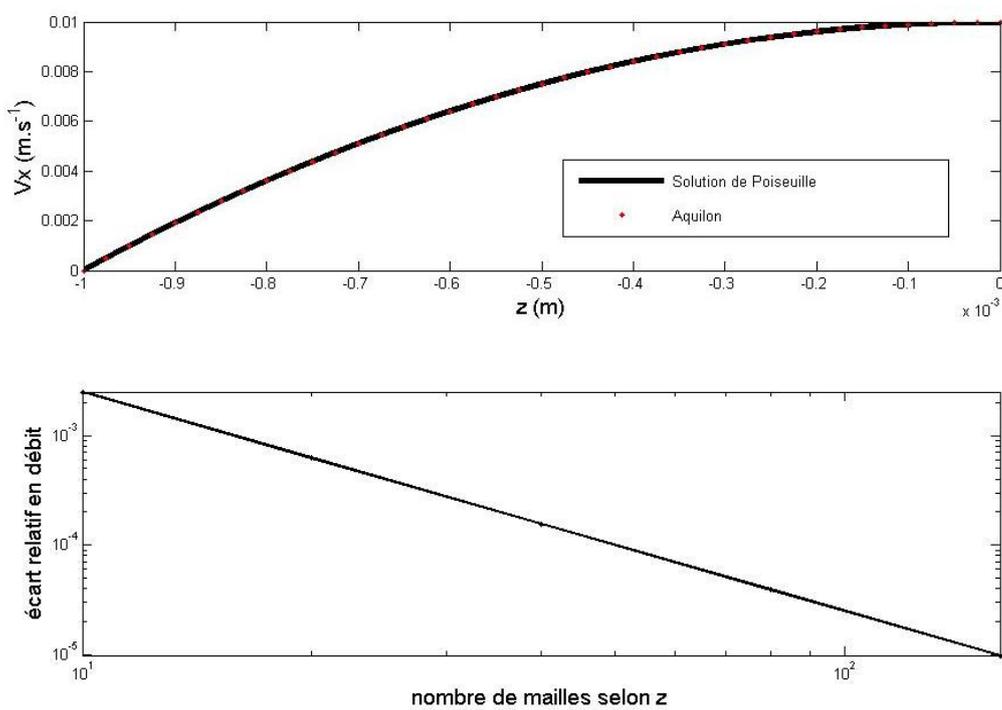


Figure 3.6 : Evaluation du calcul de l'écoulement de Poiseuille par Aquilon : en haut, comparaison du champ de vitesse, en bas, évolution de l'écart relatif du débit en fonction du maillage.

Pour un cas non newtonien, le problème est autrement plus difficile. En effet, la viscosité varie en fonction du taux de cisaillement, qui est lui même une fonction de z . En pratique, les valeurs calculées du taux de cisaillement dépendent du maillage selon z . Il faut donc reprendre notre analyse pour un cas non newtonien. Nous avons choisi une rhéologie de type loi puissance, avec une viscosité de seuil pour éviter la divergence de la viscosité lorsque le taux de cisaillement tend vers zéro. L'avantage de la loi puissance réside dans la connaissance du champ de vitesse analytique qui va nous permettre d'évaluer la qualité de notre calcul. Le champ de vitesse analytique ainsi calculé est donné par la loi suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_x(z) = \begin{cases} \frac{m}{m+1} \frac{\Delta p}{KL} \left[\left| \frac{h}{2} \right|^{\frac{m+1}{m}} - |z|^{\frac{m+1}{m}} \right] & \text{si } z \in \left[-\frac{h}{2}; \frac{h}{2} \right] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ V_z = 0 \end{array} \right. \quad (3.23)$$

avec $\mu = K\dot{\gamma}^m$

Où K est la consistance du matériau et m l'indice de pseudo-plasticité.

On réalise la même comparaison que précédemment avec $K=5\ 000\ \text{Pa}\cdot\text{s}^{n+1}$ et $n = 0.8$. La valeur de seuil a été prise pour $\dot{\gamma}=10^{-2}\ \text{s}^{-1}$, et vaut donc $12\ 559\ \text{Pa}\cdot\text{s}$. Ce choix a été fait pour limiter les ordonnées où on devait appliquer le seuil, afin de se trouver dans la configuration la plus proche possible de l'analytique. L'indice de pseudo-plasticité de 0.8 correspond à un polymère moyennement non newtonien. La vitesse moyenne d'un tel écoulement est de $1.30\times 10^{-2}\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette vitesse moyenne a été calculée à partir de la formule analytique. Le calcul numérique de l'écoulement fait intervenir une viscosité seuil qui affecte l'écoulement pour les zones de faible taux de cisaillement (au centre du canal).

Sur la figure 3.7, on constate d'abord que le champ de vitesse est proche de l'analytique, mais nettement moins bon que pour le cas newtonien. Même avec 160 mailles dans le demi-canal, on constate sur le premier graphe un décalage entre le champ de vitesse analytique et celui calculé avec Aquilon. La norme quadratique du résidu est juste inférieure à 10^{-4} , ce qui dans notre cas, signifie un écart moyen à peine inférieure au pourcent. Enfin l'évaluation du débit est très mauvaise puisque même avec 160 mailles dans le demi-canal, on a encore 2% d'écart avec le débit analytique.

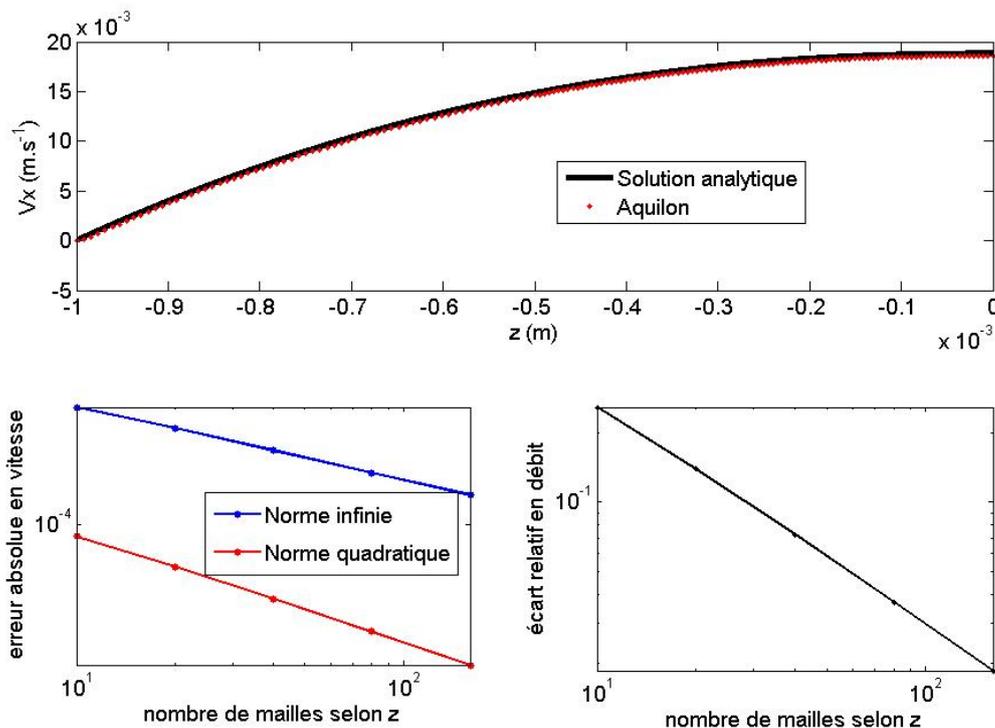


Figure 3.7 : Evaluation du calcul de l'écoulement entre deux plaques pour un fluide suivant une rhéologie de type loi puissance par Aquilon, avec un maillage constant : en haut, comparaison du champ de vitesse, en bas, évolution de l'erreur en fonction du maillage pour les normes infinie et quadratique et évolution de l'écart relatif du débit en fonction du maillage.

Ce résultat s'explique en partie par le choix du maillage constant. En effet, le taux de cisaillement ($\dot{\gamma} = \frac{\partial V_x}{\partial z}$) dépend fortement du maillage en z . Or il varie fortement au voisinage des parois du canal, ce qui incite à un maillage plus raffiné de ce côté. Par ailleurs, au centre du canal, le taux de cisaillement est nul, et la viscosité est donc égale à la viscosité de seuil. Donc plus la taille des mailles au centre du canal sera grande et plus la viscosité de seuil influera sur le résultat. Nous avons donc décidé de tester un maillage exponentiel par morceaux, permettant de raffiner au voisinage des parois et du centre du canal d'extrusion. La dimension de la plus petite maille vaut $\frac{10^{-5}}{\text{Nombre de mailles dans le demi canal}}$. Le 10^{-5} correspond à un centième de la hauteur du demi-canal, ce qui nous a semblé une bonne base de raffinement. En pratique, nous avons testé plusieurs valeurs : si celle-ci est trop grande, le raffinement est insuffisant. Si elle est trop petite, elle génère des difficultés pour la résolution des équations. La décroissance de la petite maille avec l'augmentation du nombre de mailles permet la conservation du rapport de forme et donc l'étude de la convergence en terme de maillage.

Le résultat de l'analyse est représenté figure 3.8 : on constate un accord bien meilleur entre les champs de vitesses analytique et calculé avec Aquilon. La représentation choisie pour illustrer l'accord est une configuration à 40 mailles. La norme quadratique du résidu est de 10^{-5} pour 10 mailles dans le demi-canal. Pour 40 mailles, la norme infinie du résidu (c'est à dire la valeur maximale de l'écart entre la solution analytique et le champ de vitesse calculé) est inférieure au pourcent. On constate également un meilleur accord au niveau du débit, même si la convergence en maillage n'est pas aussi rapide qu'on pourrait le souhaiter.

De cette étude, nous pouvons déduire qu'un maillage exponentiel par morceaux raffiné au centre et au voisinage des parois du canal est la solution la mieux adaptée. Pour obtenir une précision suffisante sur le débit, il nous faut considérer un minimum de 40 mailles pour le demi canal, la précision du calcul devant impérativement être meilleure que la précision de la détermination du débit expérimental, de l'ordre de 0.1%.

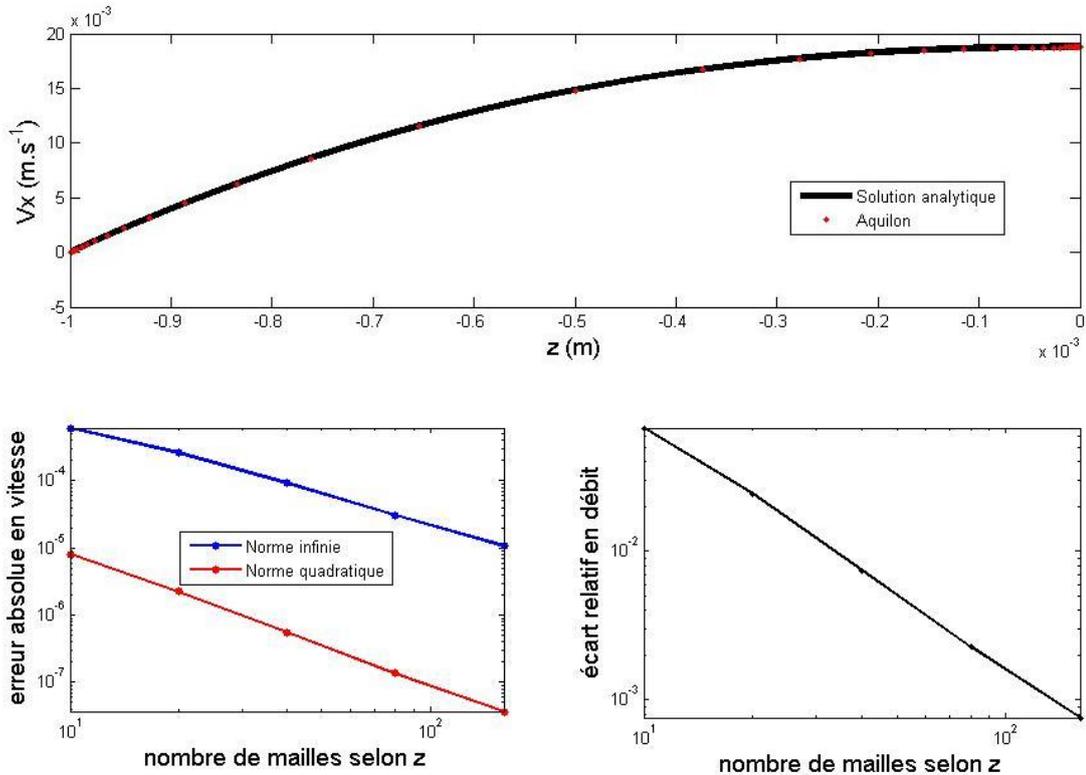


Figure 3.8 : Evaluation du calcul de l'écoulement entre deux plaques pour un fluide suivant une rhéologie de type loi puissance par Aquilon, avec un maillage exponentiel par morceaux : en haut, comparaison du champ de vitesse, en bas, évolution de l'erreur en fonction du maillage pour les normes infinie et quadratique et évolution de l'écart relatif du débit en fonction du maillage.

3.5 Conclusion sur le modèle adopté

Nous avons justifié l'emploi d'un modèle 2D pour l'écoulement d'un polymère fondu dans une filière plate d'extrusion. Dans le cas d'une régulation thermique idéale et parfaitement contrôlée, la gravité peut être négligée et le système symétrisé. Le modèle a été décliné selon les modalités du code de calcul Aquilon, utilisant la méthode des volumes finis. Un point particulier a été fait sur la façon originale de traduire la rhéologie. Enfin une étude du maillage a été faite pour assurer une qualité suffisante de la simulation de la simulation de l'écoulement.

4 Méthodes inverses

4.1 Introduction

4.1.1 De l'intérêt des méthodes inverses

L'intérêt de la modélisation réside dans le fait qu'elle permet de constituer un outil de prévision. Bien qu'une maquette puisse constituer un instrument de simulation, le formalisme mathématique est le plus usité pour la modélisation. Pour simplifier, on peut considérer qu'un modèle regroupe l'ensemble des équations mathématiques traduisant le problème physique. Une fois le modèle posé, on est alors tenté de le résoudre. La résolution peut être analytique ou numérique en fonction de la complexité du modèle choisi.

Malheureusement modéliser un problème physique nécessite un grand nombre de données parfois très difficiles voire impossibles à obtenir, par exemple un profil de vitesse en entrée de filière, une résistance thermique entre deux interfaces, la forme d'un obstacle obtenu par accréation dans une canalisation... Le problème d'inversion de mesures consiste à estimer l'information manquante en se servant de mesures expérimentales réalisées sur le système étudié. Des mesures de température et de flux en périphérie du système peuvent ainsi permettre d'estimer une résistance thermique.

De même, dans la thèse de M. Karkri [Karkri, 2004] qui étudie la filière d'extrusion présentée au chapitre 2, l'inconnue est le profil thermique d'entrée. En effet, le polymère est introduit par l'extrudeuse, puis passe dans un convergent avant de pénétrer dans la filière. Les contraintes auxquelles il est soumis activent la dissipation visqueuse, et le jeu des régulations thermiques complique la situation. Une première possibilité consisterait à modéliser le système dans son ensemble : extrudeuse + convergent et de calculer le profil thermique d'entrée. Cette solution très coûteuse en temps de calcul est également très complexe de mise en œuvre. De plus, pour s'assurer de la qualité du modèle, il faudrait vraisemblablement équiper l'extrudeuse de thermocouples supplémentaires, ce qui peut s'avérer onéreux. Une autre méthode, choisie par M. Karkri consiste à estimer ce profil d'entrée à l'aide d'une méthode d'inversion de mesures de températures le long du canal d'extrusion.

En pratique, on fait une estimation initiale sur ce qu'on cherche à estimer et on résout ce qu'on appelle le problème direct, c'est à dire la détermination des variables d'état par la résolution des équations en considérant connues toutes les constantes, conditions limites et sources du système. Puis on quantifie l'écart aux observables réelles au moyen d'un critère. La résolution du problème inverse consiste à améliorer notre estimation de départ en minimisant le critère. Pour information, on distingue un certain nombre de problèmes inverses classiques [Le Niliot, 2003] :

- estimation de géométrie de domaine
- estimation de paramètres
- estimation d'un état initial – on parle souvent de reconstruction d'un état initial

- estimation de sources
- estimation de conditions aux limites

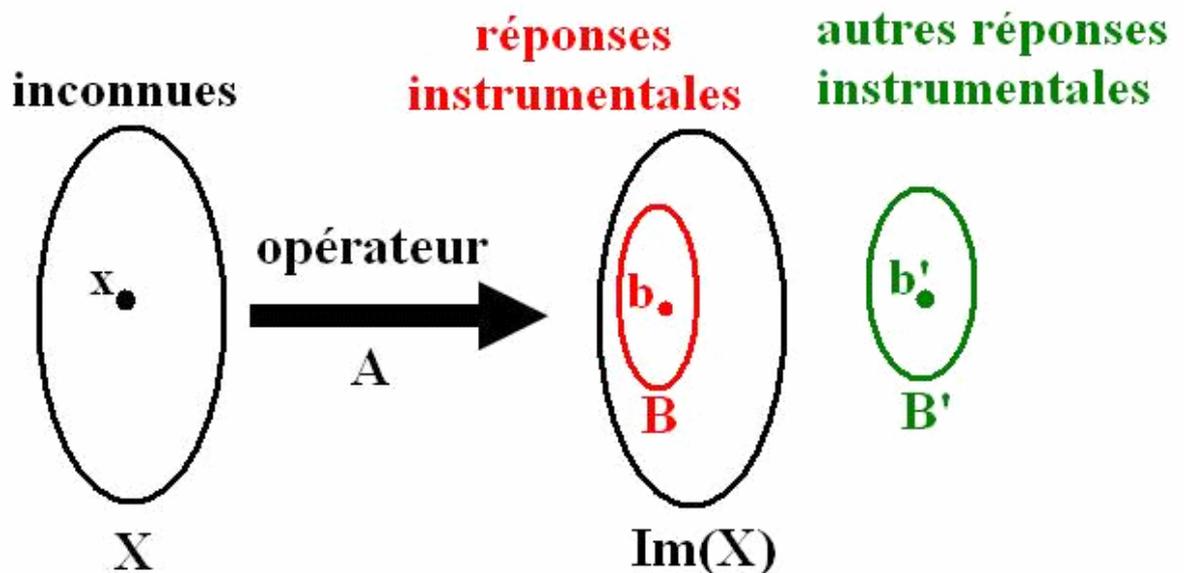
Ces problèmes ont en commun la propriété d'être mal posés au sens d'Hadamard [Hadamard, 1923].

4.1.2 Mal posé au sens d'Hadamard

Considérons un modèle mathématique écrit sous la forme générale $Ax = b$, où A est un opérateur de type différentiel, matriciel ou intégral. Le problème inverse consiste à estimer x , connaissant b . Le problème est bien posé si

- la solution à ce problème existe
- cette solution est unique
- cette solution est stable vis-à-vis des faibles variations des données contenues dans b , c'est à dire si l'opérateur inverse A^{-1} est continu.

4.1.2.1 Existence de la solution



4.1: Existence de la solution

La figure 4.1 illustre le problème de l'existence d'une solution au problème inverse. Soit X l'ensemble des vecteurs x des inconnues à identifier. $Im(X)$ est l'image de cet ensemble appliqué à tous les x de X . Si l'ensemble des réponses instrumentales B est inclus dans $Im(X)$, alors il existe au moins un vecteur x pour lequel $Ax = b$. En revanche, si on considère un autre ensemble de réponses instrumentales B' non inclus dans $Im(X)$, il n'existe pas de x tel que $Ax = b'$.

En clair, il faut que l'opérateur A permette de décrire la situation b mesurée pour la gamme X de valeurs possibles pour les paramètres x recherchés. Ainsi pour réaliser une inversion

de mesures, la première étape consiste à s'assurer que le modèle est « complet », c'est à dire qu'il décrit l'ensemble des phénomènes non négligeables susceptibles d'aboutir à la situation décrite par les réponses instrumentales b .

4.1.2.2 Unicité de la solution

Dire que la solution est unique signifie qu'il n'existe qu'un seul x pour lequel $Ax = b$. Dans le cas où l'opérateur A est matriciel, le déterminant de A doit être non nul. Cette remarque incite à limiter le nombre de paramètres à estimer, pour éviter d'introduire implicitement des relations inutiles. Par exemple, supposons que l'objectif soit d'estimer des sources thermiques dans un problème de conduction thermique. En chercher trois alors qu'il n'y en a que deux revient à donner une équation supplémentaire pour résoudre le problème, mais celle-ci n'étant pas nécessaire, on va se retrouver avec une surabondance de solutions.

4.1.2.3 Quasi-solutions

Il apparaît que ces deux conditions ne sont pas évidentes à remplir. On pourrait croire que l'existence est simple à obtenir. C'est le cas dans un problème académique où toutes les données sont maîtrisées. Mais dans la réalité physique, les mesures qui alimentent l'inversion sont entachées d'un bruit de mesure. Il n'est alors plus possible d'obtenir b quels que soient les valeurs de x pour le modèle A choisi. Dans ce cas, on doit se contenter d'une quasi-solution, c'est à dire d'une solution qui minimise la norme quadratique :

$$\min_{x \in X} \|Ax - b\|_B^2$$

Cette quasi-solution correspond à la projection orthogonale de b sur $\text{Im}(A)$. La norme quadratique minimisée est au mieux de l'ordre de grandeur de l'erreur de mesure. Par conséquent une estimation de cette erreur de mesure permet d'évaluer la qualité maximale de l'estimation.

Dès lors qu'on a affaire à une quasi-solution, l'unicité de celle-ci ne peut pas être garantie. Afin de compenser cette difficulté supplémentaire, on peut employer des techniques dites de régularisation qui ont pour effet d'orienter la recherche de la quasi-solution.

4.1.2.4 Stabilité vis-à-vis des faibles variations

L'estimation par méthode inverse s'apparente à un algorithme de minimisation sous contrainte d'une fonctionnelle (nous donnerons plus de détails à ce propos dans la suite). Les techniques de recherche d'un minimum fonctionnent bien pour une fonctionnelle convexe.

Malheureusement dans le cas d'un problème physique non-linéaire à plusieurs variables, la fonctionnelle est rarement convexe globalement, ce qui exclut souvent l'existence d'un minimal global. En général, elle est tout de même convexe au voisinage des minima locaux. L'étendue du voisinage fixe l'importance de l'initialisation : si la fonctionnelle n'est convexe que

très près du minimum local, alors une initialisation éloignée de cette solution peut aisément converger vers une autre solution.

Deux solutions sont alors à appliquer pour améliorer la recherche : choisir une initialisation probable en fonction de considérations physiques et régulariser (c'est à dire appliquer des contraintes).

L'autre difficulté liée au problème de stabilité se rencontre lorsque la fonctionnelle est non différentiable (car discontinue par exemple). Les techniques passant par le calcul du gradient ou du Hessien de la fonctionnelle nécessitent alors un traitement supplémentaire. On peut ainsi régulariser le gradient ou le Hessien pour régler le problème de stabilité.

A présent que nous avons décrit les difficultés posées par un problème mal posé au sens de Hadamard, faisons quelques rappels bibliographiques sur les techniques inverses.

4.1.3 Rappels bibliographiques

[Bonnet et al., 1999] passe en revue les développements des techniques d'inversion de mesures dans différents domaines scientifiques, citant nombre de références dans la littérature. Il montre par là le développement et l'activité de ce domaine de recherche. D'autres signes appuient ce constat comme l'apparition de journaux scientifiques spécialisés comme *Inverse Problems*, ou la création du METTI (METrologie et Techniques Inverses), sous groupe de la Société Française de Thermique. La littérature est de ce fait abondante et la réalisation d'une synthèse complète et représentative des quatre dernières décennies est une tâche bien trop vaste pour être réalisée ici. Il existe toutefois un certain nombre d'ouvrages [Beck et al., 1985], [Hensel, 1991], [Murio, 1993], [Kurpisz et al, 1995], [Alifanov et al, 1995] et de références ([Jarny, Ozisik et Bardon, 1991], [Beck et al., 1996], [Alifanov et al., 1985], [Raynaud, Techniques Ingé, 1998], METTI...) qui permettent de faire un rapide tour d'horizon. Néanmoins on constate qu'utilisées sur des données expérimentales, les techniques inverses comportant un paramètre de stabilisation ajustable donnent toutes des résultats similaires ([Beck et al., 1996], [Raynaud, Techniques Ingé, 1998]) dans le cas du problème de conduction de la chaleur, ce qui tend à faire penser que le choix de la méthode concerne plus la facilité de mise en œuvre que la qualité du résultat.

On peut situer les précurseurs de ces techniques inverses appliquées à la thermique dans les années 70, avec les travaux de Beck et Arnold [Beck et al., 1977] et ceux de Tikhonov et Arsenin [Tikhonov et al., 1977]. Ceux-ci portent sur la résolution du Problème Inverse de Conduction de la Chaleur (dit PICC). Pour le résoudre, Beck et Arnold ont proposé la méthode de spécification de fonction, améliorée par la suite ([Beck et al., 1985]) mais également reprise et utilisée par d'autres auteurs : citons par exemple [Truffart, Jarny et Delaunay, 1993], [Maillet, Batsale et Degiovanni, 1995]. Cette méthode est toujours l'objet de plusieurs études sur sa précision ou sa stabilité [Jun Liu, 1996], [Sokala et Kruk, 2003].

On a déjà vu que le caractère mal posé des problèmes d'inversion de mesures imposait l'utilisation de fonctions de régularisation. La méthode de la spécification de fonction inclut une régularisation par l'utilisation des pas de temps futurs. D'autres régularisations classiques ont également été développées : citons la régularisation par pénalisation [Tikhonov et al., 1977], la

régularisation par troncature de spectre [Hansen, 1998] ou la régularisation itérative d'Alifanov ([Alifanov et al., 1985]). On peut également appliquer des méthodes de filtrage sur les données avant la résolution du problème inverse (méthode de mollification Murio [Murio, 1993] ou à l'aide d'un filtre de Kalman [Scarpa et Milano, 1995]. Quelques résumés de ces méthodes ont été faites par Jarny [Jarny, METTI 2005] et Bonnet [Bonnet et al, 1999] par exemple.

L'étude des problèmes inverses incluant la convection n'a commencé que tardivement mais est aujourd'hui en pleine phase de développement. On trouve par exemple, au cours des cinq dernières années, les travaux de Gejadze et Jarny [Gejadze et Jarny, 2002], de Karkri, Mousseau et Jarny [Karkri et al, 2003], [Mousseau et al, 2003], [Karkri, 2004], de Park et Shin [Park et Shin, 2003] etc...

Les problèmes inverses en mécanique touchent plus particulièrement la mécanique du solide avec la localisation de fissures par exemple. Le chapitre 10 de l'ouvrage de Bonnet donne un aperçu des travaux d'inversion en mécanique [Bonnet et al., 1999].

Concernant le domaine de la rhéologie, les écrits sont peu nombreux à l'heure actuelle. Nous pouvons citer [Gavrus et al, 1996] qui réalise une estimation de paramètres rhéologiques à partir de tests de torsion et [Lebaal et al, 2005] qui estime les paramètres d'une loi puissance à partir des mesures de pression aux extrémités d'une filière d'extrusion.

Enfin il convient de citer quelques applications de techniques inverses à des phénomènes couplés – par exemple la thèse de Poutot [Poutot, 2002] qui étudie la cinétique de cristallisation en cours de refroidissement et les travaux de Favennec [Favennec, METTI 2005] sur le chauffage par induction – dont les contraintes supplémentaires rendent la mise en œuvre plus délicate.

Nous avons évoqué un grand nombre de problèmes inverses et de solutions présentes dans la littérature, mais nous avons occulté pour le moment la résolution de la minimisation.

4.2 Méthodes classiques de minimisation et limitations

Nous avons déjà évoqué qu'un problème d'estimation par inversion de mesures consiste à minimiser une fonctionnelle – typiquement l'écart quadratique entre l'observable expérimental et les valeurs calculées de ce même observable en fonction de ce qu'on cherche à estimer. Les algorithmes de minimisation sont donc à la base de la résolution des problèmes inverses.

Il n'est pas difficile de trouver des ouvrages sur les techniques d'optimisation. A titre d'exemple les ouvrages récents suivants font quelques résumés sur les techniques classiques et ce, dans la thématique qui nous intéresse : [Baranger et al., Analyse numérique, ch 6, 1991], [Bonnet et al., Problèmes inverses de l'expérimentation à la modélisation, ch 5, 1999], [Mohammadi et Saïac, Pratique de la simulation numérique, ch 13, 2003]...

Afin d'explicitier l'intérêt de notre méthode, nous allons commencer par quelques brefs rappels sur les techniques de minimisation. Et nous allons commencer avec le cas le plus simple : la minimisation sans contrainte.

4.2.1 Minimisation sans contrainte

Tout d'abord, le problème posé consiste à minimiser la fonctionnelle $J(x)$ suivante :

$$J(x) = \min_{x \in X} \|Ax - b\|_B^2 \quad (4.1)$$

Le choix de la méthode de minimisation va bien entendu dépendre des propriétés de la fonctionnelle J . Si J est différentiable, on peut alors utiliser les méthodes classiques du gradient conjugué, du quasi-Newton ou de Marquardt-Levenberg. Ces méthodes consistent à calculer une suite de directions de descente d_n à partir du calcul du gradient $\nabla_x J(x_n)$ de la fonctionnelle puis à optimiser une profondeur de descente pdf suivant chaque direction successive :

$$\min_{p \geq 0} J(x_n + d_n \cdot pdf) \quad (4.2)$$

Chacune de ces méthodes diffère par le principe de mise en œuvre de la construction de la suite.

- le **gradient conjugué** consiste à prendre une direction de descente d_n orthogonale aux $(N-1)$ directions précédentes (N étant le nombre d'inconnues cherchées), c'est à dire $\forall i \in [n - N + 1; n - 1] \quad d_n \cdot d_i = 0$
- le **Quasi-Newton** qui suit l'algorithme de Newton avec un pseudo-hessien défini positif. Plusieurs variantes de l'actualisation du Hessien existent : les plus courantes sont la DFP et la BFGS ([Baranger et al., Analyse numérique, ch 6, 1991]).
- la méthode de **Marquardt-Levenberg** est dédiée à la minimisation des moindres carrés et s'appuie sur le calcul approché du Hessien de la fonctionnelle.

Lorsque la fonctionnelle n'est plus différentiable, on peut utiliser une méthode « probabiliste » ou « bayésienne » dans laquelle on fait une description de l'ensemble des informations a priori (incertitudes expérimentales, informations sur les paramètres inconnus...). L'ensemble de ces informations supplémentaires joue le rôle de régularisation et permet de définir des maxima de vraisemblances. Les algorithmes évolutionnaires ou génétiques peuvent également apporter une solution dans ce cas puisqu'il n'est pas besoin de calculer le gradient [Garcia, thèse de doctorat, 1999]. En revanche, ils s'avèrent coûteux en temps de calcul.

Nous avons récapitulé quelques grands noms des techniques de minimisation classiques. Toutefois notre objectif est de faire de l'inversion de mesures. Ceci implique que nous nous trouvons confrontés à un problème physique et que la solution estimée par inversion de mesures doit être physiquement acceptable. Ce constat signifie que nous allons tenter de traduire toute la physique que nous pensons liée aux phénomènes observés par des équations qui prendront leur place dans le modèle. En pratique, les problèmes inverses s'expriment donc le plus souvent avec des contraintes.

4.2.2 Minimisation avec contraintes

Si notre problème admet un nombre n de contraintes d'égalité ou d'inégalité $E_i(x)$, le problème inverse s'exprime de la sorte :

$$\begin{cases} \text{Trouver le minimum de la fonctionnelle } J \\ \text{Respecter les contraintes } E_i(x) \leq 0 \text{ pour } i = 1..n \end{cases}$$

[Mohammadi et al., 2003, 13.5.2]

On définit alors le Lagrangien Λ associé au problème de minimisation :

$$\Lambda(x, m) = J(x) + \sum_{i=1}^n m_i \cdot E_i(x) \quad (4.3)$$

Les m_i sont appelés multiplicateurs de Lagrange. Dans le cas de contraintes d'égalité, ils ne sont pas obligatoirement positifs. Le signe négatif de E signifie que lorsque la contrainte n'est pas respectée, la valeur du lagrangien augmente.

Finalement l'expression du Lagrangien est l'expression d'une nouvelle fonctionnelle. C'est à dire que le problème d'optimisation avec contraintes est ramené à un problème d'optimisation sans contrainte. On va donc pouvoir appliquer les méthodes vues au paragraphe précédent mais en les appliquant au Lagrangien Λ au lieu de la fonctionnelle J . Dans ce cas, on ne cherche plus à annuler le Lagrangien mais à le minimiser.

4.2.3 Evaluation du gradient

La plupart des méthodes déterministes de minimisation consiste à calculer la direction de descente par le calcul du gradient. Toutefois son évaluation n'est pas forcément aisée. Une méthode classique consiste à appliquer les différences finies. Cette méthode qui ne nécessite pas la connaissance des opérateurs de dérivation est ainsi souvent utilisée dans les codes commerciaux.

Si $(e_i)_{i=1..n}$ est une base de vecteurs pour x , alors les différences finies consistent à approximer la dérivée par un développement de Taylor au premier ordre qu'on peut écrire de la sorte si on s'intéresse au gradient de la fonctionnelle J :

$$\frac{\partial J(x)}{\partial x_i} \approx \frac{1}{\varepsilon} [J(x + \varepsilon \cdot e_i) - J(x)] \quad (4.4)$$

où ε est l'incrément de la différence.

En pratique, la fonctionnelle J dépend du vecteurs de paramètres x , mais également de l'opérateur \mathbf{A} . En effet, si \mathbf{A} est mal choisi (par manque d'information par exemple), la solution peut ne pas exister. On va donc noter J comme une fonction de x et de \mathbf{Ax} .

$$\frac{\partial J(x, \mathbf{Ax})}{\partial x_i} \approx \frac{1}{\varepsilon} [J(x + \varepsilon \cdot e_i, \mathbf{A}(x + \varepsilon \cdot e_i)) - J(x, \mathbf{Ax})] \quad (4.5)$$

Par la suite on notera $U = \mathbf{Ax}$, variable d'état.

Cette technique se heurte alors aux difficultés suivantes :

- Le choix de l'incrément n'a rien d'évident, surtout lorsque les paramètres x_i ont des ordres de grandeur différents.
- Cette méthode nécessite le calcul du problème direct $N+1$ fois par itération, avec N le nombre de dimensions de x .

On peut également utiliser la méthode de la dérivation directe ou analytique. En pratique, on dérive les équations continues puis on passe à la discrétisation. L'évaluation du gradient est alors exacte, ce qui améliore la convergence des algorithmes d'optimisation. Cette méthode consiste finalement à résoudre le problème de sensibilité, qui permet notamment de définir judicieusement les conditions expérimentales optimales pour l'estimation souhaitée. Toutefois, là encore, il est nécessaire de résoudre un problème de sensibilité par inconnue à estimer [Favennec, 2005]

Une autre méthode consiste à utiliser le Lagrangien en jouant sur la valeur des multiplicateurs de Lagrange [Mohammadi et al., 2003, 13.7.4]. En effet, en choisissant judicieusement le multiplicateur de Lagrange, on peut rendre le Lagrangien sensible qu'aux inconnues x qu'on cherche à estimer.

$$\frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial U} = \frac{\partial J(x, U)}{\partial U} + {}^t m \cdot \frac{\partial E}{\partial U} = 0 \Leftrightarrow {}^t m = -\frac{\partial J(x, U)}{\partial U} \cdot \left(\frac{\partial E}{\partial U} \right)^{-1} \quad (4.6)$$

Où U est une variable d'état.

Par définition,

$$d\Lambda(x, U) = \frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial x} dx + \frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial U} dU \quad (4.7)$$

Or avec ce choix de multiplicateur de Lagrange,

$$d\Lambda(x, U) = \frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial x} dx + 0$$

$$d\Lambda(x, U) = \frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial x} dx \quad (4.8)$$

Dès lors, le problème se pose de la façon suivante :

$$\frac{dJ(x, U)}{dx} = \frac{\partial \Lambda(x, U)}{\partial x} = \frac{\partial J(x, U)}{\partial x} + {}^t m \cdot \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \quad \text{avec} \quad {}^t m = -\frac{\partial J(x, U)}{\partial U} \cdot \left(\frac{\partial E}{\partial U} \right)^{-1} \quad (4.9)$$

La notation $\frac{dJ}{dx}$ est un abus de langage compte-tenu de la nature vectorielle de x et signifie

$$\frac{dJ}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial J}{\partial x_1} \\ \frac{\ddot{J}}{\partial x_i} \\ \frac{\ddot{J}}{\partial x_N} \end{pmatrix} .$$

La notation de dérivée exacte signifie que la dérivée partielle selon U est nulle en

raison du choix du multiplicateur de Lagrange. Le choix de ces notations s'appuie sur [Mohammadi et al., 2003, 13.7.4].

On obtient alors le gradient cherché indépendamment de N, nombre de paramètres recherchés (dimension de x). Cette méthode porte aussi le nom de méthode de l'adjoint et nous allons à présent la décrire plus en détails.

4.3 Méthode de l'adjoint

4.3.1 Le principe

Le principe de la méthode de l'adjoint consiste à exprimer le Lagrangien de la fonctionnelle à minimiser et à chercher les valeurs des multiplicateurs de Lagrange permettant d'annuler le gradient de la fonctionnelle. La résolution de l'équation adjointe permet donc d'obtenir la direction de descente et un calcul dit de sensibilité permet de déterminer la profondeur de descente. Le principe de la méthode est illustré par la figure 4.1 :

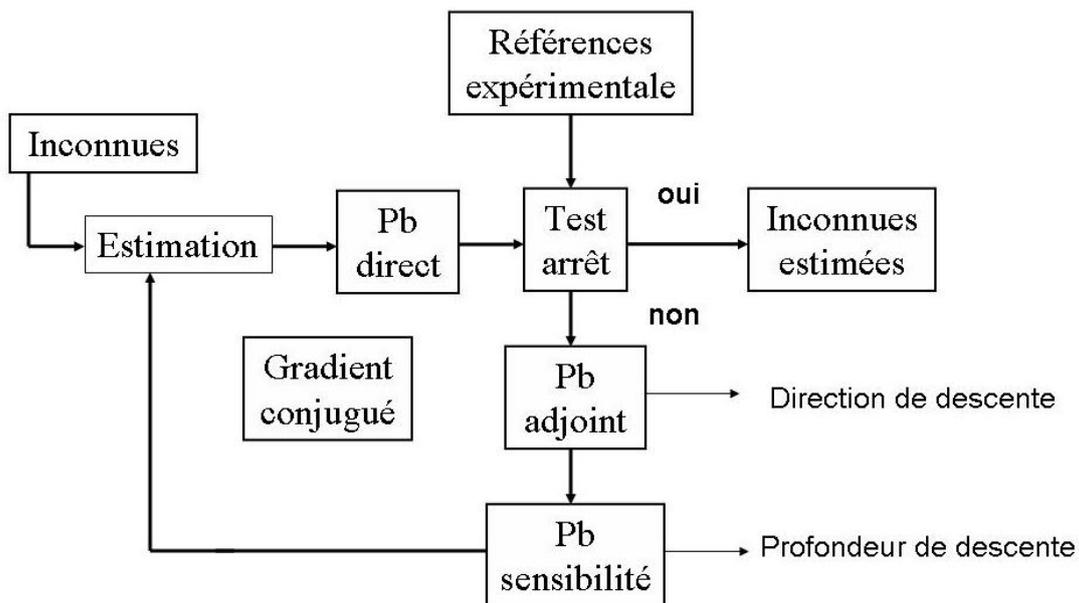


Figure 4.1: Technique de l'adjoint

Par rapport à la technique de minimisation employée, nous avons opté pour le gradient conjugué, assez simple de mise en œuvre et de convergence rapide (moins de 10 itérations en pratique).

Si x est le vecteur qu'on cherche à identifier, (x^n) la suite des valeurs de x au cours des itérations, (d^n) la suite des directions de descente associées et (pfd^n) la suite des profondeurs de descente correspondantes, on a alors :

$$x^{n+1} = x^n - pfd^n \cdot d^n \quad (4.10)$$

avec

$$d_i^n = \frac{\partial J(x^n)}{\partial x_i} + \beta_i^n \cdot d_i^{n-1} \quad (4.11)$$

où J est la fonctionnelle critère qu'on cherche à minimiser, d_i la i -ème composante du vecteur direction de descente d et

$$\beta_i^n = \begin{cases} 0 & \text{si } n = 0 \\ \frac{\left\| \frac{\partial J(x^n)}{\partial x_i} \right\|^2}{\left\| \frac{\partial J(x^{n-1})}{\partial x_i} \right\|^2} \end{cases} \quad (4.12)$$

Si U est la variable d'état calculée et \tilde{U} la mesure expérimentale, telle que la fonctionnelle critère J s'exprime $J(x) = \sum_k (U_k(x) - \tilde{U}_k)^2$, alors

$$J(x - pfd \cdot d) = \sum_k (U_k(x - pfd \cdot d) - \tilde{U}_k)^2 \quad (4.13)$$

En linéarisant, on obtient :

$$U(x - pfd \cdot d) = U(x) - pfd \cdot \sum_i \frac{\partial U(x)}{\partial x_i} \cdot d_i \quad (4.14)$$

Or on a calculé d tel que

$$U(x - pfd \cdot d) = U(x) - pfd \cdot \delta U \quad (4.15)$$

d'où

$$J(x - pfd \cdot d) = \sum_k (U_k(x) - pfd \cdot \delta U_k - \tilde{U}_k)^2 = \sum_k \left[(U_k(x) - \tilde{U}_k) - pfd \cdot \delta U_k \right]^2$$

$$J(x - pfd \cdot d) = \sum_k \left[(U_k(x) - \tilde{U}_k)^2 - 2 pfd \cdot \delta U_k (U_k(x) - \tilde{U}_k) + (pfd \cdot \delta U_k)^2 \right] \quad (4.16)$$

La condition d'optimalité s'écrit :

$$\frac{dJ(x - pfd \cdot d)}{dp} = 0 \quad (4.17)$$

c'est-à-dire

$$\sum_k [-2\delta U_k (U_k(x) - \tilde{U}_k) + 2pfd \cdot (\delta U_k)^2] = 0$$

d'où

$$pfd = \frac{\sum_k \delta U_k (U_k(x) - \tilde{U}_k)}{\sum_k (\delta U_k)^2} \quad (4.18)$$

4.3.2 Les avantages de la méthode

La méthode présentée cumule les avantages de la méthode de la dérivation analytique, qui se fait par l'écriture des équations adjointes et de sensibilité, avec un nombre de calculs du problème direct très réduit. On ne se pose donc pas le problème du choix de la variation à appliquer aux paramètres pour évaluer leur sensibilité, puisque cette variation est la résultante de la résolution du problème adjoint.

Cette méthode présente tout de même des inconvénients : de par son aspect analytique, elle demande du temps pour la programmation et la mise en œuvre. Elle doit impérativement être programmée au cas par cas, et elle n'existe pas dans des boîtes à outils de logiciels commerciaux. L'autre difficulté est d'être capable de dériver les équations, qui présentent parfois un aspect mal commode. Le développement de la méthode de l'adjoint pour la version complète des équations de Navier-Stokes est particulièrement difficile.

Toutefois une fois le cap de la programmation passée, la méthode est efficace et rapide. On peut se référer à quelques publications qui comparent cette méthode à d'autres : par exemple [Anju et al., 1997], [Favennec, 2005]... La méthode étant choisie, nous allons maintenant expliciter le travail analytique développé pour résoudre notre problème inverse.

4.3.3 Application à notre problème : écriture des équations

Nous avons à notre disposition 2 types d'informations : des débits et des températures. Par conséquent, nous devons tenir compte des équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Cependant si l'écriture des équations adjointes de l'énergie se fait bien [Karkri, 2004], l'écriture des équations adjointes de la vitesse est plus malaisée en partant de l'équation complète. Nous nous proposons donc de simplifier l'écriture de l'équation avant de passer à l'écriture de l'adjoint.

4.3.3.1 Simplifications des équations de Navier-Stokes

Rappelons tout d'abord les équations de Navier-Stokes :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right) = -\nabla p + \rho \cdot \vec{g} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\overline{\nabla \vec{V}} + {}^t \overline{\nabla \vec{V}} \right) \right] \\ \nabla (\rho \cdot \vec{V}) = 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

Où ρ est la masse volumique (kg.m^{-3}), \vec{V} le vecteur vitesse (m.s^{-1}), p la pression (Pa), \vec{g} le vecteur gravité (m.s^{-2}), μ la viscosité (Pa.s).

Nous allons à présent faire un certain nombre d'hypothèses qui vont nous permettre de simplifier considérablement l'écriture et donc la résolution de ces équations :

- stationnarité de la solution cherchée
- gravité négligeable (cf 3.2.3.2 Calcul du nombre de Stokes)
- $V_z = 0$

A température constante, la masse volumique ne varie pas et l'équation de conservation de la masse en incompressible s'écrit alors :

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_z}{\partial z} = 0$$

Or $V_z = 0$ pour tout point du domaine, donc

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} = 0$$

Ce qui implique nécessairement

$$\frac{\partial V_x}{\partial x} = 0$$

En appliquant ces hypothèses aux équations de Navier-Stokes (4.19), elles se simplifient en l'équation (4.20) :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu(\dot{\gamma}(z)) \cdot \frac{\partial V_x}{\partial z} \right) \quad (4.20)$$

Le profil de V_x en fonction de z est donc donné par l'intégrale suivante :

$$V_x(z) = \int_{\frac{h}{2}}^z \frac{1}{\mu(\dot{\gamma}(w))} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \cdot w \cdot dw \quad (4.21)$$

En supposant le profil de pression linéaire, ce qui est raisonnable si le polymère est incompressible, on a alors :

$$V_x(z) = \frac{\Delta p}{L} \cdot \int_{-\frac{h}{2}}^z \frac{1}{\mu(\dot{\gamma}(w))} \cdot w \cdot dw \quad \text{où } \Delta p \text{ est la différence de pression d'un bout à l'autre de la filière et } L \text{ la longueur de la filière.} \quad (4.22)$$

Connaissant le profil de vitesse, on obtient aisément le débit volumique :

$$Q = \frac{\Delta p}{L} \cdot \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \int_{-\frac{h}{2}}^z \frac{1}{\mu(\dot{\gamma}(w))} \cdot w \cdot dw \cdot dz \quad (4.23)$$

4.3.3.2 Applications à la méthode de l'adjoint

Comme nous avons plusieurs jeux de données expérimentales, nous pouvons augmenter le nombre d'informations sur notre système en considérant plusieurs essais simultanément.

Soit n_p le nombre d'essais à des conditions opératoires différentes (indice k).

Soit n_c le nombre de capteurs de températures dans la filière.

L'équation de Navier-Stokes simplifiée implique que le vecteur vitesse se réduit à sa composante selon x , d'où :

$$\vec{V}^k = \left\langle \vec{V}^k \middle| \vec{e}_x \right\rangle \cdot \vec{e}_x$$

De ce fait, la notation V^k se référera à la composante selon x de la vitesse, uniquement fonction de z . Notons toutefois que cette approximation n'est utilisée que dans le but de calculer les équations adjointes de la vitesse. Dans le cas du problème adjoint à la température, les deux composantes du vecteur vitesse sont prises en compte.

Soit Ω le système complet écoulement de polymère et filière. La figure 4.2 rappelle les notations relatives aux frontières données dans le chapitre de modélisation.

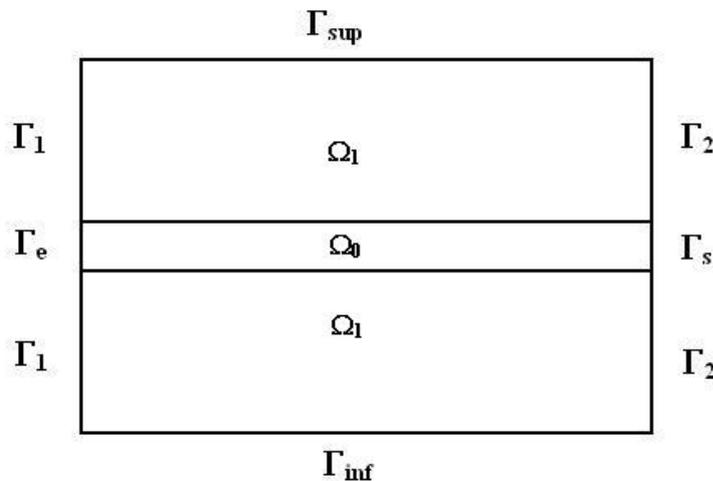


Figure 4.2 : Nomenclature des conditions limites du système

4.3.3.2.1 Problème direct

Rappelons au préalable les équations du problème direct :

- Problème direct en énergie

$$\Omega: \rho C_p \left(\overrightarrow{V}^k \cdot \overrightarrow{\nabla} \right) \cdot T^k = \nabla \cdot \left(\lambda \overrightarrow{\nabla} T^k \right) + \mu \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \quad (4.24)$$

Avec pour conditions limites :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_e : T^k(z) = T_e^k(z) \\ \Gamma_s : \frac{\partial T^k}{\partial \vec{n}} = 0 \\ \Gamma_1 : \frac{\partial T^k}{\partial \vec{n}} = 0 \\ \Gamma_2 : T^k(z) = T_2^k(z) \\ \Gamma_{\text{sup}} : T^k = T_{\text{sup}}^k \\ \Gamma_{\text{inf}} : T^k = T_{\text{inf}}^k \end{array} \right. \quad (4.25)$$

- Problème direct simplifié en vitesse :

$$\Omega: \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu(T^k, \dot{\gamma}^k) \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) = \frac{\Delta p^k}{L} \quad (4.26)$$

Avec pour conditions limites :

$$V^k \Big|_{z=\pm \frac{h}{2}} = 0 \quad (4.27)$$

4.3.3.2.2 Paramétrisation de la viscosité

Pour faciliter l'écriture du traitement analytique, la paramétrisation de la viscosité est définie comme suit :

$$\mu(T^k, \dot{\gamma}^k) = e^{\frac{A}{T^k}} \sum_{i=1}^N \mu_i \cdot \sigma_i(\dot{\gamma}^k) \quad (4.28)$$

où A est le paramètre d'Arrhénius, les $\sigma_i(\dot{\gamma}^k)$ forment une base de dimension N (le nombre d'inconnues), telles que si $\dot{\gamma}^k = \dot{\gamma}_i$, alors $\sigma_i(\dot{\gamma}^k) = 1$. L'objectif devient alors d'identifier A et les $N \mu_i$.

4.3.3.2.3 Observations et critère

Nous considérons deux phénomènes dans notre problème direct : l'écoulement et les transferts thermiques. Il nous faut donc des données expérimentales pour chaque équation :

- les températures aux points de mesure :

$$\tilde{T}_j^k = T^k(x_j, z_j) + \varepsilon_j^k(\tilde{T}_j^k, x_j, z_j) = T^k(X_j) + \varepsilon_j^k(\tilde{T}_j^k, x_j, z_j) \quad \text{pour } j=1, n_C.$$

ε représente l'erreur représentée par le bruit de mesure et les approximations de localisation de la mesure.

- le débit mesuré : $\tilde{Q}^k = \int_{\frac{z}{2}}^{\frac{h}{2}} V^k(z) dz + \varepsilon_{\tilde{Q}}^k$ où ε représente l'erreur réalisée sur le débit, relative au bruit de mesure.

Le critère à minimiser doit coupler les deux observations expérimentales et s'écrit donc :

$$J(T, V, \mu) = \alpha_T \sum_k^{n_p} \sum_j^{n_C} [T^k(X_j, \mu) - \tilde{T}_j^k]^2 + \alpha_Q \cdot \sum_k^{n_p} [Q^k(\mu) - \tilde{Q}^k]^2 \quad (4.29)$$

où α_T et α_Q sont des coefficients de pondération permettant de jouer sur l'importance relative des deux types de données expérimentales (α_T relatif à la température aux capteurs et α_Q au débit) pour favoriser l'inversion.

4.3.3.2.4 Equations adjointes

4.3.3.2.4.1 Ecriture du Lagrangien

Le Lagrangien est associé aux variables T , V et μ . Le choix des multiplicateurs de Lagrange permet de le rendre indépendant de T et V . On peut alors l'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Lambda(T, V, \mu, \psi, \varphi) = J(T, V, \mu) + \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \psi^k \left[\rho C_p \vec{V}^k \cdot \overline{\nabla T^k} - \nabla \cdot (\lambda \overline{\nabla T^k}) - \mu \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right] \cdot d\Omega \\ + \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \varphi^k \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu(T^k, \dot{\gamma}^k) \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) - \frac{\Delta p^k}{L} \right] \cdot d\Omega \end{aligned} \quad (4.30)$$

où ψ et φ sont les variables adjointes associées aux équations en température et en vitesse (selon x) et sont choisies telles que :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Lambda}{\partial T} \delta T = 0 \quad \forall \delta T \text{ admissible} \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V = 0 \quad \forall \delta V \text{ admissible} \end{cases} \quad (4.31)$$

Ces deux équations constituent les équations adjointes.

En effet, à ψ et φ fixées, T et V étant solutions du problème direct, il reste $L = J$. D'où

$$\delta \Lambda = \delta J = \frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} \delta \mu \quad (4.32)$$

4.3.3.2.4.2 Ecriture des équations adjointes

4.3.3.2.4.2.1 Equation adjointe en température

Nous allons à présent expliciter l'équation $\frac{\partial \Lambda}{\partial T} \delta T = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Lambda}{\partial T} \delta T &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Lambda(T + \varepsilon \cdot \delta T) - \Lambda(T)}{\varepsilon} \\ \frac{\partial \Lambda}{\partial T} \delta T &= 2 \cdot \sum_k^{n_p} \sum_j^{n_c} [T_j^k - \tilde{T}_j^k] \cdot \delta T^k \\ &\quad + \alpha_T \cdot \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \psi^k \left[\rho C_p \vec{V}^k \cdot \nabla \delta T^k - \nabla \cdot (\lambda \nabla \delta T^k) - \frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right] \cdot d\Omega \\ &\quad + \alpha_Q \cdot \underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \varphi^k \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \right]}_{I_T} \cdot d\Omega \end{aligned} \quad (4.33)$$

Par rapport au problème traité par Karkri [Karkri, thèse de doctorat, 2004] vient se rajouter le terme I_T :

$$I_T = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \varphi^k \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \right] \cdot d\Omega$$

$$\begin{aligned}
 I_T &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \varphi^k \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \right] \cdot dz \cdot dx \\
 I_T &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial T} \delta T^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \cdot dz \cdot dx
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

Le premier système adjoint s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
 \Omega : & \sum_{k=1}^{n_p} \left[\begin{aligned} & \alpha_T \cdot \left(\rho C_p \left(\psi^k \frac{\partial V^k}{\partial x} + V^k \frac{\partial \psi^k}{\partial x} \right) + \lambda \Delta \psi^k + \frac{\partial \mu}{\partial T} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \psi^k \right) \\ & - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial T} \frac{\partial V^k}{\partial z} \end{aligned} \right] \\
 & = 2 \cdot \sum_{k=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_c} [T^k(X_j, \mu) - \tilde{T}_j^k] \cdot \delta_{X_j}(X) \\
 \Gamma_e : & \psi^k = 0 \\
 \Gamma_s : & \lambda_{polymère} \frac{\partial \psi^k}{\partial \vec{n}} + \rho C_p \vec{V}^k \cdot \vec{n} \psi^k = 0 \\
 \Gamma_{sup} : & \psi^k = 0 \\
 \Gamma_{inf} : & \psi^k = 0 \\
 \Omega_1 : & \nabla \left(\lambda_{acier} \overline{\nabla \psi^k} \right) = 0 \\
 \Gamma_c : & \varphi^k = 0
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

où δ_{X_j} est le symbole de Kronecker appliqué ici aux coordonnées X.

4.3.3.2.4.2.2 Equation adjointe en vitesse

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Lambda(V + \varepsilon \cdot \delta V) - \Lambda(V)}{\varepsilon} \\
 \frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V &= 2 \sum_{k=1}^{n_p} \left[\varrho^k(\mu) - \tilde{\varrho}^k \right] \cdot \int_{\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \delta V^k(z) \cdot dz \\
 &+ \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \psi^k \left[\rho C_p \delta \vec{V}^k \cdot \overrightarrow{\nabla T^k} - \frac{\partial \mu}{\partial V} \delta V^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - 2\mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right] \cdot d\Omega_0 \\
 &+ \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \varphi^k \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \delta V^k \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} + \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right) \right] \cdot d\Omega_0
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Le problème s'exprime sur Ω_0 et non Ω , car dans Ω_1 , $\delta V = 0$ (pas d'écoulement dans le métal).

Avant d'aller plus loin, explicitons la dérivée de la viscosité par la vitesse :

$$\frac{\partial \mu}{\partial V} \delta V = \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial \dot{\gamma}}{\partial V} \delta V = \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right) \delta V$$

or

$$\frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right) \delta V = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[\left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^+ - \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right) \right] = \left(\frac{\partial \delta V}{\partial z} \right)$$

donc

$$\frac{\partial \mu}{\partial V} \delta V = \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \left(\frac{\partial \delta V}{\partial z} \right) \tag{4.37}$$

d'où :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V &= 2 \sum_{k=1}^{n_p} [Q^k(\mu) - \tilde{Q}^k] \cdot \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \delta V^k(z) \cdot dz \\
&+ \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \psi^k \rho C_p \delta \vec{V}^k \cdot \overrightarrow{\nabla T^k} \cdot d\Omega \\
&- \alpha_T \underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \cdot d\Omega}_{I_{V1}} \\
&- 2\alpha_T \underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \cdot d\Omega}_{I_{V2}} \\
&+ \alpha_Q \underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \varphi^k \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right) \cdot d\Omega_0}_{I_{V3}} \\
&+ \alpha_Q \underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \varphi^k \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right) \cdot d\Omega_0}_{I_{V4}}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Calcul de I_{V1} par intégration par parties :

$$\begin{aligned}
I_{V1} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \underbrace{\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2}_v \underbrace{\frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot d\Omega_0 \\
I_{V1} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2}_v \underbrace{\frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot dz \cdot dx \\
I_{V1} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \delta V^k \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left[\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right] \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
I_{V1} &= - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left[\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right] \delta V^k \cdot d\Omega_0
\end{aligned} \tag{4.39}$$

car $\delta V=0$ sur Γ_c .

Calcul de I_{V2} par intégration par parties :

$$\begin{aligned}
 I_{V2} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \underbrace{\psi^k \mu}_v \underbrace{\frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot d\Omega_0 \\
 I_{V2} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\psi^k \mu}_v \underbrace{\frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot dz \cdot dx \\
 I_{V2} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \delta V^k \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
 I_{V2} &= - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \tag{4.40}
 \end{aligned}$$

car $\delta V=0$ sur Γ_c .

Calcul de I_{V3} par intégration par parties :

$$\begin{aligned}
 I_{V3} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \underbrace{\varphi^k}_{\nu} \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right)}_{u'} \cdot d\Omega_0 \\
 I_{V3} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\varphi^k}_{\nu} \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right)}_{u'} \cdot dz \cdot dx \\
 I_{V3} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{\nu} \cdot dz \cdot dx \\
 I_{V3} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \delta V^k \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx \\
 &\quad + \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
 I_{V3} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx + \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \tag{4.41}
 \end{aligned}$$

car $\delta V=0$ sur Γ_c .

Calcul de I_{V4} par intégration par parties :

$$\begin{aligned}
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \underbrace{\varphi^k}_{v} \frac{\partial}{\partial z} \left(\underbrace{\mu \frac{\partial \delta V^k}}{\partial z} \right) \cdot d\Omega \\
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\varphi^k}_{v} \frac{\partial}{\partial z} \left(\underbrace{\mu \frac{\partial \delta V^k}}{\partial z} \right) \cdot dz \cdot dx \\
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Gamma} \varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \cdot d\Gamma - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \underbrace{\frac{\partial \varphi^k}{\partial z}}_v \underbrace{\mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot d\Omega \\
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \int_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \underbrace{\frac{\partial \varphi^k}{\partial z}}_v \underbrace{\mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z}}_{u'} \cdot dz \cdot dx \\
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \mu \delta V^k \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx + \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
 I_{V4} &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx + \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \tag{4.41}
 \end{aligned}$$

car $\delta V=0$ sur Γ_c .

D'où :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V &= 2 \sum_{k=1}^{n_p} \left[Q^k(\mu) - \tilde{Q}^k \right] \cdot \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} \delta V^k(z) \cdot dz \\
&+ \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \psi^k \rho C_p \delta V^k \cdot \underbrace{\vec{e}_x \cdot \overrightarrow{\nabla T^k}}_{\frac{\partial T^k}{\partial x}} \cdot d\Omega_0 \\
&+ \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left[\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right] \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
&+ 2 \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
&+ \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \cdot \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx + \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
&+ \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx + \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \right) \delta V^k \cdot d\Omega_0 \\
\frac{\partial \Lambda}{\partial V} \delta V &= \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega_0} \left[\alpha_T \left(\psi^k \rho C_p \frac{\partial T^k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \right) \right. \\
&+ \alpha_Q \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \right) \right) \\
&\left. + \frac{2}{L} [Q^k(\mu) - \tilde{Q}^k] \right] \delta V^k \cdot d\Omega_0 \quad (4.42) \\
&+ \underbrace{\alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \cdot \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx}_{=0 \text{ si } \varphi^k=0} \\
&+ \underbrace{\alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \mu \frac{\partial \delta V^k}{\partial z} \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx}_{=0 \text{ si } \varphi^k=0}
\end{aligned}$$

Ce qui nous donne le 2^{ième} système adjoint :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \Omega : \alpha_T \cdot \psi^k \rho C_p \frac{\partial T^k}{\partial x} + \alpha_T \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \right) + 2\alpha_T \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\psi^k \mu \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) \\
 \quad \quad \quad + \alpha_Q \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial \mu}{\partial \dot{\gamma}} \cdot \frac{\partial V^k}{\partial z} \right) + \alpha_Q \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \right) + \frac{2}{L} [Q^k(\mu) - \tilde{Q}^k] = 0 \\
 \Gamma_c : \varphi^k = 0 \\
 \Gamma_e : \psi^k = 0 \\
 \Gamma_s : \lambda_{\text{polymère}} \frac{\partial \psi^k}{\partial \vec{n}} + \rho C_p \vec{V}^k \cdot \vec{n} \psi^k = 0 \\
 \Gamma_{\text{sup}} : \psi^k = 0 \\
 \Gamma_{\text{inf}} : \psi^k = 0 \\
 \Omega_1 : \nabla \left(\lambda_{\text{acier}} \vec{\nabla} \psi^k \right) = 0
 \end{array} \right. \quad (4.43)$$

4.3.3.2.4.3 Calcul du gradient

Le gradient du critère est donné par l'expression $\frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} \delta \mu = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Lambda(\mu + \varepsilon \cdot \delta \mu) - \Lambda(\mu)}{\varepsilon}$

Soit

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} \delta \mu = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} -\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \delta \mu \cdot d\Omega + \alpha_Q \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \varphi^k \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \delta \mu \right) \cdot d\Omega$$

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} \delta \mu = \alpha_T \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} -\psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 \delta \mu \cdot d\Omega$$

$$+ \alpha_Q \left(\underbrace{\sum_{k=1}^{n_p} \int_{x=0}^{x=L} \left[\varphi^k \frac{\partial V^k}{\partial z} \delta \mu \right]_{z=-\frac{h}{2}}^{z=\frac{h}{2}} \cdot dx}_{=0 \text{ car } \varphi^k = 0} - \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \delta \mu \cdot d\Omega \right)$$

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \mu} \delta \mu = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \left[-\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \right] \delta \mu \cdot d\Omega \quad (4.44)$$

On a donc

$$\delta\Lambda = \delta J = \frac{\partial\Lambda}{\partial\mu} \delta\mu = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \left[-\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \right] \delta\mu \cdot d\Omega$$

$$\text{avec } \delta\mu = \frac{\delta A}{T} \mu + \sum_{i=1}^{n_v} \delta\mu_i \cdot e^{\frac{A}{T}} \cdot \sigma_i$$

On cherche à estimer la rhéologie donc μ et les μ_i :

$$\delta J = \frac{\partial J}{\partial A} \delta A + \sum_{i=1}^{n_v} \frac{\partial J}{\partial \mu_i} \delta \mu_i$$

soit

$$\delta J = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \left[-\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \right] \cdot \left(\frac{\delta A}{T} \mu + \sum_{i=1}^{n_v} \delta\mu_i \cdot e^{\frac{A}{T}} \cdot \sigma_i \right) \cdot d\Omega \quad (4.45)$$

On en déduit enfin l'expression des gradients :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial J}{\partial A} = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \left[-\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \right] \cdot \frac{\mu}{T} \cdot d\Omega \\ \frac{\partial J}{\partial \mu_i} = \sum_{k=1}^{n_p} \int_{\Omega} \left[-\alpha_T \psi^k \left(\frac{\partial V^k}{\partial z} \right)^2 - \alpha_Q \frac{\partial \varphi^k}{\partial z} \frac{\partial V^k}{\partial z} \right] \cdot e^{\frac{A}{T}} \cdot \sigma_i \cdot d\Omega \end{array} \right. \quad (4.46)$$

4.3.3.3 Stratégie de résolution du problème de sensibilité

La dérivation analytique du problème de sensibilité reste très complexe, en raison des multiples interdépendances des termes. Aussi avons-nous résolu le problème de sensibilité par différences finies, en appliquant aux paramètres à estimer les variations calculées par le problème adjoint. En faisant la différence entre ce nouveau problème direct et le précédent, nous avons obtenu les sensibilités en vitesse et en température, grâce auxquelles nous avons déterminé la profondeur de descente.

4.3.3.4 Régularisation

Nous avons vu que l'un des problèmes principaux était la non unicité de la solution (ou quasi-solution). Afin de restaurer ou de tendre vers cette unicité, il faut fournir à notre problème le maximum d'informations possible.

Dans notre cas, nous cherchons à obtenir les viscosités pour différentes valeurs de cisaillement. Mais nous savons aussi que notre fluide est rhéofluidifiant et qu'il admet un plateau newtonien aux faibles cisaillements. Une régularisation de la fonction peut donc se faire en imposant que la dérivée de la viscosité par la vitesse de cisaillement soit monotone, décroissante (au moins par morceaux) et négative.

La voie idéale serait de programmer directement cette contrainte supplémentaire dans les équations adjointes, mais le couplage des équations adjointes de la vitesse et de la température est déjà complexe. Aussi dans un souci de simplification de la mise en œuvre, nous avons décidé dans un premier temps d'appliquer cette contrainte après calcul suivant le schéma de la figure 4.3 :

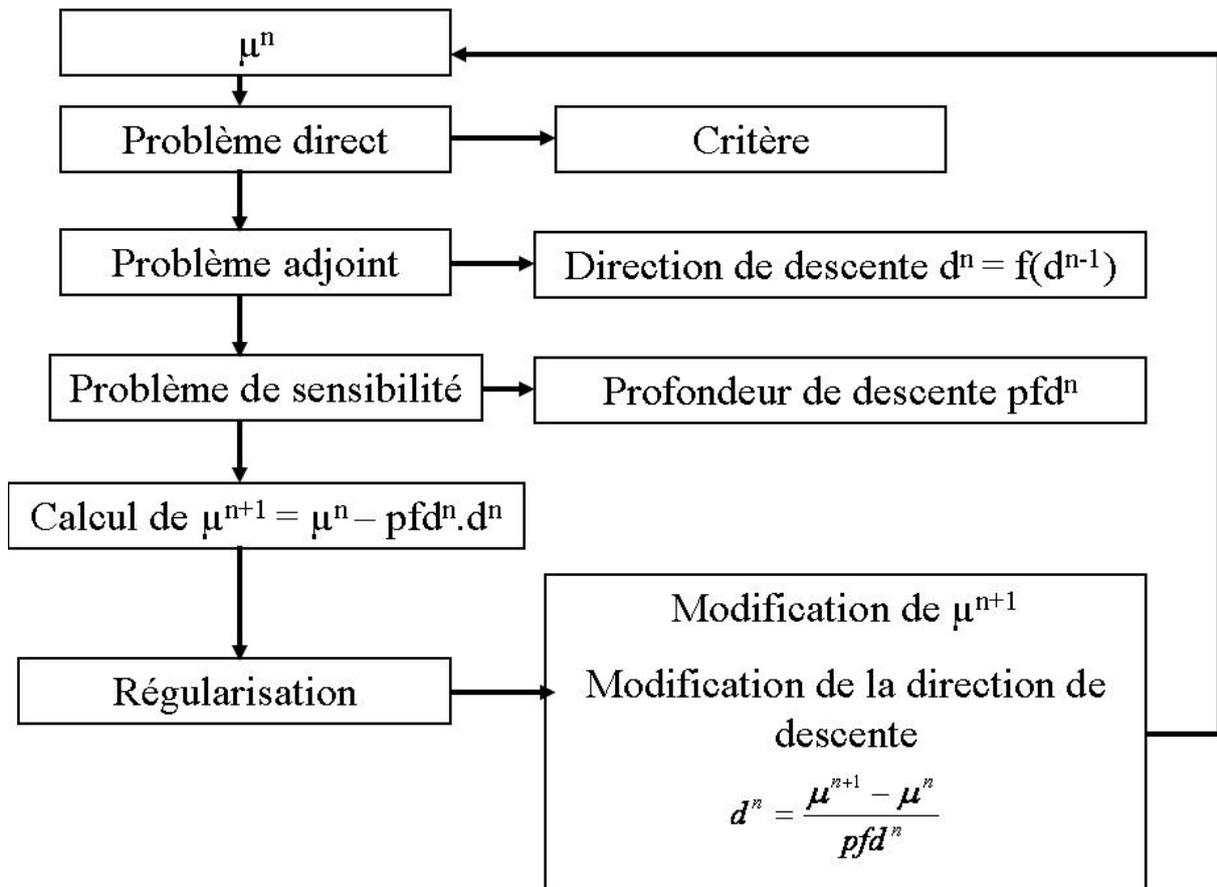


Figure 4.3 : Représentation de l'algorithme de la technique inverse avec sa régularisation.

En procédant de la sorte, on opère une régularisation par projection. La correction de la direction de descente est essentielle puisque celle-ci intervient dans l'algorithme du gradient conjugué.

4.3.4 Conclusion

Nous avons présenté de bout en bout une technique d'estimation de paramètres par inversion de mesures. Cette technique s'appuie sur les méthodes de l'adjoint et de la sensibilité. Le couplage des équations et leur complexité a nécessité l'emploi d'hypothèses simplificatrices notamment pour l'équation de Navier-Stokes. Une régularisation par projection est effectuée afin d'améliorer l'unicité de la solution (au sens des moindres carrés).

Nous allons à présent essayer d'évaluer la portée de cette technique : ses possibilités et ses limites, via une étude de sensibilité.

4.4 Etude de sensibilité

Pour qu'une technique d'estimation par inversion de mesures fonctionne, il faut que les mesures soient sensibles aux paramètres qu'on cherche à estimer. Dans un premier temps, l'effet de la viscosité sur le système est observé, en effectuant une augmentation de 1% de tous les paramètres de viscosité du modèle et en visualisant les écarts que cette modification induit sur le débit et les températures calculées aux localisations des thermocouples. Après avoir observé un effet global, nous définirons précisément les sensibilités du débit et des températures aux localisations des thermocouples par rapport aux différents paramètres de viscosité pour une rhéologie donnée. En se rappelant que le modèle rhéologique adopté associe un paramètre de viscosité à un taux de cisaillement, ces sensibilités peuvent être ramenées à une sensibilité du débit et des températures aux taux de cisaillement. Ce constat permet d'identifier la gamme de taux de cisaillement sur laquelle nous pouvons espérer estimer une loi rhéologique pertinente. A partir de ces sensibilités, nous définirons la matrice de Fisher du système afin d'essayer de calculer la précision que nous pouvons attendre des paramètres estimés.

4.4.1 Effet de la viscosité sur le système

Une condition essentielle à l'estimation par inversion de mesure est la dépendance des observables aux paramètres recherchés. Pour vérifier ce fait, nous considérons un polymère ayant pour loi de comportement rhéologique de type Carreau-Yasuda (cf 1.2.2.3.1.3) l'équation 4.47 :

$$\mu = \frac{784.82 \cdot e^{\frac{1404.15}{T}}}{\left(1 - (0.0106 \cdot \dot{\gamma})^{0.298}\right)^{\frac{1}{0.298}}} \quad (4.47)$$

Les coefficients de cette loi ont été obtenus par identification à partir des données rhéologiques obtenues pour le PEBD utilisé au cours de nos manipulations. Plus de détails à son sujet sont donnés dans le chapitre 2.

Afin d'observer l'effet de la variation de la viscosité sur les observables, les champs de vitesse et de température ont été calculés dans la filière pour cette rhéologie et la même rhéologie à laquelle une translation de +1% est appliquée. C'est à dire que pour une valeur de taux de cisaillement donné, la viscosité correspondante de cette deuxième rhéologie vaut 1% de plus. Ces tests de variation ont été effectués pour plusieurs températures de régulation (473.15, 493.15 et 513.15 K) choisies par rapport à nos manipulations expérimentales et plusieurs pressions (100×10^5 , 200×10^5 et 300×10^5 Pa). Le profil de température en entrée de filière est pris homogène et à la valeur de la température de régulation. La variation de température est représentée en variation absolue (en Kelvin), mais la variation du champ de vitesse est représentée en variation relative (en pourcentage) compte-tenu de la faiblesse des ordres de grandeur observés. Pour des commodités de calcul, et en raison de la symétrie du problème, nous

n'avons considéré que la demi-hauteur de la filière : du centre du canal d'extrusion jusqu'à la paroi supérieure. Une condition limite de symétrie est imposée au centre du canal. Les pertes thermiques latérales ont également été négligées pour cette simulation. Le système est représenté en figure 4.4.

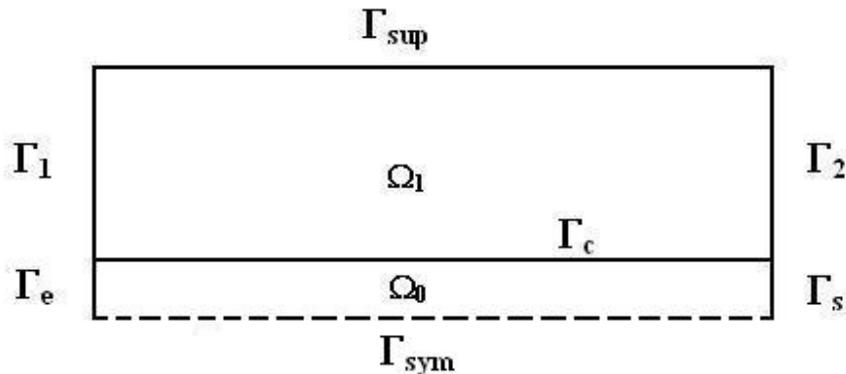


Figure 4.4 : Système étudié et nomenclature des conditions limites.

Sur la figure 4.5 sont représentées les variations de température aux thermocouples lorsque la loi de rhéologie est augmentée de 1%. Ces variations dépendent des conditions opératoires : la vitesse de rotation de la vis de l'extrudeuse qui se traduit par un gradient de pression au sein de la filière, et la température de régulation. La régulation est ici considérée parfaite, ce qui explique la diminution de la variation lorsqu'on s'approche de la sortie de filière, où la température est considérée imposée à la température de régulation.

L'influence de la pression qui conditionne le champ de vitesse et donc la dissipation visqueuse est importante. Si on considère un différentiel de pression à 200×10^5 Pa, les variations de température sont de l'ordre du centième de Kelvin lorsque la rhéologie est augmentée de 1%. Travailler expérimentalement à des pressions supérieures telles 300×10^5 Pa où la variation est encore plus importante pose malheureusement des problèmes de résistance de la filière.

Une même étude est faite pour le débit volumique. Elle est représentée en figure 4.6.

Le débit d'un fluide newtonien dans une filière plate de section rectangulaire est inversement proportionnel à la viscosité. Dès lors, une variation d'1% de la viscosité se traduit par une variation de 1% du débit. La figure 4.6 nous montre que pour un fluide non newtonien, cette différence peut-être sensiblement plus importante, lorsque le différentiel de pression augmente.

La thermodépendance influe également sur cette variation, mais son influence est amplifiée aux fortes pressions.

Les figures 4.5 et 4.6 illustrent les variations absolues de la température et relative du débit au sein du canal et montrent les modifications de l'écoulement lorsqu'on opère cette translation de +1% de la loi rhéologique. Cette approche permet d'avoir un aperçu de l'erreur commise en simulation lorsque la rhéologie est imparfaitement connue.

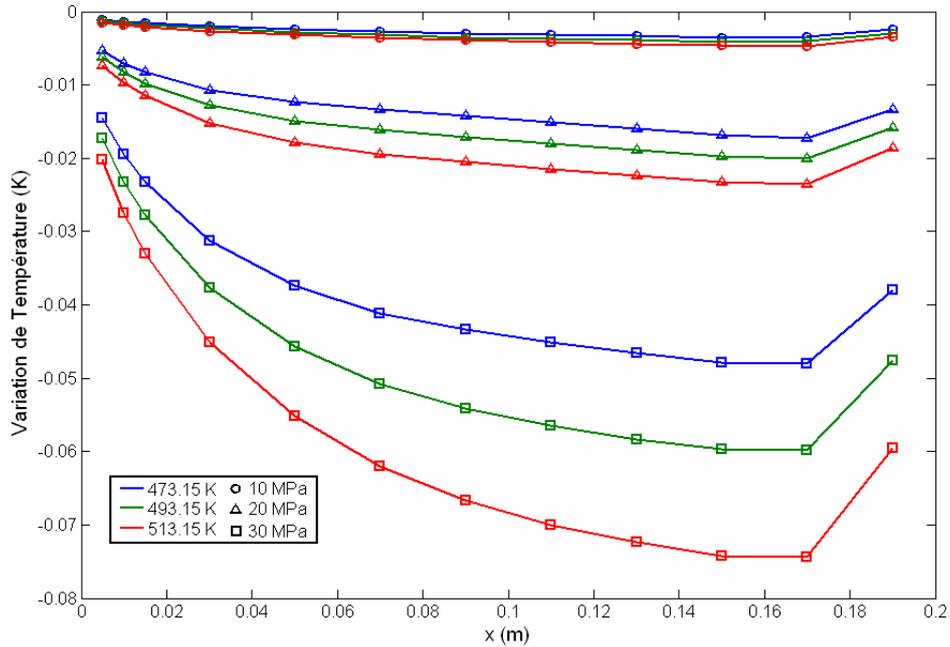


Figure 4.5 : Variation des températures aux thermocouples proches de l'interface polymère/acier, situés le long du canal d'extrusion, pour différentes conditions opératoires. La couleur renseigne sur la température et la forme sur le différentiel de pression.

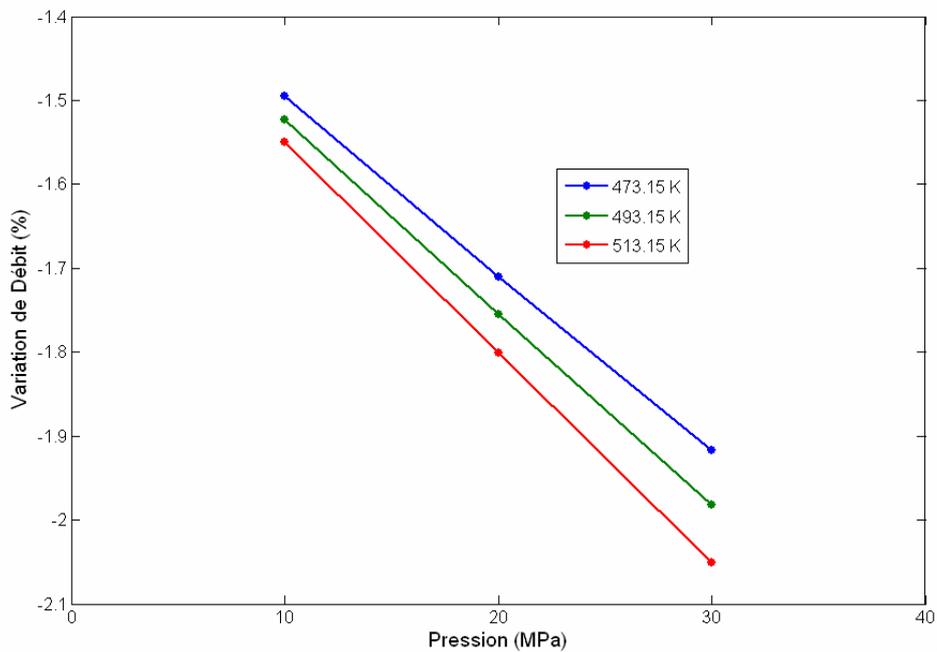


Figure 4.6 : Variation relative du débit volumique en sortie de filière en fonction du différentiel de pression dans la filière et de la température, pour une augmentation de la viscosité de 1%.

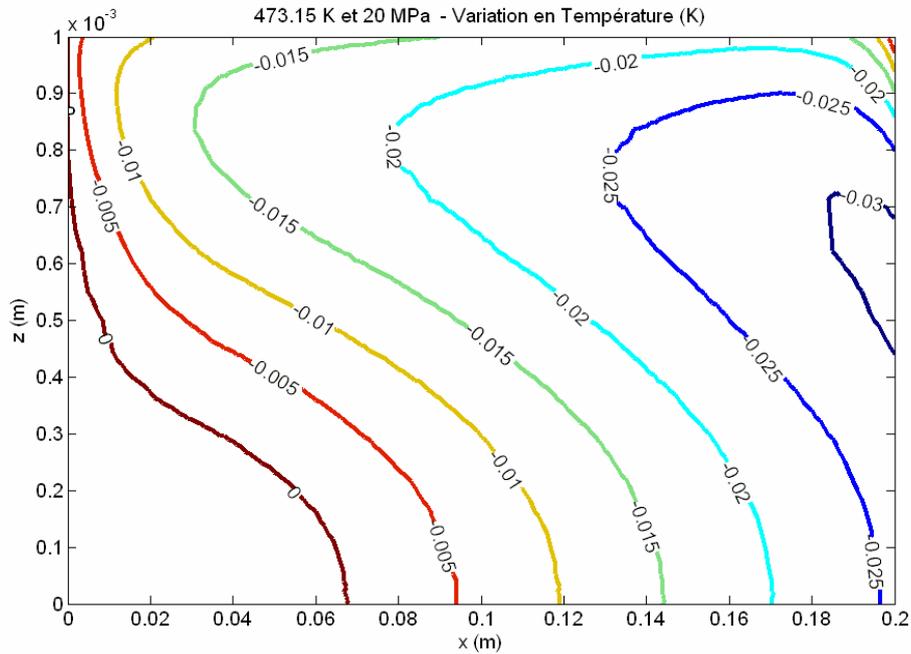


Figure 4.7 : Variation de température à l'intérieur du demi-canal d'extrusion lorsqu'on augmente la rhéologie d'1%. L'ordonnée 0 correspond au centre du canal tandis que l'ordonnée 1 mm correspond à l'interface polymère/métal. Le différentiel de pression est de 200×10^5 Pa et la température de régulation (aux interfaces métalliques non représentées ici est de 473.15 K).

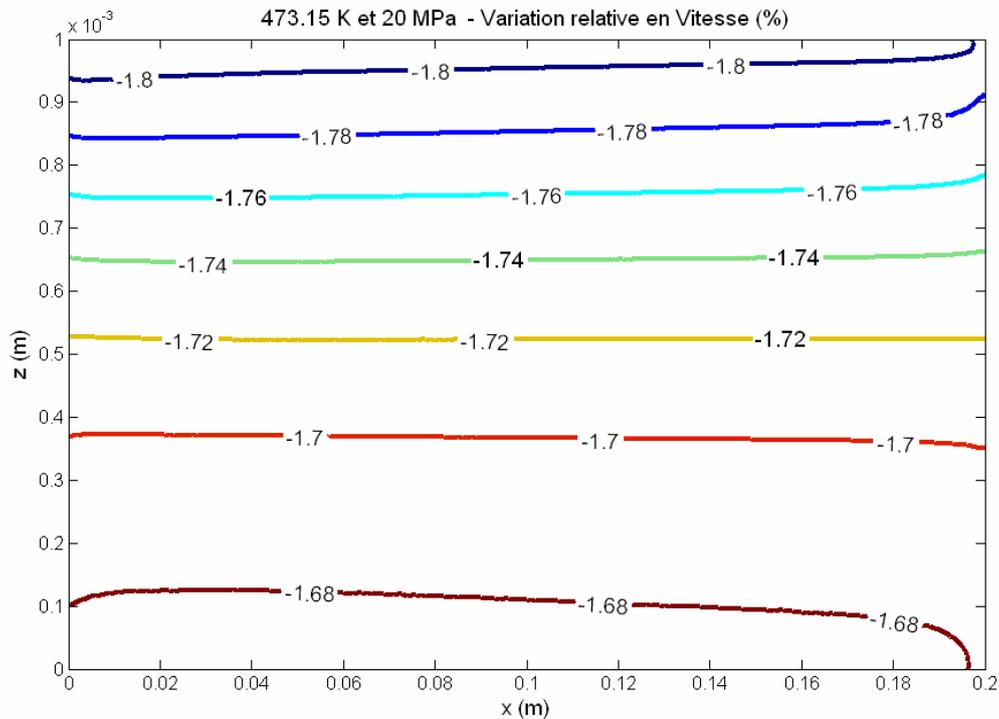


Figure 4.8 : Variation relative de vitesse à l'intérieur du demi-canal d'extrusion lorsqu'on augmente la rhéologie d'1%. L'ordonnée 0 correspond au centre du canal tandis que l'ordonnée 1 mm correspond à

l'interface polymère/métal. Le différentiel de pression est de 200×10^5 Pa et la température de régulation (aux interfaces métalliques non représentées ici est de 473.15 K).

Les figures 4.7 et 4.8 montrent les variations de température et de vitesse à l'intérieur du canal d'extrusion, c'est à dire à l'intérieur du polymère, lorsque la rhéologie est augmentée de 1% pour un différentiel de pression de 200×10^5 Pa et une température de régulation de 473.15 K. On constate que les variations sont faibles mais existent et qu'elles sont fonction de l'espace. Sur la figure 4.8, les isovitesse sont presque horizontales et correspondent grossièrement à des valeurs de taux de cisaillement (en cas de faible thermodépendance, l'écoulement est quasiment monodimensionnel et la répartition des taux de cisaillement ne dépend que de z). Les taux de cisaillement étant plus élevés autour des parois du canal, on peut en déduire que la variation du débit donnera plus d'informations sur les forts taux de cisaillements que sur les faibles.

En conclusion, les deux variables d'observation (température mesurée aux thermocouples et débit) sont bien corrélées avec la viscosité. Mais dès à présent, on voit que la sensibilité des mesures est non-linéaire et extrêmement complexe.

4.4.2 Sensibilité des mesures aux paramètres recherchés

On rappelle que la rhéologie est modélisée comme un tableau de viscosités correspondant à des taux de cisaillement. L'estimation de la rhéologie correspond donc à estimer les viscosités pour quelques valeurs de cisaillement. Par conséquent, pour étudier la sensibilité des paramètres du modèle, nous passons du modèle continu donné par l'équation (4.47) à un modèle discret explicite dans le tableau 4.1. Ces modèles ne sont pas rigoureusement équivalents : le modèle discret choisi a seulement 10 paramètres et ne peut donc être aussi précis que l'équation continue du type Carreau-Yasuda. Sur les simulations, on note un écart de 1% en débit et un écart-type sur les températures aux localisations des thermocouples de 7×10^{-3} K. Néanmoins l'objectif est l'étude de la sensibilité du débit et des températures mesurées aux paramètres du modèle discret adopté pour la technique d'estimation. Nous prenons donc ce modèle discret à 10 paramètres défini dans le tableau 1 comme référence. A noter que ces paramètres doivent être multipliés par la loi d'Arrhénius pour tenir compte de la thermodépendance. Le paramètre d'Arrhénius est gardé à 1404.15, en accord avec le modèle continu.

Tableau 4.1: Paramètres du modèle rhéologique pour le test de sensibilité

Taux de cisaillement (s^{-1})	Viscosité correspondante (Pa.s)	Viscosité augmentée d'1% (Pa.s)
7.00×10^{-3}	6.479×10^2	6.544×10^2
1.88×10^{-2}	6.083×10^2	6.144×10^2
5.03×10^{-2}	5.600×10^2	5.656×10^2
1.35×10^{-1}	5.027×10^2	5.077×10^2
3.61×10^{-1}	4.372×10^2	4.416×10^2
9.69×10^{-1}	3.657×10^2	3.694×10^2
2.60	2.919×10^2	2.948×10^2
6.96	2.205×10^2	2.227×10^2
1.86×10	1.565×10^2	1.581×10^2
5.00×10	1.037×10^2	1.048×10^2

On définit la sensibilité d'une mesure U à un paramètre p comme la dérivée de U par rapport à p :

$$S_U = \frac{\partial U}{\partial p} \quad (4.48)$$

En pratique, on estime la sensibilité en provoquant une variation d'un seul des paramètres et en observant la variation de l'observable.

Pour cette étude, l'écoulement du PEBD dans la demi-filière reste la référence. La température de régulation a été prise à 473.15 K, ce qui est le cas le plus défavorable d'après les variations observées au paragraphe 4.1. Le différentiel de pression a été choisi de 200×10^5 Pa pour que les variations ne soient pas trop petites. Pour le modèle rhéologique, la plage de taux de cisaillement significative a été identifiée entre $7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et 50 s^{-1} comme on peut le voir sur la figure 4.9. Le modèle discret adopté ayant 10 paramètres, 10 simulations ont été réalisées, dans chacune desquelles, un seul des paramètres de viscosité était augmenté de 1%. Les paramètres, à multiplier par la loi de thermodépendance d'Arrhénius, sont donnés dans le tableau 4.1.

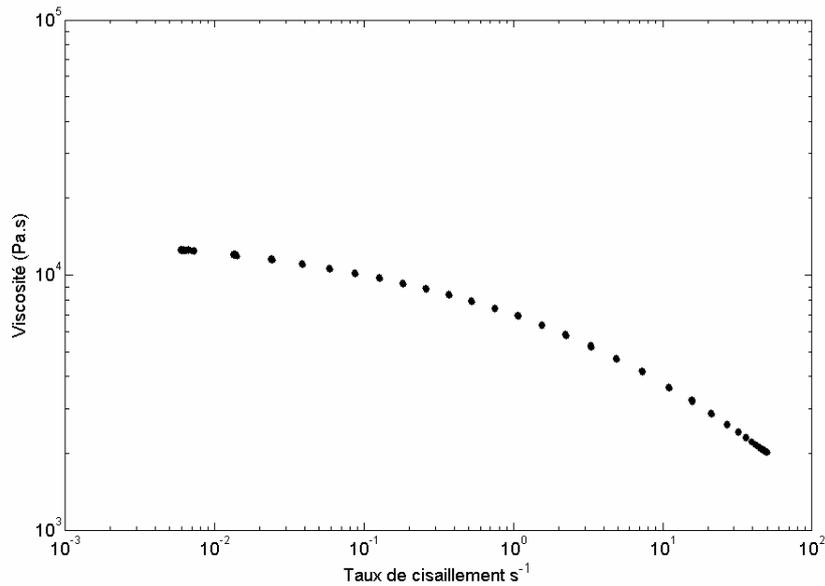


Figure 4.9 : Courbe d'écoulement du polyéthylène. Les points de la courbe correspondent à des nœuds du maillage du canal d'extrusion au cours d'une simulation pour un différentiel de 200×10^5 Pa à 473.15 K.

Afin de comparer les sensibilités entre elles, un adimensionnement de l'observable :

$$S_v^* = \frac{1}{U^{ref}} \frac{\partial U}{\partial p} = \frac{1}{U^{ref}} S_U \quad (4.49)$$

où U^{ref} est la valeur de référence de l'observable (c'est à dire la valeur obtenue avant augmentation de la loi rhéologique).

En appliquant cette notation, les sensibilités des différents thermocouples (S_T^* associées à l'abscisse de mesure) et la sensibilité du débit (S_Q^*) sont représentées en figure 4.10. La bijection entre les paramètres de viscosité du modèle et les taux de cisaillement, permet de tracer cette sensibilité en fonction du taux de cisaillement, ce qui permet d'évaluer le domaine rhéologique que nous pouvons estimer à partir de l'inversion de mesure.

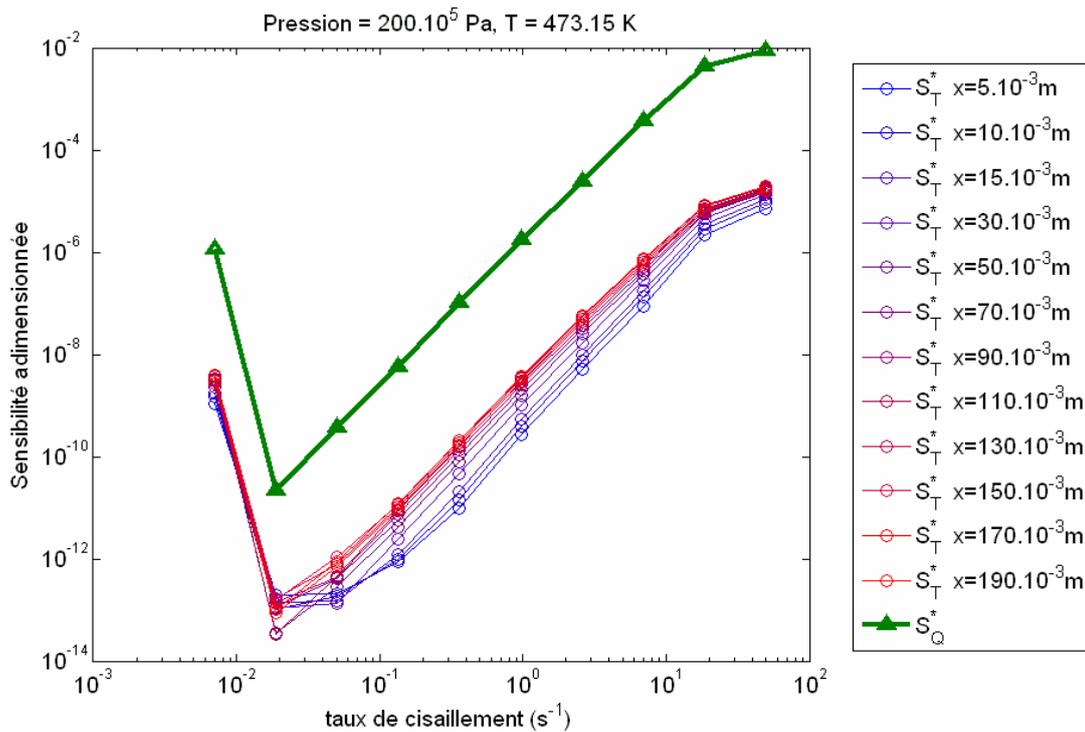


Figure 4.10 : Représentation des sensibilités des températures mesurées aux thermocouples et du débit en fonction du taux de cisaillement pour un différentiel de pression de 200×10^5 et une température de 473.15 K.

La figure 4.10 est le résultat du calcul des sensibilités. Ces sensibilités sont exprimées en $s \cdot Pa^{-1}$. En pratique, si on s'intéresse au paramètre μ_{10} , correspondant au plus fort taux de cisaillement considéré dans le tableau, une variation de ce paramètre de 1% entraîne une variation du débit de 1% et une variation de 0.001% de la température relevée à l'emplacement du thermocouple d'abscisse 0.19 m. La bijection entre les taux de cisaillements et la viscosité, permet de relier la sensibilité au taux de cisaillement. Des tendances apparaissent : en pratique, les paramètres de viscosité à faibles taux de cisaillement ont peu de sensibilité. La température reste peu sensible, et l'évolution de sa sensibilité est parallèle à l'évolution de la sensibilité du débit. Dès lors, les données sont fortement corrélées, ce qui renforce la difficulté de l'estimation. Cette cartographie de la sensibilité est sans doute liée au régime thermique de la filière. Celui-ci est dit à l'équilibre, en accord avec le nombre de Cameron calculé dans le chapitre 3. La température est maximale au centre du canal, là où les taux de cisaillement sont les plus faibles, comme on peut le constater en figure 4.11.

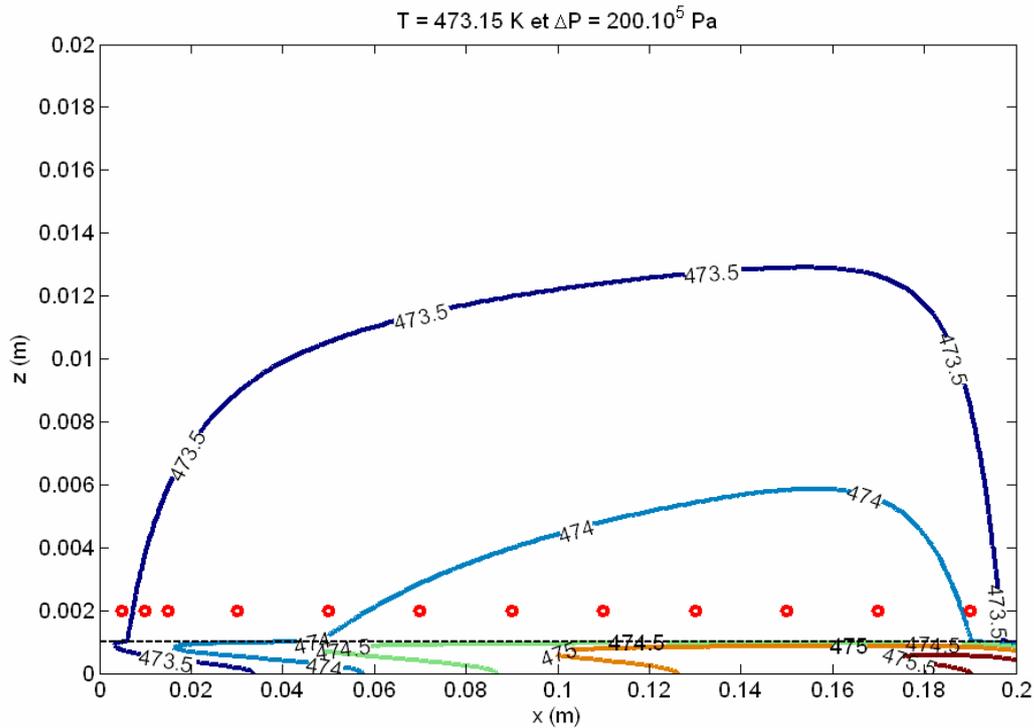


Figure 4.11 : Iso-températures dans la demi-filière pour un différentiel de 200×10^5 Pa et une température de régulation à 473.15 K. La droite en pointillés noirs représente l'interface polymère/acier. Les cercles rouges correspondent à la localisation des thermocouples.

En conclusion, le débit est sensible aux paramètres de viscosité à fort taux de cisaillement, mais les températures aux positions des thermocouples semblent beaucoup moins sensibles. Elles apportent toutefois de l'information. Celle-ci sera notamment utile pour estimer le paramètre d'Arrhénius, même si ce n'est pas effectué au cours de ce travail.

4.4.3 Matrice de Fisher

La sensibilité des observables à un paramètre est une condition nécessaire. Toutefois pour pouvoir estimer plusieurs paramètres, il faut également que les sensibilités des mesures à chaque paramètre soient linéairement indépendantes. En effet, si les sensibilités sont corrélées, alors il devient impossible d'estimer simultanément les différents paramètres recherchés.

Une façon d'étudier cette intercorrélation consiste à calculer le conditionnement de la matrice de covariances des sensibilités. Soit la matrice de sensibilité S telle que

$$S_{i,j} = \frac{\partial U_i}{\partial p_j} \quad (4.50)$$

où U_i est le i -ème observable, et p_j le j -ième paramètre.

La matrice d'information de Fisher est alors donnée par :

$$F = {}^t S \times S \quad (4.51)$$

et le conditionnement est obtenu en faisant le rapport de la plus grande valeur propre λ_1 de F par la plus petite λ_N :

$$\text{cond}(F) = \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_N|} \quad (4.52)$$

où N est le nombre de paramètres qu'on cherche à estimer.

Pour calculer la matrice de Fisher, les sensibilités ont été adimensionnées de façon à s'exprimer en (s.Pa⁻¹) dans l'objectif d'avoir une matrice homogène:

$$S_{i,j} = \frac{1}{U_i} \frac{\partial U_i}{\partial \mu_j} \quad (4.53)$$

où μ_j sont les paramètres de viscosité, et U_i est la température à un thermocouple ou la valeur de débit. Cet adimensionnement améliore le déterminant de la matrice de Fisher et facilite son inversion, pour le calcul d'incertitude. Elle est essentielle en raison des différences d'ordre de grandeur entre les observations de température et de débit.

Le conditionnement dépend du nombre de paramètres mais également de leur « place » dans le tableau, c'est à dire du taux de cisaillement associé. Une étude du conditionnement en fonction des différentes combinaisons possibles de choix de paramètres a été menée. Sur la figure 4.12, le meilleur conditionnement possible (à partir des sensibilités calculées) est représenté en fonction du nombre de paramètres (de 2 à 10).

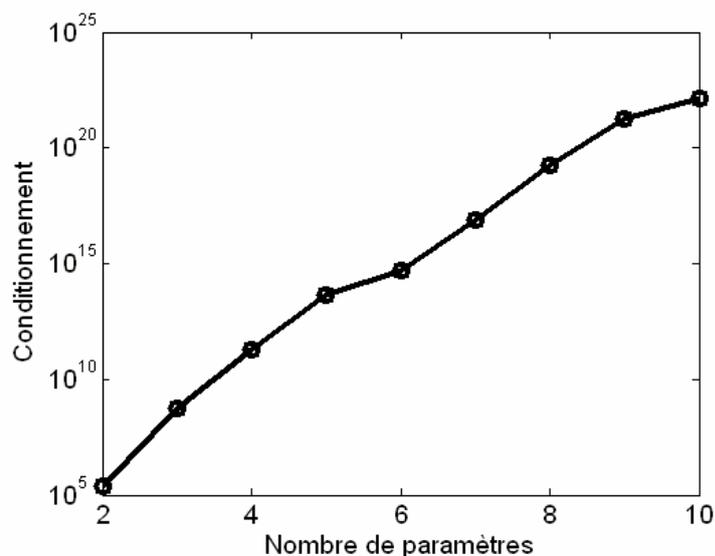


Figure 4.12 : Conditionnement du problème d'estimation de paramètres rhéologiques par inversion de mesures en fonction du nombre de paramètres.

4.4.4 Choix des paramètres et incertitude

Dans le cas d'un problème linéaire, il est possible de calculer l'incertitude sur les paramètres à partir de la matrice de Fisher et de l'écart type du résidu.

$$\text{incertitude du } k\text{-ième paramètre} = t_{1-\frac{\alpha}{2}}(\text{deg}_{\text{liberté}}) \sigma(\text{résidu}) \sqrt{F_{kk}^{-1}} \quad (4.54)$$

où t est la distribution de Student relative au degré de libertés (nombre de mesures moins le nombre de paramètres) et à l'intervalle de confiance défini par α (on prend $\alpha = 0.05$ pour un intervalle de confiance de 95%), σ est l'écart type des résidus normalisés de façon à être cohérent avec les données de la matrice de Fisher et F_{kk}^{-1} est le k -ième terme de la diagonale de l'inverse de la matrice de Fisher.

Une table de la distribution de Student est fournie en annexe.

Le travail de Grimstadt et Mannseth [Grimmstadt et al., 1998] portant sur l'évaluation de ces incertitudes par une technique de Monte Carlo, indiquent que l'approximation d'un modèle linéaire est presque toujours justifiée, y compris pour des modèles fortement non linéaires.

Compte-tenu du conditionnement très mauvais de la matrice, le calcul de l'incertitude est très difficile (la matrice de Fisher n'étant pas inversible). Toutefois en se référant à la figure 4.18, on se rend compte qu'une erreur de 1% sur le débit implique que l'erreur maximum sur le $N^{\text{ième}}$ paramètre rhéologique (celui associé au plus grand taux de cisaillement) est au maximum d'1%. Graphiquement, on se rend alors vite compte que seuls les paramètres de viscosité associés ont une précision acceptable. Encore faut-il parvenir à diminuer l'erreur sur le débit massique au maximum.

4.4.5 Conclusion

La température calculée à la localisation des thermocouples et le débit sont bien sensibles à la rhéologie, mais différemment en fonction du taux de cisaillement. Le problème, fortement non linéaire, reste mal conditionné : il existe une infinité de rhéologie mathématique permettant d'obtenir une valeur de débit pour des conditions opératoires fixées en pression. Les mesures de température complètent cette information et améliorent le conditionnement du problème. Les incertitudes calculées sous l'approximation d'un problème linéaire sont de l'ordre du dixième de Pa.s, ce qui est excellent. En pratique, une telle précision ne peut pas être atteinte en raison des incertitudes de modélisation, de discrétisation et du bruit de mesure. Ajoutons que la régularisation améliore la convergence vers une rhéologie physique, mais qu'elle ajoute également une erreur à la technique inverse.

Une série de tests numériques va nous permettre d'évaluer la qualité et les capacités de la technique d'estimation de la rhéologie.

4.5 Validations numériques

Dans les cas de validation, le système et les conditions opératoires (différentiel de 200×10^5 Pa et température de régulation de 473.15 K) sont toujours les mêmes. Seule change la rhéologie. Les cas tests sont réalisés sur la demi-filière supérieure en raison du principe de symétrie et nous disposons d'une valeur de débit et de 12 valeurs de températures relatives aux thermocouples.

L'équation permettant d'estimer le paramètre d'Arrhénius n'a pas été programmée pour le moment. Néanmoins l'équation adjointe de la température dépend exclusivement de $\frac{\partial \mu}{\partial T}$. Par conséquent, cette équation n'amène aucune information à notre système si la thermodépendance est nulle. C'est pourquoi toutes les rhéologies testées au cours des validations numériques sont thermodépendantes suivant la loi d'Arrhénius. Le coefficient est toujours pris à 1404.15, valeur estimée pour le PEBD avec lequel ont été réalisées les mesures expérimentales.

4.5.1 Rhéologie newtonienne thermodépendante

Le cas le plus simple consiste à prendre une rhéologie ne dépendant que de la température. La thermodépendance du PEBD n'est pas très forte, mais suffit à induire une non-linéarité dans le système. Pour un nombre de paramètres aussi faible, un calcul de sensibilité de type différence finie suffit, mais ce cas test permet d'évaluer la précision de notre technique. La rhéologie à retrouver est donc :

$$\mu = 800e^{\frac{1404.15}{T}}$$

Comme valeur d'initialisation, nous prenons :

$$\mu = 960e^{\frac{1404.15}{T}}$$

soit un écart de 20%.

Le coefficient de pondération (cf équation 4.29) a été pris égal à l'inverse du carré du débit de référence :

$$J(\mu) = J_T(\mu) + \frac{1}{(Q^{ref})^2} J_Q(\mu)$$

De cette façon, le critère sur le débit est un critère relatif. Cette pondération permet d'avoir des critères de température (J_T) et de débit (J_Q) d'ordres de grandeur comparables. On peut alors représenter leur évolution en fonction des itérations de l'algorithme d'inversion (figures 4.13 et 4.14) :

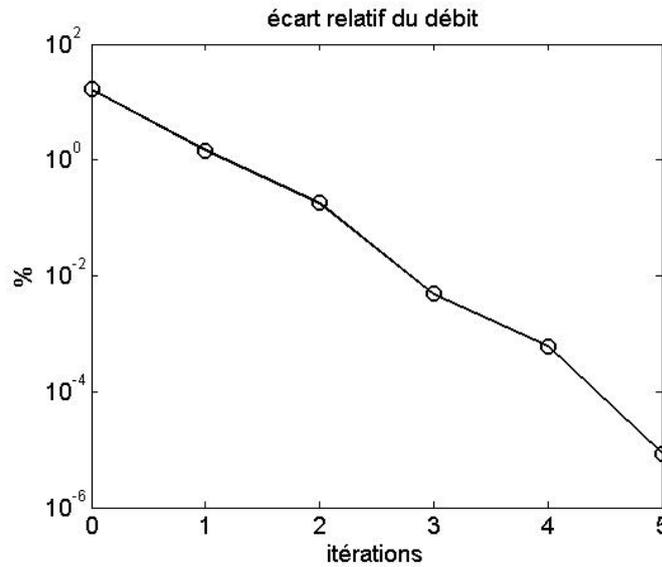


Figure 4.13 : Ecart relatif du débit simulé avec le débit de référence. Il passe en 5 itérations de 16% d'écart à 10^{-5} %

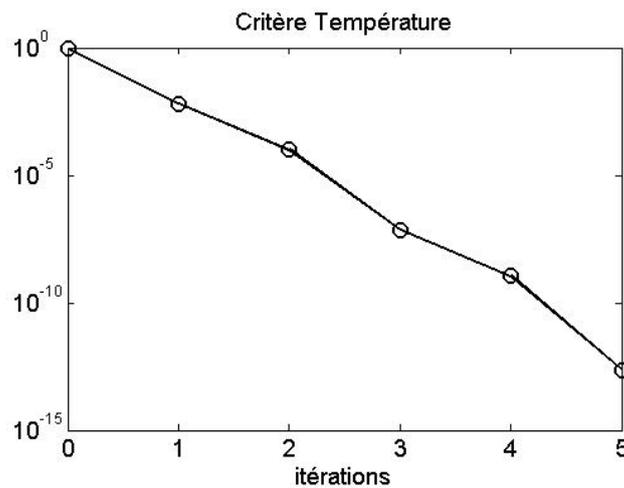


Figure 4.14 : Critère des moindres carrés appliqué à la température au niveau des thermocouples.

La rhéologie inverse ainsi obtenue a un écart de 10^{-5} Pa.s avec la solution de référence, résultat excellent.

4.5.2 Rhéologie loi puissance thermodépendante

On se rappelle que la loi puissance est couplée avec une viscosité seuil pour ne pas diverger lorsque le taux de cisaillement augmente. De fait avec le modèle de rhéologie sous forme de tableau, une loi d'Ostwald-De Waelle ou loi puissance se modélise avec 2 paramètres.

Plutôt que d'exprimer les paramètres μ_i de viscosité de la loi, ce sont les paramètres $\frac{\mu_i}{\mu_0}$ qui sont donnés. μ_0 est pris ici à 800 Pa.s, c'est à dire proche de la valeur de la viscosité du plateau Newtonien (784.2 d'après nos mesures). La thermodépendance est toujours la même. Les

valeurs de viscosité ont été prises en appliquant le modèle rhéologique de Cross déterminé pour le PEBD.

Les paramètres du modèle qu'on cherche à retrouver sont dès lors :

Tableau 4.2: Solution de référence pour le cas test à 2 paramètres

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0
7×10^{-3}	0.810
50	0.130

Le problème est beaucoup plus compliqué à inverser que le précédent et dépend fortement des conditions initiales. La méthode d'initialisation choisie ici consiste à calculer la viscosité newtonienne apparente à partir du débit et du différentiel de pression.

$$\mu = \frac{1}{12} \frac{\Delta P}{Q \cdot L} h^3 W \frac{1}{\exp\left(\frac{A}{T}\right)} \quad (4.54)$$

où μ est la viscosité, ΔP le différentiel de pression, Q le débit volumique, L la longueur de la filière plate, h et W la hauteur et la largeur du canal d'extrusion, A le paramètre d'Arrhénius et T la température de régulation supposée uniforme dans la filière pour l'application de cette formule.

On peut également calculer un taux de cisaillement apparent par la formule suivante :

$$\dot{\gamma}_{app} = \frac{6Q}{W \cdot h^2} \quad (4.55)$$

Cette formule est explicitée dans le paragraphe 2.8. On peut également se référer à [Agassant et al., 1996]. Une simulation directe avec la viscosité newtonienne équivalente donne un ordre de grandeur de la gamme de taux de cisaillement qui existe dans la filière (ici entre $7 \cdot 10^{-3}$ et 50 s⁻¹). En faisant une hypothèse sur la pseudoplasticité du polymère, en supposant que la rhéologie n'est pas trop éloignée d'une loi puissance, on peut en déduire un ordre de grandeur raisonnable pour la valeur de viscosité correspondant au plateau newtonien, c'est à dire le premier paramètre de notre modèle.

Ainsi si le PEBD est estimé faiblement pseudo-plastique, le paramètre de pseudo-plasticité m va être de l'ordre de 0.8-0.9. Ayant évalué une viscosité apparente pour un taux de cisaillement apparent, et ayant déterminé le taux de cisaillement non nul le plus faible apparaissant dans le polymère, le premier paramètre se calcule alors :

$$\mu_1 = \frac{\mu_{newtonienne\ apparente}}{\exp\left[(m-1)\ln\left(\frac{\dot{\gamma}_{apparent}}{\dot{\gamma}_{min}}\right)\right]} \quad (4.56)$$

Il est à noter que la valeur de μ_1 dépend fortement de m et de la gamme de cisaillement choisie. Néanmoins cette technique donne une fourchette des valeurs possibles pour

l'initialisation. Dans un cas expérimental, on prendra μ_0 à la valeur ainsi estimée et on donnera une valeur de 1.0 à μ_1 . Ici μ_0 est fixée pour faciliter la comparaison avec la solution de référence.

Dans le cas proposé, pour un différentiel de pression de 200×10^5 Pa, le débit est de $9.18 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Dès lors, la viscosité newtonienne est de 111.9 Pa.s, soit un paramètre adimensionné de 0.14 et le taux de cisaillement apparent est de 45.9 s^{-1} . L'estimation du paramètre μ_1 (qui correspond au plateau newtonien) par l'hypothèse sur la pseudo-plasticité donne les résultats suivants :

Tableau 4.3: Estimation du plateau newtonien pour différentes hypothèses de plasticité

	Paramètre μ_1 estimé pour différents indices de pseudo-plasticité		
	m		
	0.9	0.85	0.8
μ_1/μ_0	0.34	0.52	0.81

Plus le taux de cisaillement apparent est grand et plus petit est l'indice de pseudo-plasticité supposé (car on est plus loin du comportement newtonien). Comme par ailleurs, 45.9 s^{-1} est très proche de 50, notre initialisation est de

Tableau 4.4: Initialisation de la méthode

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0
7×10^{-3}	0.81
50	0.14

Ce qui est très proche par rapport au modèle cherché. L'estimation devient alors assez facile et donne le résultat suivant :

Tableau 4.5: Résultat de l'estimation à 2 paramètres

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0	précision relative (%)
7×10^{-3}	0.811	0.08
50	0.130	2×10^{-3}

4.5.3 Rhéologie thermodépendante à 3 paramètres

Le modèle de référence est celui-ci :

Tableau 4.6: Solution de référence pour le cas test à 3 paramètres

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0
7×10^{-3}	0.810
0.135	0.628
50	0.130

Dans le cas proposé, pour un différentiel de pression de 200×10^5 Pa, le débit est de $8.88 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Dès lors, la viscosité newtonienne est de 115.7 Pa.s, soit un paramètre adimensionné de 0.15 et le taux de cisaillement apparent est de 44.4 s^{-1} . L'estimation du paramètre μ_1 (qui correspond au plateau newtonien) par l'hypothèse sur la pseudo-plasticité donne les résultats suivants :

Tableau 4.7: Estimation du plateau newtonien pour différentes hypothèses de plasticité

	Paramètre μ_1 estimé pour différents indices de pseudo-plasticité		
	0.9	0.85	0.8
μ_1/μ_0	0.35	0.54	0.83

N'ayant pas d'information sur le paramètre μ_2 , nous l'initialisons à la même valeur que μ_1 en raison de son taux de cisaillement encore faible. Notre initialisation se fait avec le modèle suivant :

Tableau 4.8: Initialisation pour le cas test à 3 paramètres

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0
7×10^{-3}	0.83
0.135	0.83
50	0.83

On obtient alors le résultat suivant :

Tableau 4.9: Résultat de l'estimation à 3 paramètres

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0	précision relative (%)
7×10^{-3}	0.831	2.6
0.135	0.654	4.1
50	0.129	0.3

En dépit de l'écart observé sur les paramètres, l'erreur relative sur le débit n'est que de 0.04% et l'écart moyen sur les températures observées aux coordonnées des thermocouples est de $3 \times 10^{-4} \text{ K}$, ce qui est excellent.

4.5.4 Rhéologie du PEBD à 10 paramètres

Dans le paragraphe 4, il a été montré que le conditionnement du problème est de plus en plus mauvais à mesure qu'on augmente le nombre de paramètres. Les 2 estimations précédentes avec des modèles de 2 et 3 paramètres montrent également que l'augmentation du nombre de paramètres fait perdre en précision.

Nous allons ici utiliser le paramétrage du PEBD donné pour l'étude de sensibilité (paragraphe 4.4.2, tableau 4.1), soit 10 paramètres.

Dans le cas proposé, pour un différentiel de pression de 200×10^5 Pa, le débit est de $8.04 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Dès lors, la viscosité newtonienne est de 127.8 Pa.s, soit un paramètre adimensionné de 0.16 et le taux de cisaillement apparent est de 40.2 s^{-1} . L'estimation du paramètre μ_1 (qui correspond au plateau newtonien) par l'hypothèse sur la pseudo-plasticité donne les résultats suivants :

Tableau 4.10: Estimation du plateau newtonien pour différentes hypothèses de plasticité

	Paramètre μ_1 estimé pour différents indices de pseudo-plasticité		
	m		
	0.9	0.85	0.8
μ_1/μ_0	0.38	0.59	0.90

Avec seulement ces données, il est difficile d'obtenir une bonne initialisation pour un grand nombre de paramètres. Or la rhéologie du PEBD est suffisamment complexe pour exiger plus de 3 paramètres. Expérimentalement des mesures sont effectuées à différentes pressions et températures, fournissant des données supplémentaires, permettant d'améliorer l'initialisation. Pour ce cas numérique, nous allons considérer une expérience supplémentaire. Il s'agit du même écoulement, mais avec un différentiel de pression de seulement 100×10^5 Pa. Le débit observé est alors de $2.61 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. La viscosité newtonienne est alors de 196.9 Pa.s, soit un paramètre adimensionné de 0.25 et le taux de cisaillement apparent est de 13.1 s^{-1} . L'estimation du paramètre μ_1 (qui correspond au plateau newtonien) par l'hypothèse sur la pseudo-plasticité donne les résultats suivants :

Tableau 4.11: Estimation du plateau newtonien pour différentes hypothèses de plasticité pour un différentiel de pression de 100×10^5 Pa

	Paramètre μ_1 estimé pour différents indices de pseudo-plasticité		
	m		
	0.9	0.85	0.8
μ_1/μ_0	0.52	0.76	1.10

Le taux de cisaillement apparent est plus faible pour le différentiel de pression de 100×10^5 Pa que pour celui de 200×10^5 Pa, ce qui signifie que la viscosité newtonienne apparente est plus proche, et donc que notre estimation de ce paramètre peut se faire avec un indice de pseudo-plasticité moindre. La différence n'étant cependant pas très grande sur une échelle logarithmique (échelle d'évolution de la courbe d'écoulement), on peut supposer en première approximation que le paramètre μ_1 adimensionné se situe entre 0.76 et 0.90. Pour notre initialisation, nous avons opté pour la moyenne des deux valeurs : 0.83.

En résumé, nous estimons le plateau newtonien autour de 0.83 et avons une idée des valeurs des paramètres adimensionnés pour les taux de cisaillement de 13 et 40. Nous avons choisi un modèle à 6 paramètres : 2 paramètres situés aux extrémités de la gamme de taux de cisaillement et les 4 paramètres restant pour traduire la courbure de la rhéologie. Les taux de cisaillement du modèle sont indiqués ci-dessous. Les 6 taux de cisaillement sont répartis de façon régulière sur la gamme de taux de cisaillement. A faible taux de cisaillement, la rhéologie est quasi-newtonienne. Aussi le second paramètre est-il initialisé à la valeur du plateau newtonien. Les deux derniers paramètres sont initialisés aux valeurs estimées pour les taux de cisaillement

apparents. Il y a une petite différence entre les taux de cisaillement du modèle et les taux de cisaillement apparents, mais les valeurs sont suffisamment proches pour constituer une bonne approximation. Pour les deux paramètres restants (μ_3 et μ_4), ils sont interpolés linéairement en fonction de μ_2 et μ_5 . La rhéologie ainsi obtenue est représentée graphiquement en figure 4.15.

Tableau 4.12: Initialisation du modèle à 6 paramètres

$\dot{\gamma}$ (s^{-1})	μ_i/μ_0
0.007	0.83
0.04	0.83
0.24	0.56
1.44	0.37
8.48	0.25
50	0.16

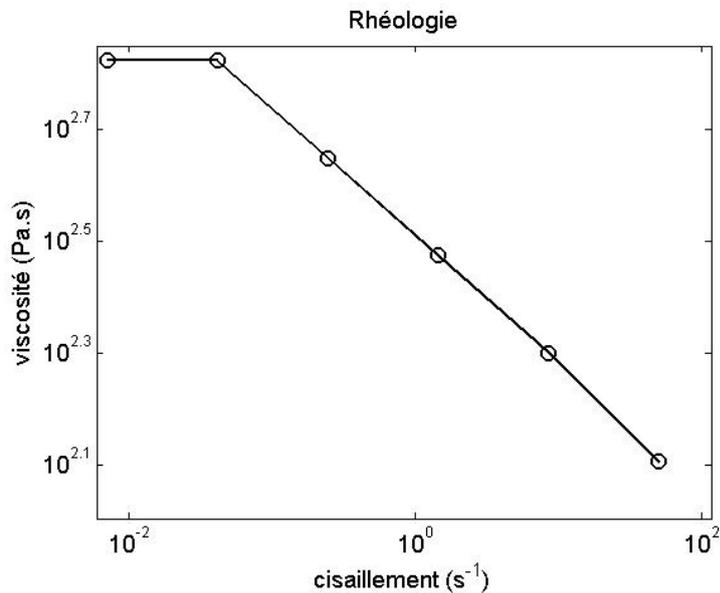


Figure 4.15 : Rhéologie d'initialisation pour le PEBD.

Cette rhéologie d'initialisation n'est pas très éloignée de la rhéologie cherchée, comme on peut le voir sur la figure 4.16.

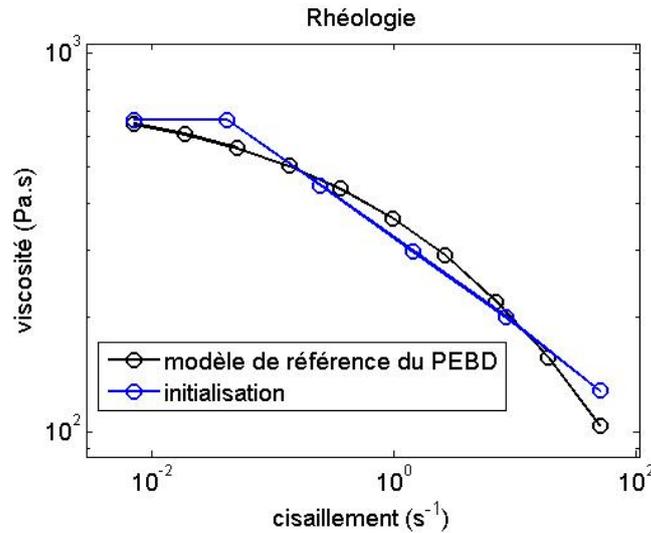


Figure 4.16 : Comparaison entre la rhéologie de référence et la rhéologie d'initialisation.

Malgré leurs ressemblances, l'écart sur le débit entre ces deux rhéologies est de 16% et l'écart-type des températures aux capteurs est de 0.13 K. Après estimation des paramètres du modèle par inversion de mesure, l'écart des températures aux capteurs est de 3.7×10^{-5} K et l'écart relatif de débit est de 2.4×10^{-2} %. Ce résultat est obtenu après seulement 4 itérations, ce qui représente environ 20 minutes de calcul.

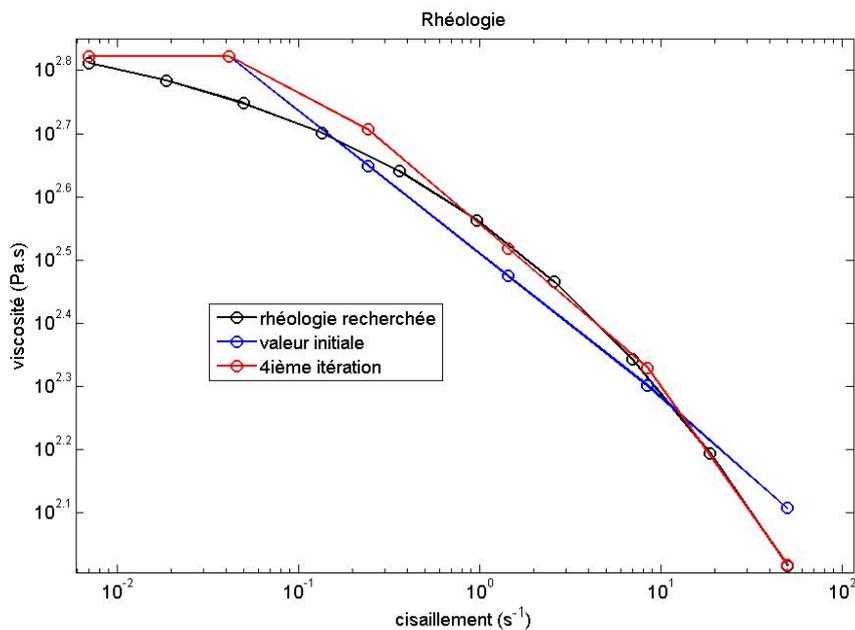


Figure 4.17 : Résultat de l'estimation des paramètres de rhéologie (en rouge). L'initialisation des paramètres est représentée en bleue et la solution cherchée en noir.

Le résultat est illustré en figure 4.17. On constate un très bon accord des courbes pour les forts taux de cisaillement et un moins bon pour les faibles, mais la sensibilité ne permet pas d'estimer correctement ces paramètres. Néanmoins ce résultat montre qu'il est possible, en

travaillant sur son initialisation, d'estimer une rhéologie complexe permettant de traduire avec une très bonne précision l'écoulement (donc le débit) et la thermique (par le biais de la dissipation visqueuse) d'un polymère non newtonien.

4.5.5 Estimation de rhéologie avec du bruit de mesure

Dans la réalité physique, les mesures sont entachées d'une erreur plus ou moins importante. Ces erreurs affectent le conditionnement des problèmes inverses et contribuent à la difficulté de résolution. Pour tester la méthode numérique, nous allons répéter le test précédent (même nombre de paramètres, même initialisation, mêmes conditions opératoires) en ajoutant un bruit aléatoire sur les « mesures », c'est à dire les valeurs de référence de débit et de température aux positions des thermocouples. Une variation aléatoire d'amplitude maximale de 0.2 K est prise pour les températures, et une erreur aléatoire d'amplitude maximale 0.1% est considérée sur le débit. Compte-tenu du calcul approximatif fait pour l'initialisation, l'erreur sur le débit ne modifie pas celle-ci (la différence intervient à la 4^{ième} décimale, alors que nous arrondissons à la seconde).

Tableau 4.13: Effet du bruit sur le débit

débit initial ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)	débit bruité ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)
8.035e-007	8.037e-007

Tableau 4.14: Effet du bruit sur les températures de référence

abscisse des thermocouples (m)	Température initiale (K)	Température bruitée (K)
5×10^{-3}	473.431	473.422
10×10^{-3}	473.556	473.499
15×10^{-3}	473.645	473.750
30×10^{-3}	473.815	473.868
50×10^{-3}	473.948	473.879
70×10^{-3}	474.041	473.797
90×10^{-3}	474.116	474.192
110×10^{-3}	474.177	474.103
130×10^{-3}	474.227	474.221
150×10^{-3}	474.263	474.327
170×10^{-3}	474.250	474.366
190×10^{-3}	473.923	473.966

Le bruit de mesure ajouté bloque la convergence et les paramètres ne s'améliorent plus après la seconde itération (environ 10 minutes de calcul) comme on le voit sur la figure 4.18. On obtient alors un écart type sur les mesures de températures de 9.7×10^{-2} K et un écart relatif de débit de 0.47 %. La qualité de la solution est donc fortement détériorée. Le tableau 4.16 récapitule les valeurs des paramètres estimés avec et sans bruit.

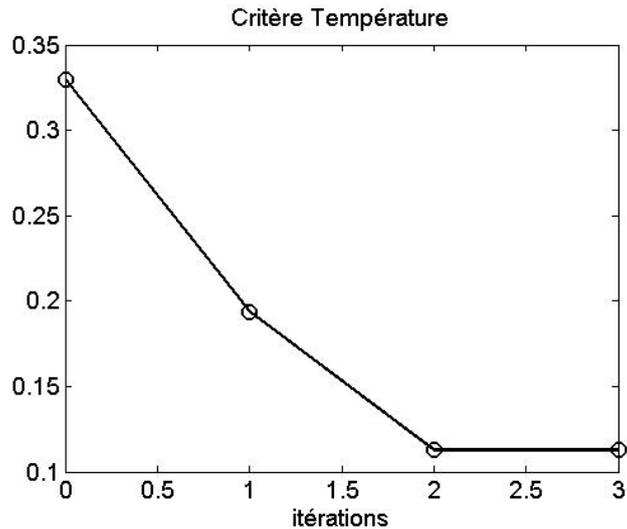


Figure 4.18 : Evolution du critère des moindres carrés sur la température en fonction des itérations. On constate une convergence très rapide.

Tableau 4.15: Comparaison des paramètres estimés avec et sans bruit

paramètre	sans bruit	avec bruit
μ_1	0.8300	0.8300
μ_2	0.8300	0.8300
μ_3	0.6359	0.5563
μ_4	0.4119	0.4117
μ_5	0.2667	0.2670
μ_6	0.1301	0.1295

A part pour μ_3 , on constate que l'erreur sur les paramètres est du quatrième ordre de grandeur, ce qui est finalement rassurant sur la qualité de l'estimation des paramètres à fort taux de cisaillement. Les paramètres μ_1 et μ_2 ne semblent pas affectés, mais comme ils conservent leur valeur initiale, cela montre surtout qu'ils ne sont guère sensibles aux mesures et donc très difficiles à estimer. La figure 4.19 montre que la rhéologie ainsi estimée (en rouge) n'est pas très éloignée de la rhéologie de référence (en noir).

4.5.6 Conclusion

Au travers de différents tests de validation de plus en plus complexes, il a été démontré que moyennant une réflexion sur l'initialisation de la technique inverse à partir des données expérimentales, il est possible d'obtenir un modèle rhéologique de qualité, traduisant le comportement du polymère tant au niveau de l'écoulement que de la dissipation visqueuse. La méthode montre également ses limites pour les faibles taux de cisaillement, mais reste cependant relativement robuste vis à vis du bruit de mesures.

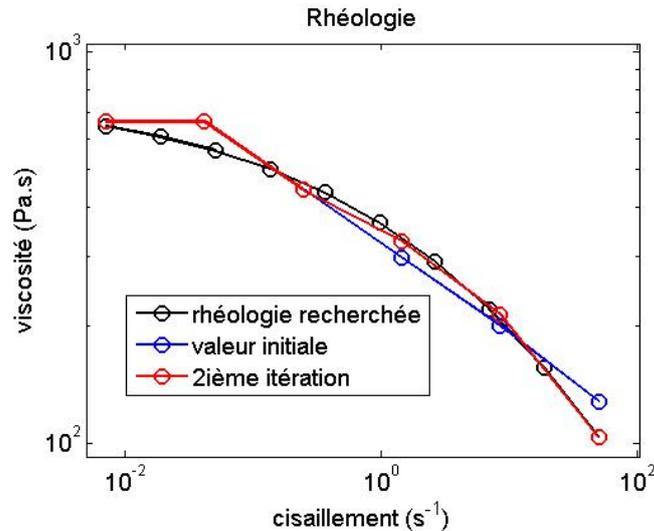


Figure 4.19 : Rhéologie estimée en rouge, la rhéologie d'initialisation en bleu et la rhéologie recherchée en noir.

4.6 Conclusion

Après une étude du panorama des techniques inverses, notamment dans le domaine de la thermique, une technique a été développée pour l'estimation de paramètres rhéologiques par inversion de mesures de débit et de température. Cette technique repose sur la résolution d'équations couplées et la méthode de l'adjoint, qui permet de calculer une direction de descente. La profondeur de descente est calculée par la résolution d'un problème de sensibilité par une méthode différences finies, en raison de la difficulté d'exprimer le problème de sensibilité de façon analytique. Une étude de la sensibilité du problème a été menée pour une rhéologie de type Cross avec une thermodépendance de type Arrhénius. Cette étude a démontré à quel point le problème était mal posé, phénomène illustré par la suite dans la phase de validation. Pour améliorer la résolution du problème inverse, une technique de régularisation est utilisée : elle consiste à s'assurer de la décroissance de la pente de la courbe d'écoulement. Néanmoins le problème reste fortement mal conditionné et nécessite de travailler sur le choix de l'initialisation. Un tel choix peut se faire en se basant sur les données expérimentales et permet d'améliorer considérablement les résultats. L'estimation est particulièrement bonne pour les forts taux de cisaillement, et résiste même à un bruit de mesure non négligeable. Néanmoins les résultats sont moins fiables pour les faibles taux de cisaillement.

On peut retenir pour conclure que pour des cas numériques, même bruités, en choisissant judicieusement son initialisation (avec une démarche qui peut être automatisée), le modèle rhéologique ainsi estimé est très représentatif du comportement rhéologique de référence, tant du point de vue du débit que de la dissipation visqueuse.

5 Résultats et analyses

5.1 Introduction

Au cours des chapitres précédents, des données expérimentales ont été prélevées sur la filière d'extrusion dans des conditions opératoires bien définies (chapitre 2), un modèle a été mis en place pour la simulation numérique des phénomènes physiques intervenant dans la filière (chapitre 3), et une technique d'estimation de mesures a été développée et validée (chapitre 4). Il reste désormais à appliquer cette technique inverse aux données expérimentales.

Dans la première partie de ce chapitre, nous partons des données expérimentales pour choisir judicieusement l'estimation initiale de la rhéologie cherchée. La deuxième partie examine les différences entre les essais numériques de validation de la technique inverse et les essais expérimentaux. Ces différences provenant d'approximations lors de la modélisation peuvent avoir des conséquences fâcheuses sur l'estimation. Leur influence est également étudiée dans cette partie. Dans la troisième partie, une estimation de loi rhéologique est réalisée pour un jeu de données expérimentales. En quatrième partie, une nouvelle estimation de loi rhéologique est proposée mais en utilisant simultanément plusieurs jeux de données. A partir de là, nous tracerons le bilan de la méthode proposée.

5.2 Préliminaires

Il a été montré au chapitre 4 que la résolution du problème inverse considéré nécessite une bonne initialisation, et donc de fait, une bonne analyse des données expérimentales. Dans le chapitre 2, les caractéristiques des essais ont été rappelées (paragraphe 2.7.2). A partir notamment des débits volumiques et des différentiels de pression dans la filière, nous obtenons à différentes températures des taux de cisaillement apparents et des viscosités newtoniennes apparentes associées obtenues par le calcul suivant :

Pour un écoulement de Poiseuille d'un fluide newtonien entre deux plans immobiles, le débit et la pression sont reliés par la relation 5.1:

$$Q = \frac{1}{12 \cdot \mu} \cdot \frac{\Delta P}{L} \cdot h^3 \cdot W \quad (5.1)$$

Où Q est le débit volumique ($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$), μ la viscosité dynamique ($\text{Pa} \cdot \text{s}$), ΔP le différentiel de pression dans la filière (Pa), L la longueur de la filière (m), h la hauteur du canal d'extrusion (m) et W la largeur du canal d'extrusion (m). Cette relation est un cas particulier de l'expression du débit donné en 4.3.3.1.

On en déduit l'expression de la viscosité newtonienne apparente :

$$\mu = \frac{1}{12 \cdot Q} \cdot \frac{\Delta P}{L} \cdot h^3 \cdot W \quad (5.2)$$

Tableau 5.1: Analyse des données expérimentales pour l'initialisation

Température de consigne	Pression matière extrapolée filière	Débit volumique	Taux de cisaillement apparent	Viscosité newtonienne apparente
K	$\times 10^5$ Pa	m^3s^{-1}	s^{-1}	Pa.s
473.15	22.55	3.97E-08	2.0	5680.10
	81.68	2.01E-07	10.1	4063.68
	119.35	3.29E-07	16.5	3627.66
	149.26	4.54E-07	22.7	3287.67
	176.95	5.87E-07	29.4	3014.48
	199.45	7.11E-07	35.6	2805.20
493.15	47.35	1.36E-07	6.8	3481.62
	71.09	2.23E-07	11.2	3187.89
	102.62	3.43E-07	17.2	2991.84
	126.54	4.67E-07	23.4	2709.64
	149.57	5.97E-07	29.9	2505.36
	170.35	7.20E-07	36.0	2365.97
	187.14	8.49E-07	42.5	2204.24
	203.91	9.79E-07	49.0	2082.84
513.15	23.65	8.31E-08	4.2	2845.97
	60.46	2.22E-07	11.1	2723.42
	84.45	3.49E-07	17.5	2419.77
	105.33	4.71E-07	23.6	2236.31
	124.96	6.01E-07	30.1	2079.20
	141.13	7.25E-07	36.3	1946.62
	158.13	8.54E-07	42.7	1851.64
	173.59	9.84E-07	49.2	1764.13
	186.97	1.11E-06	55.5	1684.41
	200.08	1.24E-06	62.0	1613.55
	209.67	1.37E-06	68.5	1530.44
533.15	37.10	1.55E-07	7.8	2393.55
	72.43	3.59E-07	18.0	2017.55
	121.90	7.26E-07	36.3	1679.06
	170.45	1.25E-06	62.5	1363.60
	190.49	1.51E-06	75.5	1261.52

Ces valeurs apparentes sont représentées pour les différentes températures en figure 5.1 :

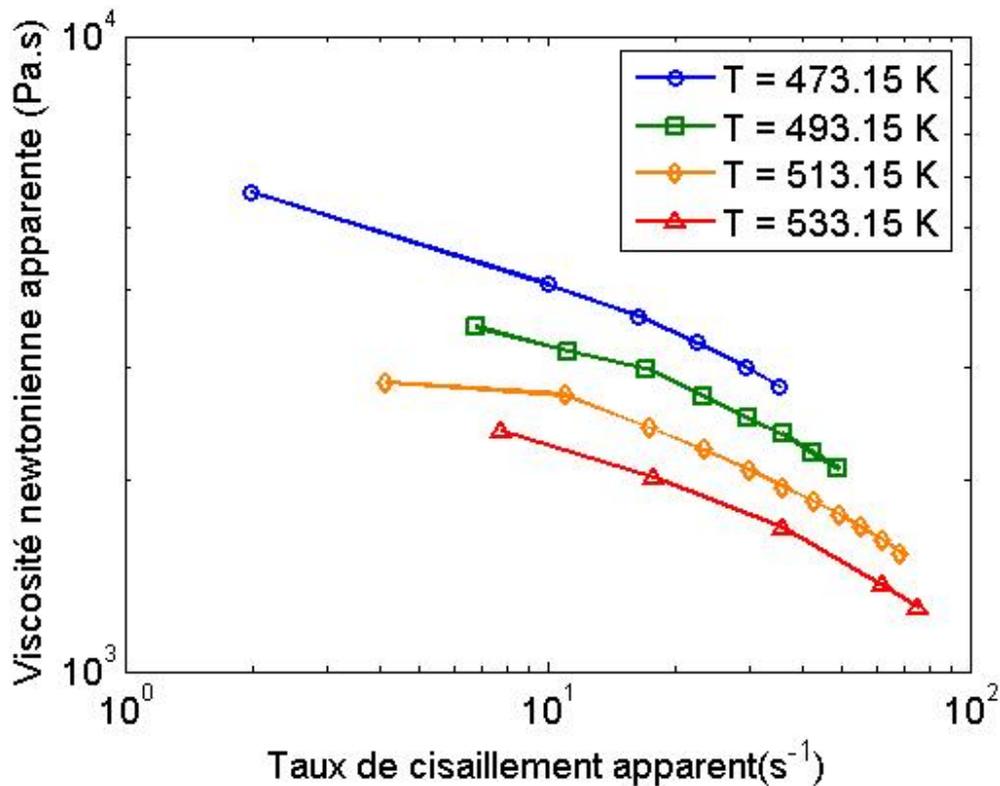


Figure 5.1: Courbes d'écoulement apparentes pour les différentes données expérimentales.

Ces courbes expérimentales mettent en évidence l'influence de la thermodépendance. Dans le cas où l'on souhaiterait estimer le paramètre d'Arrhénius, ces valeurs suffisent à initialiser la recherche.

Dans le cas traité, le paramètre d'Arrhénius est pris à 1404.15, valeur déterminée lors de l'estimation des paramètres du modèle de Cross à partir des mesures rhéologiques traditionnelles.

Il faut également déterminer une valeur de viscosité de plateau newtonien pour le modèle. Cette fois-ci, n'ayant aucune valeur a priori, μ_0 est pris à la valeur du plateau newtonien et μ_1/μ_0 est égal à 1. Pour se rapprocher le plus possible du plateau newtonien, l'évaluation est réalisée à partir du plus faible taux de cisaillement pour la plus faible température (première ligne du tableau 6.1). Les valeurs obtenues sont divisées par le terme de thermodépendance ($\exp(A/T)$).

Il faut donc lire le tableau des paramètres de viscosité du modèle comme indiqué :

μ_i

$$\times \mu_0 \cdot e^{-\frac{1404.15}{T}}$$

Le tableau 5.2 indique les évaluations de μ_0 (valeur du plateau newtonien) pour différents indices de pseudoplasticité en utilisant l'équation donnée en 4.5.2. Ces données sont calculées

pour une température de régulation de 473.15 K. En théorie le μ_0 ne devrait pas dépendre de la température, si la dépendance du comportement rhéologique suivait bien une loi d'Arrhénius (paragraphe 1.2.2.3.2.2).

Tableau 5.2: Estimation du plateau newtonien pour différentes hypothèse de pseudoplasticité

	Paramètre μ_0 estimé pour différents indices de pseudo-plasticité		
	0.9	0.85	0.8
μ_0	513	681	903

Le taux de cisaillement apparent est de 2 s^{-1} seulement. Une pseudoplasticité de 0.8 est peut-être excessive. Pour pondérer ce choix, nous prenons le plateau newtonien à la moyenne des deux dernières estimations. Soit

$$\mu_0 = \frac{681 + 903}{2} = 792 \text{ Pa.s}$$

A présent, nous avons réglé le problème d'initialisation de notre algorithme. En prenant le même nombre de paramètres que lors de la validation numérique, nos valeurs d'initialisation sont :

Tableau 5.3: Initialisation de l'estimation

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0
0.007	1.0
0.04	1.0
0.24	0.61
1.44	0.37
8.48	0.26
50	0.15

Les deux premiers paramètres sont supposés proches du plateau newtonien. Les trois derniers sont proches de points expérimentaux apparents : le paramètre μ_4 est calculé pour $T = 473.15 \text{ K}$ et le taux de cisaillement apparent de 2 s^{-1} , le paramètre μ_5 est calculé pour $T = 473.15 \text{ K}$ et le taux de cisaillement apparent de 10 s^{-1} , le paramètre μ_6 est calculé pour $T = 493.15 \text{ K}$ et le taux de cisaillement apparent de 49 s^{-1} . Le troisième paramètre est obtenu par interpolation linéaire entre le second et le quatrième.

5.3 Différences entre l'expérimental et la simulation numérique, et leurs conséquences sur l'estimation de rhéologie par inversion de mesures

Plusieurs cas de validations ont été traités dans le chapitre 4 et ont montré l'efficacité de la technique inverse. Toutefois lors d'une simulation numérique, tous les paramètres sont maîtrisés et connus avec précision. Dans la réalité expérimentale il y a un écart avec l'idéalité

théorique, ce qui se traduit par des erreurs de modèle et de mesures, qui rendent les estimations par inversion de mesures plus délicates.

5.3.1 Thermocouples imparfaits

Concernant l'instrumentation, les thermocouples expérimentaux ne sont pas parfaits : ils ont une certaine épaisseur. Leurs mesures sont bruitées et les localisations ne sont pas connues parfaitement. Néanmoins ces différences restent raisonnables.

Le problème d'un thermocouple réel, c'est qu'il peut être détérioré. Ainsi concernant les 10 thermocouples permettant l'évaluation de la condition limite inférieure, seuls 3 d'entre eux donnent des informations apparemment fiables. Plutôt que de tenter de reconstruire une condition limite à partir de l'allure de la condition limite supérieure et des 3 points de mesures, nous avons opté pour l'hypothèse de symétrie parfaite et réalisé notre simulation sur la demi-filière supérieure, pour laquelle nous avons l'intégralité des mesures.

5.3.2 Pertes thermiques

Dans le chapitre 6 de sa thèse de doctorat, Karkri [Karkri, 2004] indique un problème de pertes thermiques latérales, notamment du côté de la connectique de la filière. Ayant utilisé le même matériel, nous sommes confrontés au même problème.

5.3.2.1 Observation expérimentale

Sur la figure 5.2 se trouvent deux photos du profil de la filière, du côté des connectiques. La photo du bas permet de lire plus facilement la photo infra-rouge (IR) du haut. On y voit plus distinctement l'isolation (laine de verre en tête de filière, mousse expansée ou « foam glass » en blanc le long de la filière) et la connectique. La photo IR permet de visualiser les points chauds (en jaune) et les zones à la température extérieure (de l'ordre de 293 K, en bleu). L'apparition de points chauds (de l'ordre de 473 K) illustre les problèmes d'isolation et permet donc de localiser sommairement les pertes thermiques.

La figure 5.3 est une photo IR du dessus de la filière. La présence de la chaufferette supérieure fausse le contraste thermique. Néanmoins en haut de la photo, on voit apparaître deux formes rectangulaires de couleur verte (entre FLIR et +122°C) qui correspondent aux surfaces des connecteurs. La couche bleue qui sépare ses deux « rectangles » de la zone chaude correspondant à la filière, est constituée de la couche isolante.

5.3.2.2 Modélisation des fuites

La forme de la « zone chaude » est assez complexe si on se réfère à la figure 5.2. Néanmoins on voit apparaître des zones thermiques : une zone couverte par l'isolant, 1 zone de connectique en deux parties (une frontière visualisée par une raie jaune verticale) et une zone à nu en fin de filière. Le plan horizontal médian est considéré comme plan de symétrie en accord avec le paragraphe 5.3.1.

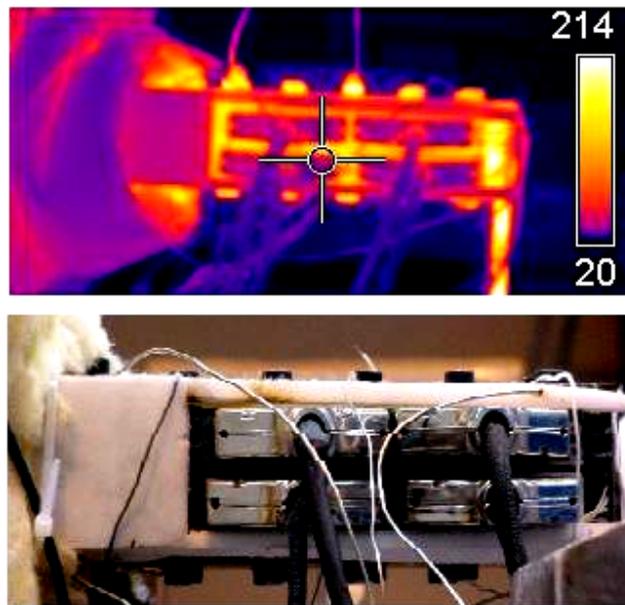


Figure 5.2: Au-dessus, photo IR de la filière en cours d'extrusion, du côté de la connectique. En dessous, photo classique du même profil de la filière à froid.

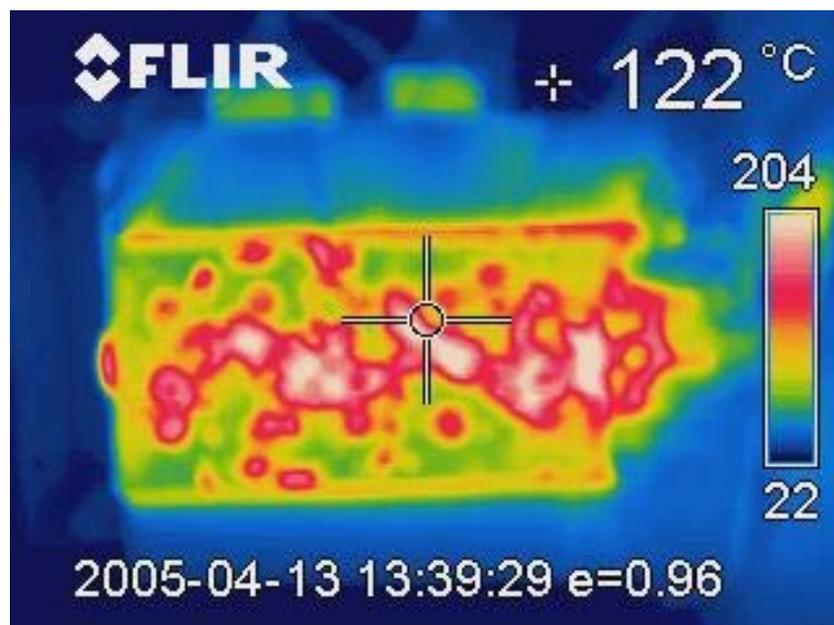


Figure 5.3 : Photo IR de la filière vue de haut. En haut de la photo, on aperçoit les connecteurs.

Le calcul des coefficients d'échange thermique est expliqué en annexe. Le bilan thermique obtenu sur la filière avec le modèle choisi (qui repose sur un modèle d'ailettes multicouches) est très bon (moins d'1% d'écart sur la puissance dissipée).

Du point de vue résolution de l'équation de l'énergie, les pertes thermiques sont traitées comme des termes sources, proportionnels à la différence de température entre le polymère et

l'extérieur. Les coefficients d'échange thermique (qui traduisent la proportionnalité) sont donnés dans le tableau 5.4.

Tableau 5.4: Coefficients d'échange thermique volumiques pour traduire les pertes thermiques dans le modèle 2D adopté.

abscisse correspondante (m)	0 à 16×10^{-3}	16×10^{-3} à 98.5×10^{-3}	98.5×10^{-3} à 181×10^{-3}	181×10^{-3} à 200×10^{-3}
coefficient d'échange thermique ($\text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$)	606	800	854	983

5.3.2.3 Non prise en compte des pertes thermiques et effet sur l'estimation par inversion de mesures

La modélisation proposée des pertes thermiques est simpliste vis à vis de la configuration réelle. Il est donc vraisemblable que le modèle proposé ne corrige pas complètement ce défaut expérimental. Dès lors, il apparaît nécessaire d'évaluer l'impact de ces pertes thermiques sur l'utilisation de la technique inverse développée en chapitre 4. Pour cela, un cas numérique est construit. Les données de référence sont générées en incorporant les pertes thermiques modélisées. En revanche, ces pertes sont omises lors du modèle utilisé pour la technique inverse.

La figure 5.4 rappelle la configuration adoptée et les notations des conditions limites du problème à résoudre.

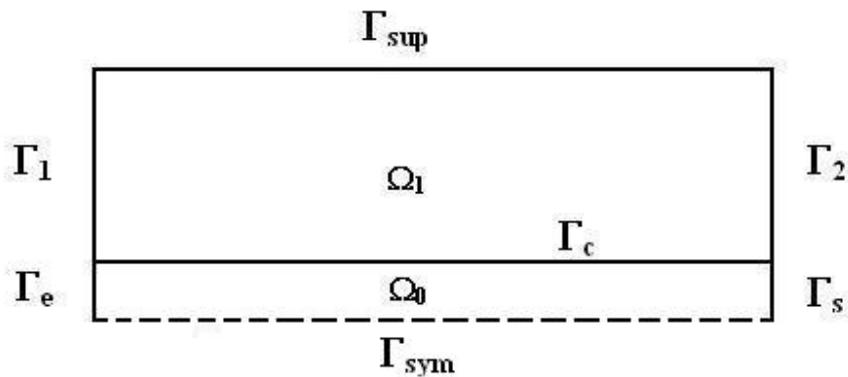


Figure 5.4 : Nomenclature des conditions limites du système.

Le détail des conditions limites est donné aux équations 5.3 et 5.4. Le différentiel de pression entre l'entrée et la sortie est de 200×10^5 Pa et la température de régulation est fixée à 473.15 K. La condition de symétrie permet de diminuer le nombre de nœuds et d'améliorer la vitesse de résolution.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_e : p = 200 \times 10^5 \text{ Pa} \\ \Gamma_s : \begin{cases} p = 0 \\ \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = \vec{0} \end{cases} \\ \Gamma_c : \vec{V} = \vec{0} \\ \Gamma_{sym} : \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = \vec{0} \end{array} \right. \quad (5.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_e : T(z) = 473.15 \text{ K} \\ \Gamma_s : \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \\ \Gamma_1 : \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \\ \Gamma_2 : T(z) = 473.15 \text{ K} \\ \Gamma_{sup} : T(x) = 473.15 \text{ K} \\ \Gamma_{sym} : \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \end{array} \right. \quad (5.4)$$

Les données de référence sont calculées en effectuant un problème direct avec les pertes thermiques. Le polymère considéré est le PEBD caractérisé au chapitre 2. Pour la rhéologie, le modèle à 10 paramètres défini dans le paragraphe 4.4.1 a été pris. Pour une viscosité de référence $\mu_0 = 800 \text{ Pa.s}$ et un paramètre d'Arrhénius de 1404.15 K , le modèle de référence s'écrit :

Tableau 5.5 : modèle de référence du PEBD à 10 paramètres

$\dot{\gamma} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	μ_i/μ_0
0.007	0.810
0.019	0.760
0.050	0.700
0.135	0.628
0.361	0.546
0.969	0.457
2.60	0.365
6.95	0.276
18.65	0.196
50	0.130

Un modèle à 6 paramètres est estimé par la technique d'inversion de mesures. Il est initialisé de la même façon qu'au paragraphe 4.5.4.

Tableau 5.6: Initialisation du modèle à 6 paramètres

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0
0.007	0.83
0.04	0.83
0.24	0.56
1.44	0.37
8.48	0.25
50	0.16

L'évolution du critère est donnée par la figure 5.5. On constate une baisse sur la première itération mais une stagnation très rapide du critère. Numériquement le critère est assez élevé, attendu que les coefficients de pondération sont tous deux égaux à 1, puisqu'on traite un cas numérique.

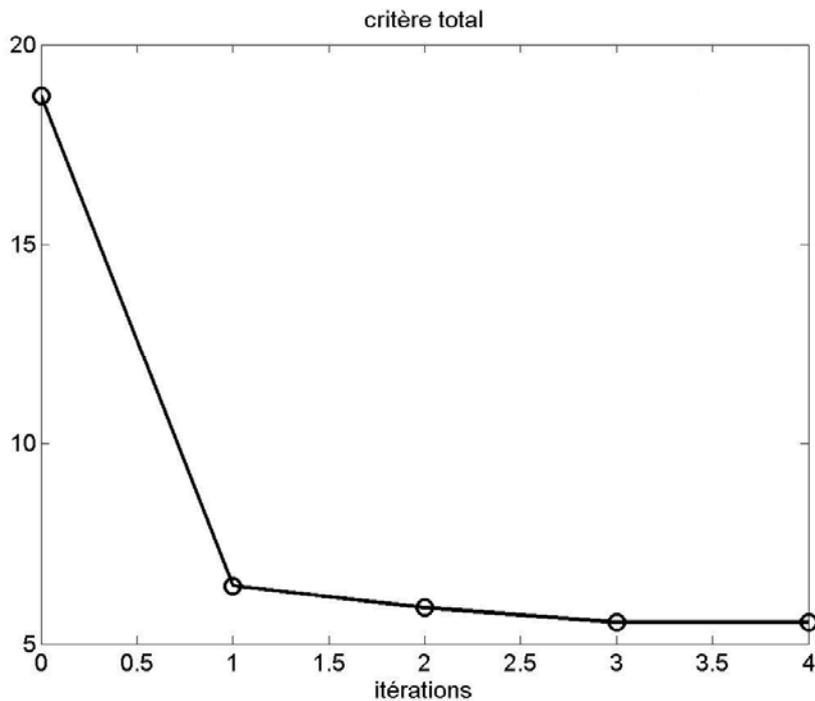


Figure 5.5 : Evolution du critère des moindres carrés sur le débit et les mesures de températures lorsqu'on néglige les pertes thermiques latérales.

Sur la figure 5.6, on remarque que le critère sur les températures mesurées aux thermocouples suit une évolution proche du critère global. La figure 5.7 montre que pour abaisser ainsi le critère de température, l'algorithme dégrade le critère sur le débit. On constate sur la figure 5.8 que la rhéologie estimée tend vers une rhéologie newtonienne, dont la valeur de viscosité permet de minimiser le critère de température plutôt que le critère de débit.

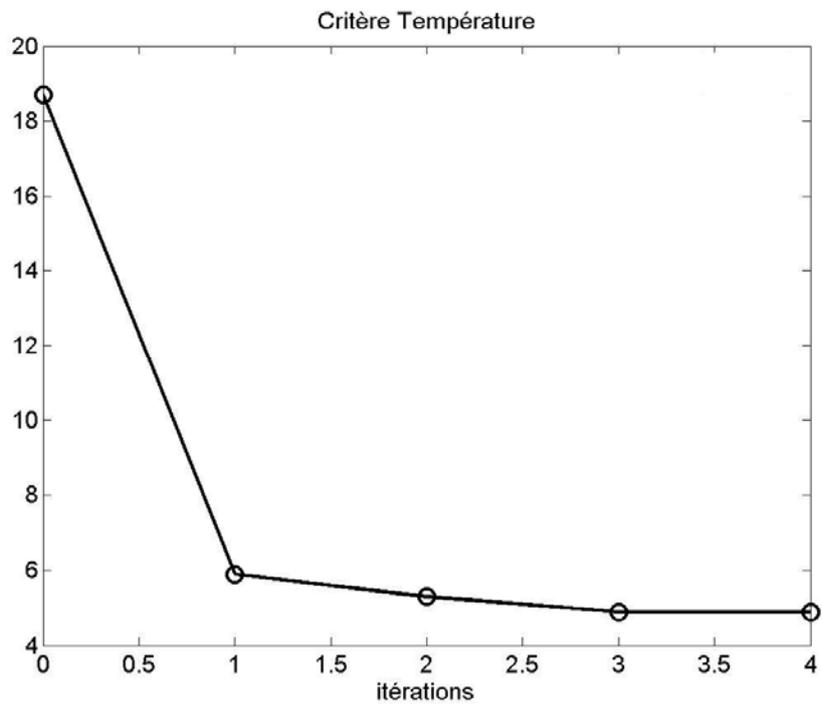


Figure 5.6 : Critère des moindres carrés sur la température en fonction des itérations lorsqu'on ne néglige les pertes thermiques latérales.

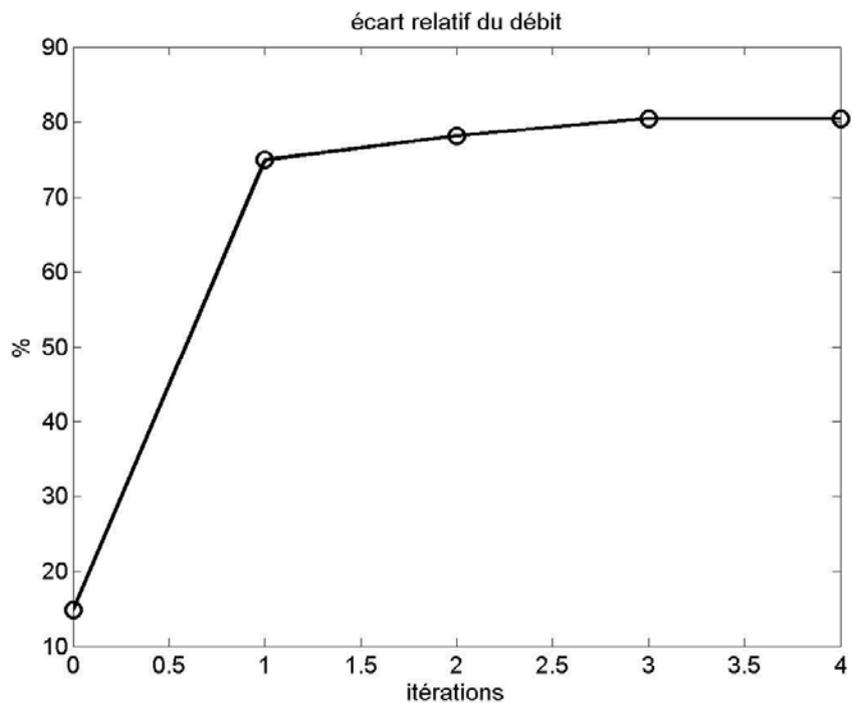


Figure 5.7 : Ecart relatif du débit en fonction des itérations lorsqu'on ne néglige les pertes thermiques latérales.

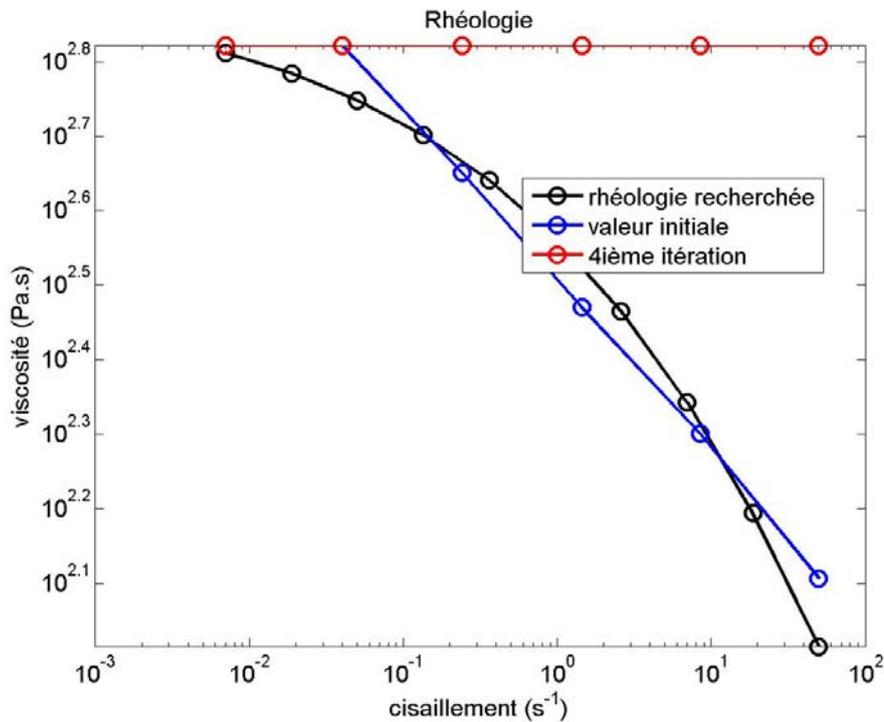


Figure 5.8 : Résultat de l'estimation des paramètres rhéologiques (en rouge) lorsqu'on ne néglige les pertes thermiques latérales. On constate un comportement newtonien très différent de la courbe noire correspondant au modèle recherché, malgré une initialisation (en bleu) assez proche du résultat final.

Il a été montré au paragraphe 4.5.4 que l'estimation rhéologique fonctionnait bien. On constate ici que négliger les pertes thermiques s'avère critique pour la méthode.

5.3.2.4 Effet de la pondération

Les pertes thermiques destabilisent le critère sur la température. Pour le corriger, l'algorithme dégrade le critère sur le débit. Dès lors, on peut imaginer qu'une pondération des critères peut corriger ce problème. Une nouvelle tentative d'estimation est donc faite, avec pour seule différence les coefficients de pondération : $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

Sur la figure 5.9 est représentée l'évolution du critère global au cours des itérations. Par rapport à la figure 5.5, le critère continue à diminuer de façon sensible jusqu'à la 2^{ième} itération. Les valeurs numériques ne peuvent pas être comparées en raison de la pondération différente. En revanche, l'examen des critères de température et de débit (respectivement figures 5.10 et 5.11) montre que la tendance a été inversée : l'algorithme minimise le critère du débit aux dépens du critère de température. Et ce n'est qu'après avoir minimisé « suffisamment » le critère de débit qu'il corrige le critère de température, ce qui lui permet d'obtenir une loi rhéologique beaucoup plus proche de celle recherchée, comme on peut le voir sur la figure 5.12.

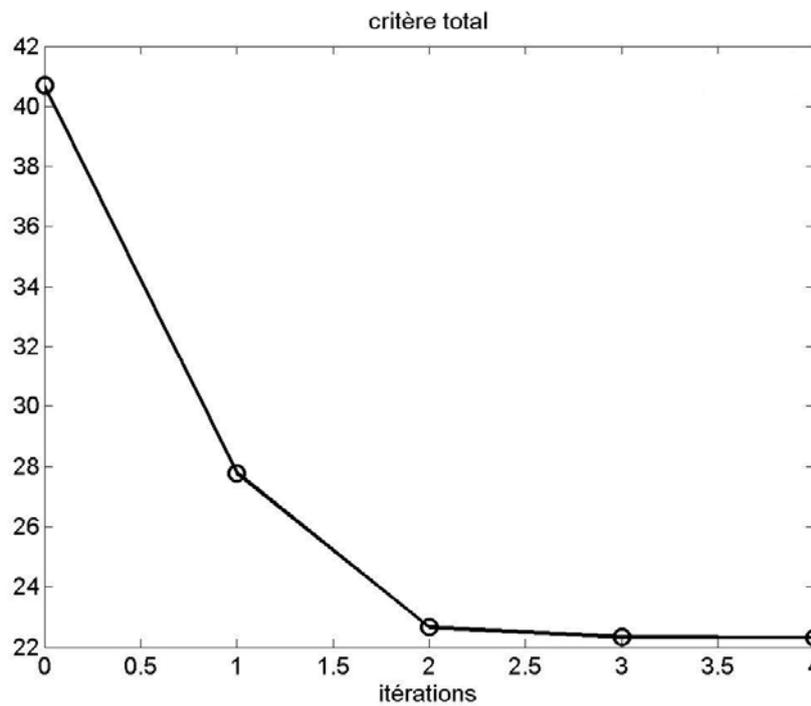


Figure 5.9 : Evolution du critère global au cours des itérations lorsque les pertes thermiques latérales sont négligées mais que la pondération $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

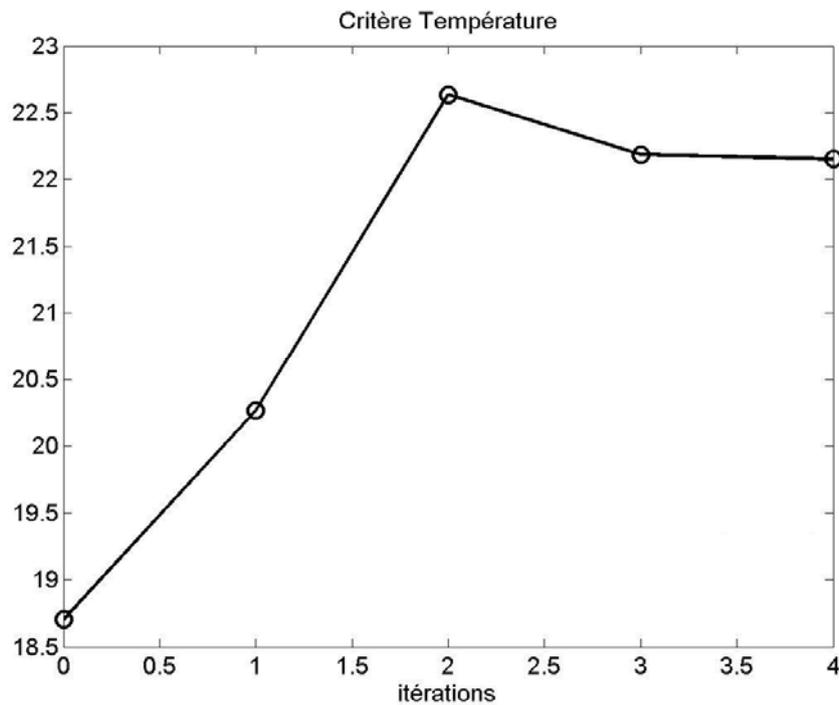


Figure 5.10 : Evolution du critère de température au cours des itérations lorsque les pertes thermiques latérales sont négligées mais que la pondération $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

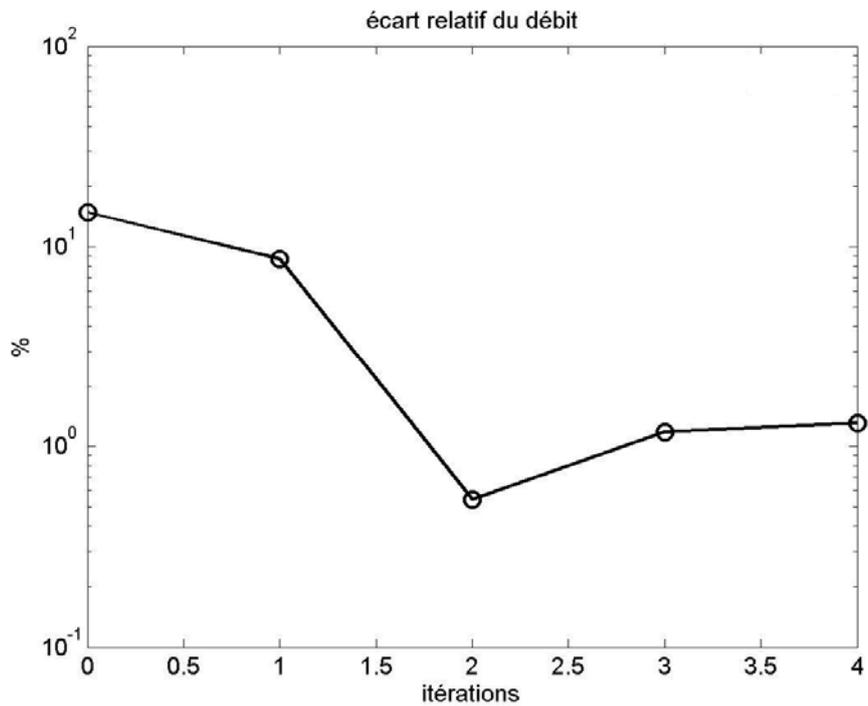


Figure 5.11 : Evolution de l'écart relatif du débit au cours des itérations lorsque les pertes thermiques latérales sont négligées mais que la pondération $\alpha_T = 1$ et $\alpha_O = 1000$.

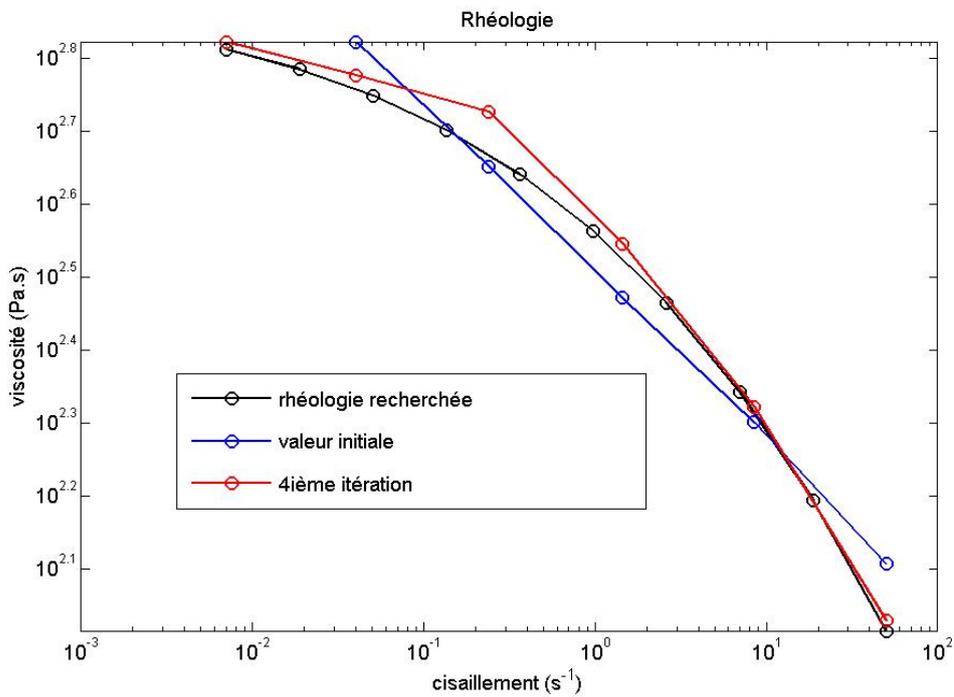


Figure 5.12 : Rhéologie estimée (en rouge) à la 4^{ème} itération lorsque les pertes thermiques latérales sont négligées mais que la pondération $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$. La courbe noire correspond à la solution de référence et la courbe bleue à l'estimation initiale.

Le tableau 5.7 permet de visualiser la différence observée dans les estimations des paramètres de viscosité. A titre d'information, les critères des moindres carrés obtenus à la 3^{ème} itération pour l'estimation avec les fuites sont de 2.52×10^{-5} pour la température et 4.87×10^{-7} pour le débit.

Tableau 5.7 : Paramètres de viscosité estimés en fonction de la prise en compte des pertes thermiques et de la pondération

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0 estimés		
	Sans perte thermique $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1$	Sans perte thermique $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$	Avec fuites thermiques de référence
0.007	0.830	0.830	0.830
0.04	0.830	0.747	0.743
0.24	0.830	0.666	0.658
1.44	0.830	0.439	0.433
8.48	0.830	0.263	0.260
50	0.830	0.134	0.131

5.3.2.5 Conclusion

Les pertes thermiques affectent de façon importante le critère de température. Négligées, elles dégradent considérablement l'efficacité de l'algorithme. Néanmoins à l'aide d'une pondération forte sur le critère de débit, l'effet des pertes thermiques sur l'estimation peut être amorti. En conséquence, même si les pertes thermiques de la filière ne sont pas évaluées avec une grande précision, l'estimation par inversion de mesures reste possible en choisissant une pondération adaptée. Cependant plus les pertes thermiques sont évaluées précisément, plus on peut minimiser les critères et meilleure est la rhéologie estimée.

5.3.3 Profil thermique en entrée de filière

5.3.3.1 Problème posé par l'hypothèse d'un profil thermique homogène en entrée de filière

Les travaux de Karkri [Karkri, 2004] ont montré que le profil de température en entrée de filière n'est pas homogène. La figure 5.13 montre les types de profil qu'on peut obtenir dans la filière aux conditions de travail [Pujos et al., 2006]. Toutefois l'algorithme d'estimation du profil thermique en entrée a été mis en place pour une rhéologie connue. Dans les cas expérimentaux étudiés ici la rhéologie est justement supposée inconnue. Dès lors, nous faisons une hypothèse simplificatrice, qui consiste à prendre un profil de température homogène.

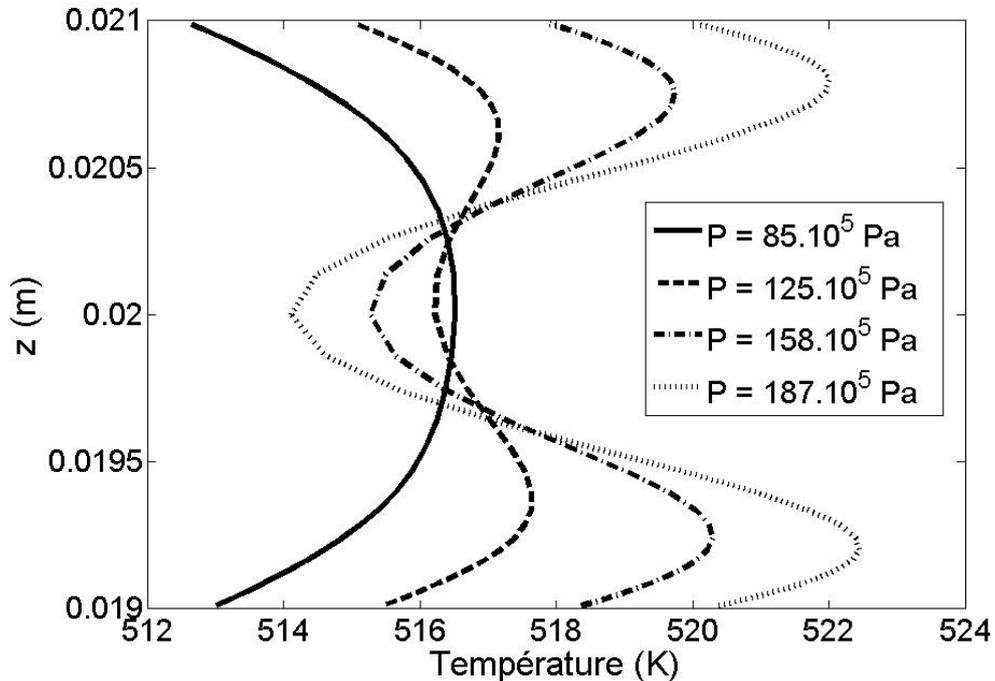


Figure 5.13 : Exemple de profils thermiques en entrée de filière pour différentes pressions à une température de régulation de 513 K.

Lors des essais expérimentaux, une augmentation de la « température matière » (prélevée via un thermocouple au niveau de l'extrudeuse) est constatée lorsqu'on augmente la vitesse de rotation de la vis (cf tableau 2.6). Des estimations de profils d'entrée [Pujos et al., 2006 b] montrent que la température ainsi mesurée est proche de la température estimée au niveau de la paroi métallique. Cette température étant en augmentation, elle dépasse la température de régulation. Pour tenir compte de cette différence, la température homogène considérée pour la simulation numérique est prise égale à la « température matière ». Néanmoins puisqu'il est possible d'estimer le profil d'entrée par inversion des températures mesurées aux thermocouples, alors le fait de prendre un profil d'entrée homogène va générer une erreur de modélisation qui peut gêner l'estimation de rhéologie.

5.3.3.2 Effet de la non-prise en compte du bon profil thermique sur l'inversion rhéologique

Pour déterminer l'influence de l'hypothèse simplificatrice d'un profil thermique homogène en entrée de filière, une nouvelle solution de référence est générée à l'instar du paragraphe 5.3.2.3. Cette fois-ci, les pertes thermiques ne sont pas prises en compte. Un profil thermique non homogène est imposé en entrée de filière pour la solution de référence (donné en figure 5.14). Le profil a été déterminé pour la rhéologie donnée par l'équation 2.15.

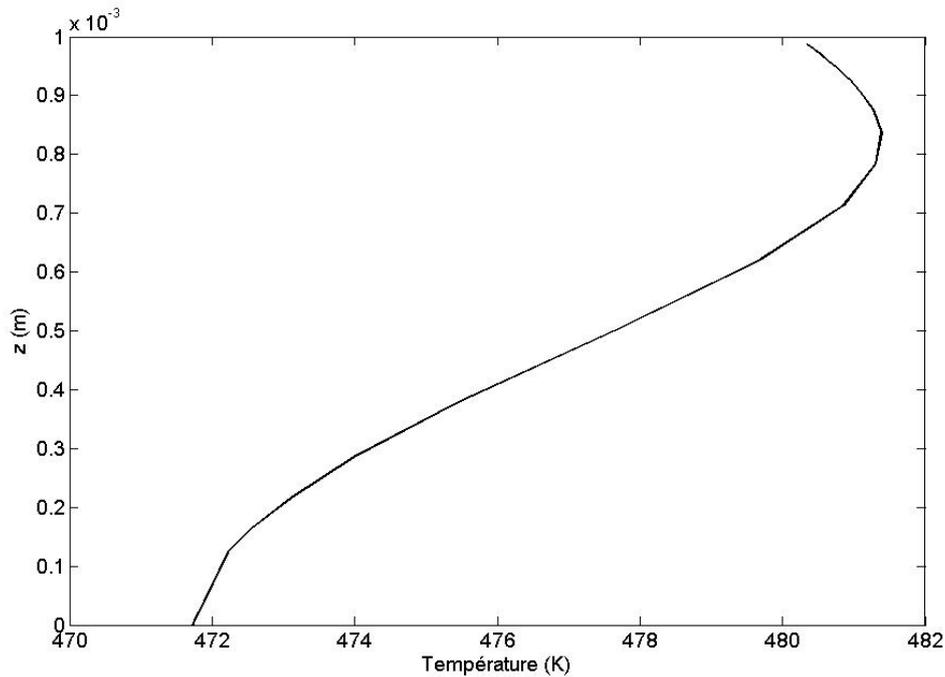


Figure 5.14 : Profil d'entrée sur la demi-filière supérieure à 200×10^5 Pa à 473.15 K, estimé pour la rhéologie donnée par l'équation 2.15.

Les conditions limites en Γ_{sup} et en Γ_2 sont celles obtenues à partir des interpolations des mesures expérimentales. Le cas test correspond à un différentiel de pression de 200×10^5 Pa à 473.15 K. La configuration est la même qu'en 5.3.2.3.

Le profil thermique homogène est pris à 479.5 K, qui correspond à la valeur de la température matière observée expérimentalement. Aucune pondération n'est affectée pour ce cas.

L'évolution du critère est donnée en figure 5.15. Dès la première itération, le critère n'évolue pratiquement plus. On constate avec les figures 5.16 et 5.17 que le critère de température est minimisé aux dépens du critère de débit. La figure 5.18 montre que les paramètres de viscosité pour les forts taux de cisaillements sont surestimés, mais l'allure générale de la courbe est bonne.

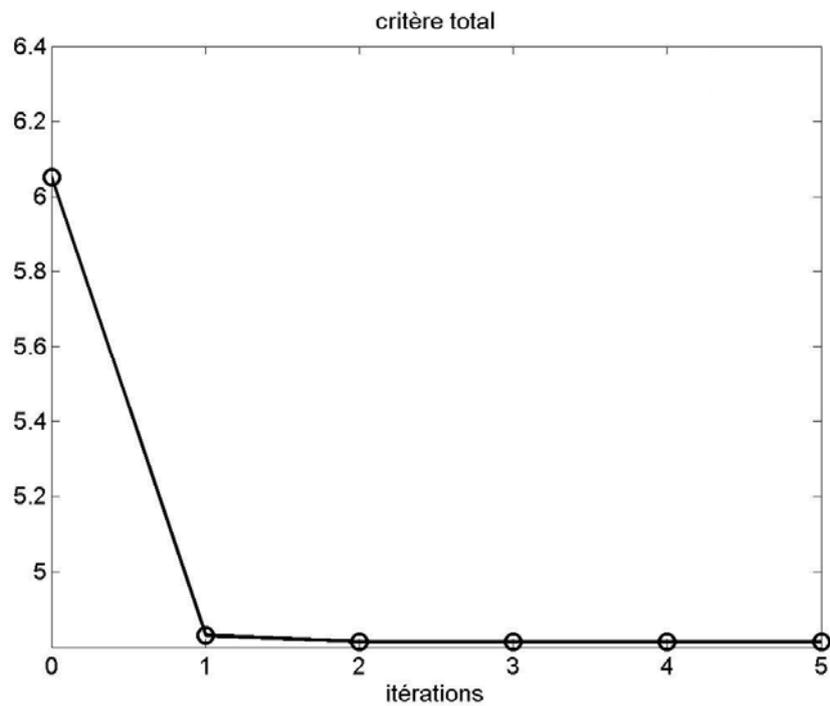


Figure 5.15 : Evolution du critère global en fonction des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière.

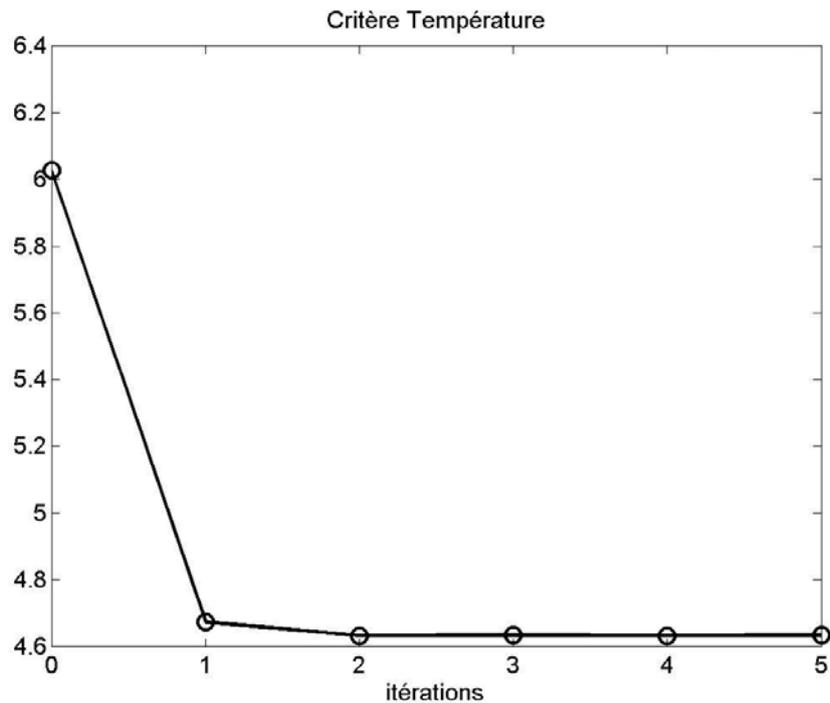


Figure 5.16 : Evolution du critère de température au cours des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière.

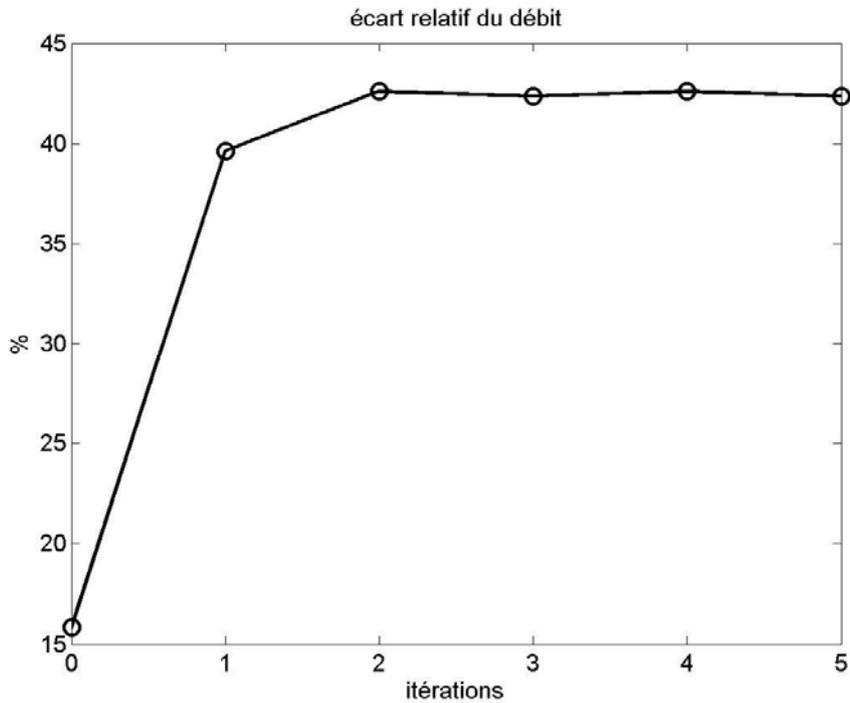


Figure 5.17 : Evolution de l'écart relatif du débit au cours des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière.

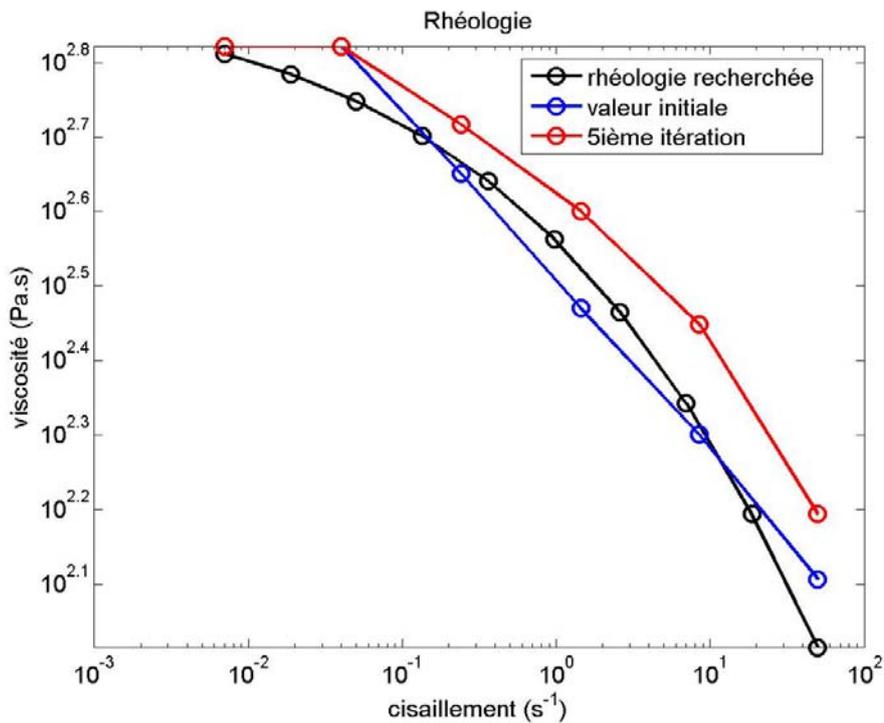


Figure 5.18 : Rhéologie estimée (en rouge) à la 5^{ème} itération, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière. La courbe noire correspond à la solution de référence et la courbe bleue à l'estimation initiale.

5.3.3.3 Effet de la pondération

Tout comme le fait de négliger les pertes thermiques, une hypothèse de profil de température homogène en entrée provoque une dégradation du critère du débit pour améliorer le critère de température. A moins d'estimer simultanément le profil thermique en entrée de filière et la rhéologie, il convient de voir si on peut limiter l'influence de cette erreur de modélisation en jouant sur les coefficients de pondération. Une nouvelle tentative d'estimation est donc faite, avec pour seule différence les coefficients de pondération : $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

La figure 5.19 montre un changement d'allure de l'évolution du critère, due à l'inversion de la tendance précédente : cette fois-ci, c'est le critère du débit qui est minimisé en premier avant de réajuster le critère de température (figures 5.20 et 5.21). La figure 5.22 montre que dans ces conditions l'estimation des paramètres rhéologiques est de nouveau très bonne.

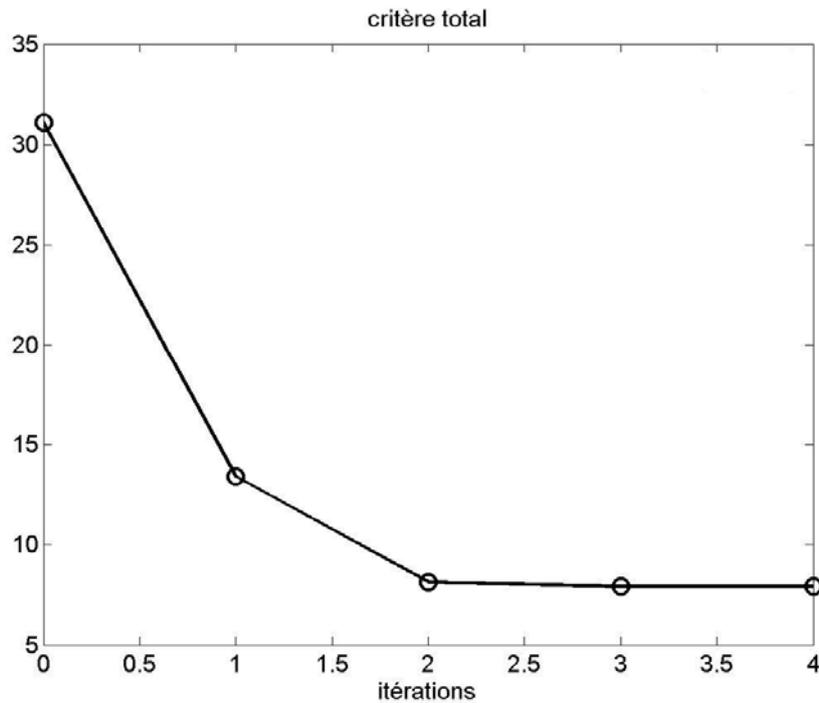


Figure 5.19 : Evolution du critère global en fonction des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière, mais avec une pondération de $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

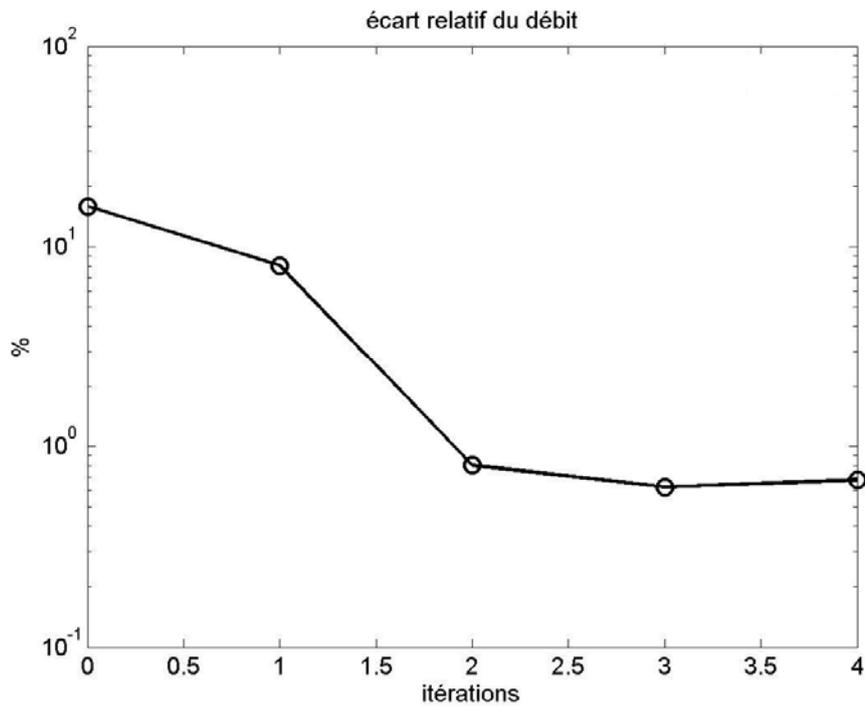


Figure 5.20 : Evolution de l'écart relatif du débit en fonction des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière, mais avec une pondération de $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

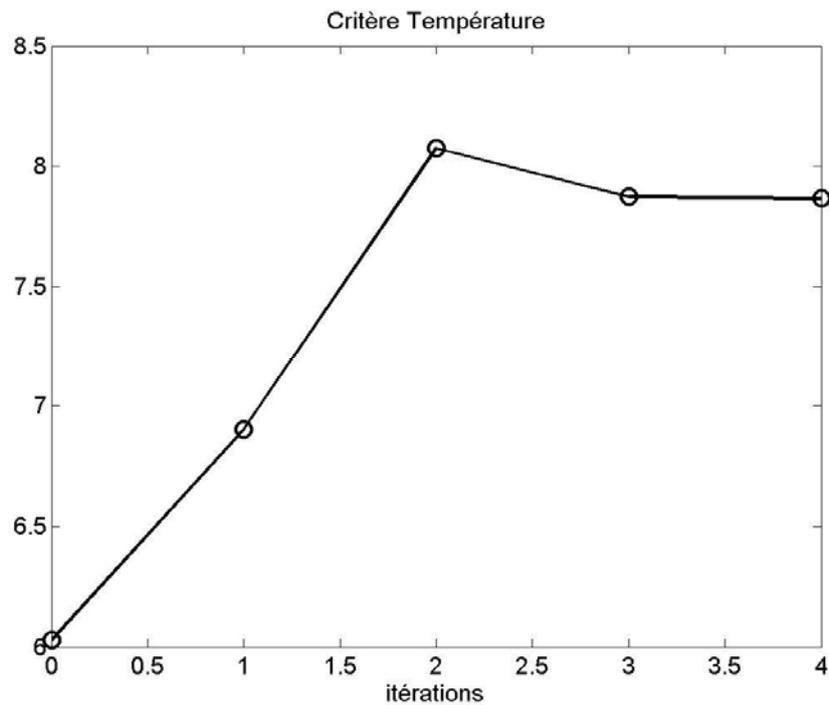


Figure 5.21 : Evolution du critère de température en fonction des itérations, pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière, mais avec une pondération de $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$.

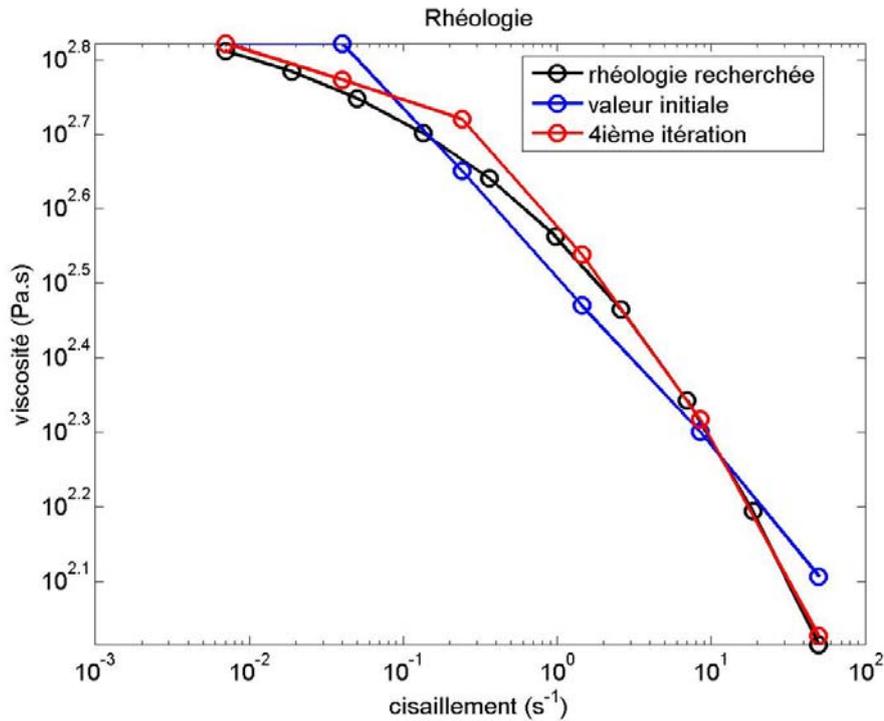


Figure 5.22 : Rhéologie estimée (en rouge) à la 5^{ème} itération pour une hypothèse de profil thermique homogène en entrée de filière, mais avec une pondération de $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$. La courbe noire correspond à la solution de référence et la courbe bleue à l'estimation initiale.

Le tableau 5.8 permet de quantifier l'influence de l'hypothèse d'un profil thermique homogène. Pour information, les critères des moindres carrés obtenus à la 3^{ème} itération en prenant le profil de référence pour réaliser l'inversion sont de 6.19×10^{-5} pour la température et 4.23×10^{-5} pour le débit.

Tableau 5.8 : Paramètres de viscosité estimés en fonction de la prise en compte de l'hétérogénéité du profil thermique d'entrée et de la pondération

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0 estimés		
	Profil thermique homogène $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1$	Profil thermique homogène $\alpha_T = 1$ et $\alpha_Q = 1000$	Profil thermique de référence
0.007	0.830	0.830	0.830
0.04	0.830	0.742	0.733
0.24	0.651	0.656	0.636
1.44	0.498	0.432	0.418
8.48	0.352	0.260	0.255
50	0.196	0.133	0.131

5.3.3.4 Conclusion

Différentes études montrent que le profil thermique n'est visiblement pas homogène en entrée de filière [Agassant, 1996], [Karkri, 2004]. Toutefois la détermination de son allure nécessite l'emploi d'une technique inverse similaire à la méthode d'estimation de rhéologie présentée ici. L'hypothèse de l'homogénéité de ce profil thermique en entrée de filière résulte donc d'un manque de données. Toutefois cette erreur de modélisation affecte l'algorithme d'inversion si elle n'est pas compensée par une pondération entre les deux critères. Pour une pondération suffisante, l'influence de la forme du profil d'entrée devient très faible sur le résultat final.

5.3.4 Conclusion

L'écart à l'idéalité a été rappelé : thermocouples défectueux, pertes thermiques, profil thermique hétérogène en entrée de filière. Chacun de ces écarts peut poser des problèmes pour l'estimation rhéologique par inversion de mesures : les thermocouples manquants provoquent ici une méconnaissance d'une condition limite, les pertes thermiques et le profil thermique d'entrée ont une influence directe sur les mesures de température aux thermocouples. Pour réduire l'influence de ces écarts au modèle, la résolution du problème se fait sur la demi-filière supérieure où on a un maximum de données expérimentales, et en pondérant fortement le critère de débit sur celui de la température. De plus, le modèle des pertes thermiques est introduit dans la description du problème afin d'éviter d'avoir un critère de température trop élevé, faisant perdre de la précision à l'estimation.

5.4 Estimation de rhéologie par inversion de mesures expérimentales

5.4.1 Enoncé du problème traité

Comme précisé en 5.3.1, le manque de mesures de températures au niveau de la chaufferette inférieure impose un calcul sur la demi-filière supérieure seulement. La nomenclature des conditions limites est la même que celle indiquée en figure 5.4.

Par rapport aux tableaux 2.6 et 5.1, le cas traité correspond à un différentiel de pression de 195.45×10^5 Pa et à une température de régulation de 473.15 K. La température imposée par les chaufferettes a été mesurée et interpolée pour fournir une condition limite réaliste.

Le modèle des pertes thermiques est utilisé, mais la température d'entrée est prise à 478.15 K. Pour limiter l'influence de ces erreurs de modélisation (imperfection du modèle de pertes thermiques et hétérogénéité réelle du profil thermique d'entrée), il faut appliquer une pondération des critères.

Par ailleurs, l'estimation dépend de la précision des mesures expérimentales. La détermination du débit massique se fait en dérivant les mesures de masse par rapport au temps, sachant que pour chaque jeu de condition opératoire, l'acquisition dure 30 min et que la période d'échantillonnage de la masse est de 2 s. L'écart type chiffrant la précision du débit nous indique que le débit massique est connu à 0.1%. La figure 5.23 montre l'évolution de la température à un thermocouple utilisé pour l'inversion. L'acquisition durant une demi-heure, le système est estimé stabilisé thermiquement à 5 minutes de la fin. On constate sur la figure que la variation maximale de température relevée est de 0.06 K. Pour être plus précis, l'écart-type est de 0.026 K sur cette mesure. On peut donc évaluer la précision des thermocouples à 0.03 K et utiliser cette précision pour pondérer l'expression du critère :

$$J = \frac{1}{\sigma_T} J_T + \frac{1}{\sigma_Q} J_Q \quad (5.5)$$

où J est le critère des moindres carrés, J_T et J_Q les critères relatifs aux températures mesurées aux thermocouples et au débit, et σ_T et σ_Q les précisions des mesures. Soit en utilisant les valeurs numériques précédentes et en se rappelant que le critère sur le débit est un critère relatif :

$$J = \frac{1}{0.03} J_T + \frac{1}{10^{-3}} J_Q$$

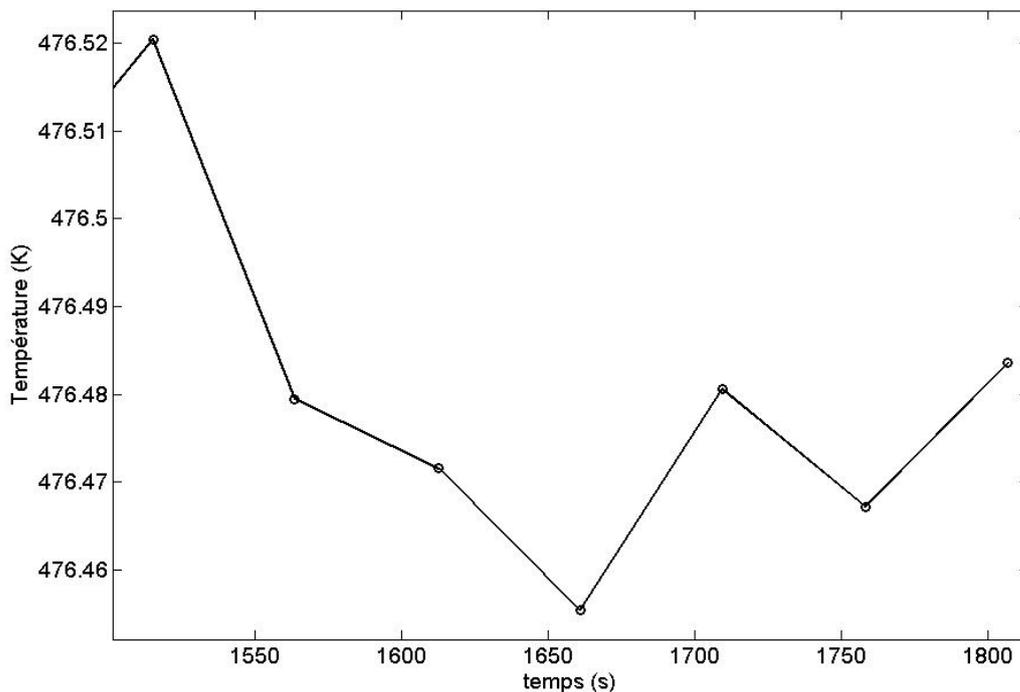


Figure 5.23: Relevé de température au capteur d'abscisse 0.11 m, à 1 mm au dessus du canal d'extrusion, pour les 5 dernières minutes de la demi-heure d'acquisition correspondant au différentiel de pression de 199.45×10^5 Pa et à une température de régulation de 473.15 K.

Toutefois les pertes thermiques ne sont évaluées qu'approximativement. Dès lors, nous ne pouvons espérer retrouver la précision des thermocouples. La pondération suivante est alors utilisée :

$$J = J_r + \frac{1}{10^{-3}} J_\varrho$$

Notons qu'elle correspond à la pondération appliquée lors des estimations numériques du paragraphe 5.3.

5.4.2 Application et résultats de la technique inverse

L'initialisation du problème a été évaluée en 5.2 à partir des données expérimentales :

Tableau 5.9: Initialisation de l'estimation

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0
0.007	1.0
0.04	1.0
0.24	0.61
1.44	0.37
8.48	0.26
50	0.15

Cette initialisation s'avère proche de la réalité car l'écart au débit mesuré expérimentalement n'est que de 1.4 %. En revanche, l'écart type en température est de 0.49 K, mais les écarts à l'idéalité du point de vue thermique expliquent cette différence.

Compte-tenu de la qualité de notre estimation initiale, la solution se stabilise en 2 itérations seulement, comme le montre la figure 5.24. Les figures 5.25 et 5.26 illustrent le rôle de la pondération, et la figure 5.27 donne graphiquement le résultat de l'estimation. On peut constater sur cette figure que les paramètres de viscosité estimés majorent les mesures expérimentales.

Le tableau 5.10 montre l'intérêt de l'estimation par inversion de mesures : entre le modèle obtenu à partir des mesures rhéologiques classiques et le modèle calculé par la technique inverse, l'écart de débit est très important. Seule la thermique semble mieux décrite avec la rhéologie obtenue à partir des mesures traditionnelles.

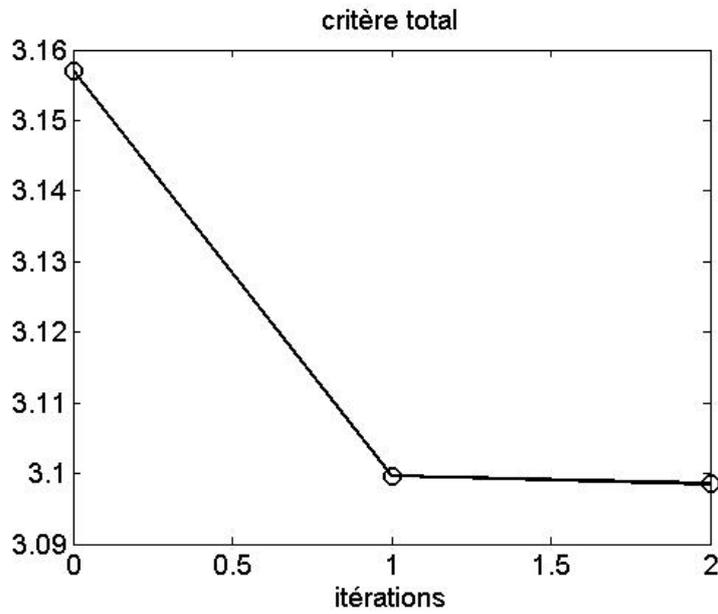


Figure 5.24 : Evolution du critère au cours des itérations lors de l'estimation de la rhéologie à partir de données expérimentales réelles.

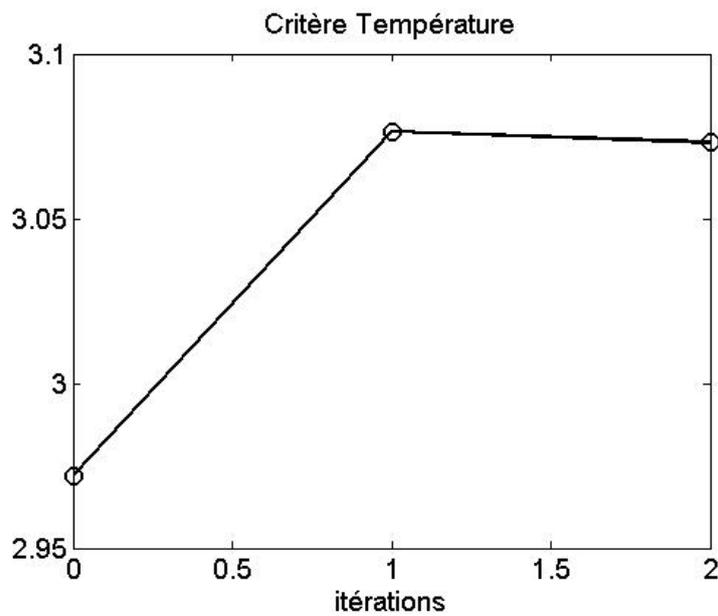


Figure 5.25 : Evolution du critère de température au cours des itérations lors de l'estimation de la rhéologie à partir de données expérimentales réelles.

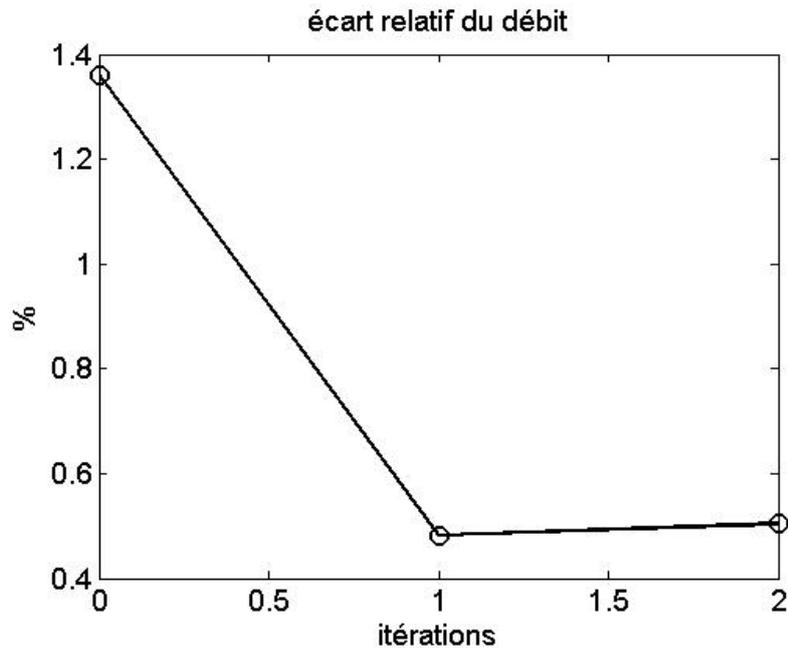


Figure 5.26 : Evolution de l'écart relatif du débit au cours des itérations lors de l'estimation de la rhéologie à partir de données expérimentales réelles.

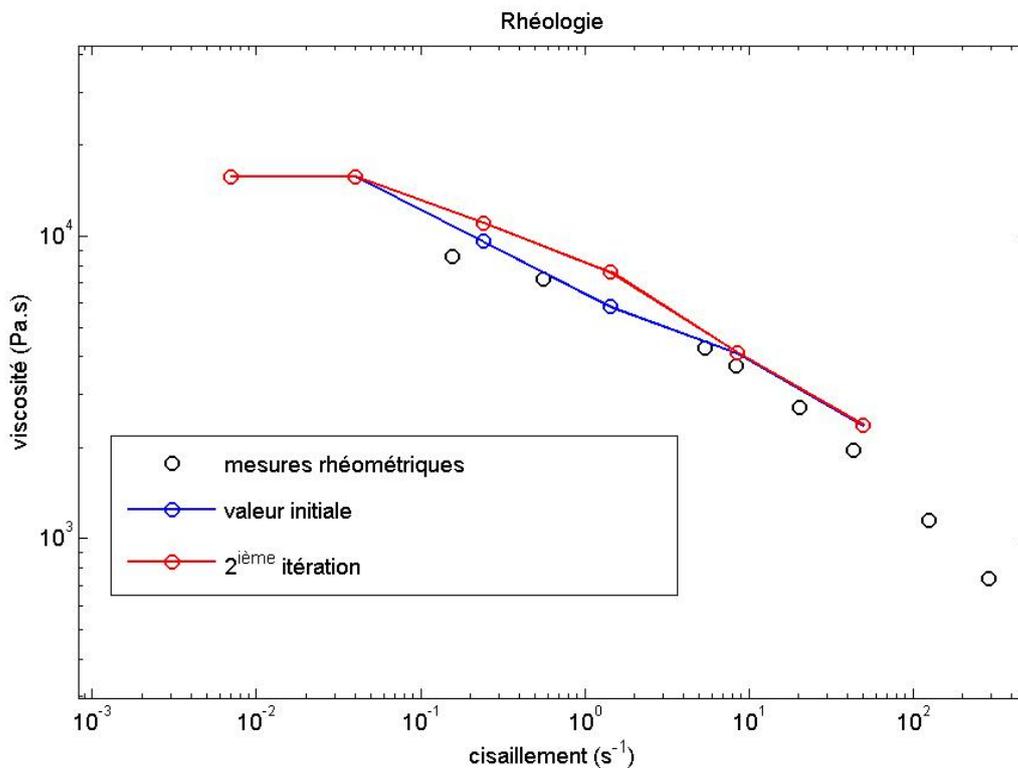


Figure 5.27 : Rhéologie estimée (en rouge) à partir de données expérimentales réelles. En bleu, l'estimation initiale. En noir, les mesures de viscosité obtenues via des rhéomètres classiques.

Tableau 5.10 : Tableau récapitulatif des écarts observés avec les mesures réelles lors des simulations en fonction du modèle rhéologique choisi.

	Modèle de Carreau Yasuda du PEBD obtenu à partir de mesures rhéologiques classiques	Estimation initiale de la rhéologie	Estimation finale de la rhéologie
Ecart type des erreurs sur les températures (K)	0.37	0.50	0.51
Ecart relatif sur le débit (%)	14	1.36	0.50

5.4.3 Discussion

L'exploitation des données expérimentales permet une initialisation de la rhéologie très correcte qui permet d'arriver à la convergence de l'algorithme en quelques itérations. La pondération du critère du débit par rapport au critère de température permet de compenser les imprécisions du modèle, bien que les hypothèses erronées sur la thermique (profil de température d'entrée et pertes thermiques) produisent un mauvais critère de température. On constate toutefois que le résultat via l'inversion de mesure restitue l'écoulement de façon bien plus précise que le modèle de Carreau-Yasuda obtenu à partir de mesures rhéométriques directes.

Le résultat obtenu est très bon mais souffre des imprécisions du modèle. De plus, le modèle rhéologique ainsi estimé est valable pour des conditions opératoires données. Afin d'améliorer sa généralité, on peut traiter plusieurs essais expérimentaux simultanément.

5.5 Estimation de rhéologie par inversion de mesures expérimentales pour différentes conditions opératoires traitées simultanément

5.5.1 Cas expérimentaux considérés

La configuration du problème traité est toujours la même. Néanmoins 2 essais expérimentaux sont ici traités simultanément. Les conditions opératoires sont donc différentes, à savoir le différentiel de pression et la température de consigne.

Dans notre modèle rhéologique, le coefficient d'Arrhénius est supposé connu, car déterminé par interpolation de mesures expérimentales. Toutefois la loi d'Arrhénius ne représente pas parfaitement le comportement rhéologique observé. Dès lors, réaliser l'estimation rhéologique sur des essais expérimentaux réalisés dans des conditions opératoires de température très différentes ajoute une erreur à notre modèle, et complique la conciliation des données. Dans cette optique, les deux essais ont été pris à une température de consigne de 473.15 K, et seule la pression diffère. Le premier test a un différentiel de pression de 175×10^5 Pa et l'autre a un différentiel de pression de 200×10^5 Pa (il s'agit en fait du cas traité au paragraphe 5.4).

5.5.2 Application et résultats de la technique inverse

L'initialisation et la pondération restent les mêmes qu'au paragraphe 5.4. Là aussi l'algorithme converge très rapidement, comme le montre la figure 5.28. Le critère de température augmente légèrement (figure 5.29), mais le critère en débit diminue (figure 5.30) en accord avec la pondération. On obtient finalement la rhéologie illustrée en figure 5.31. Le tableau 5.11 montre que l'estimation avec deux jeux de données donne des résultats légèrement différents de l'estimation à partir d'un seul essai. Une nette amélioration du débit (un ordre de grandeur sur l'écart relatif) est constatée (tableau 5.12) néanmoins l'écart-type en température est plus élevé.

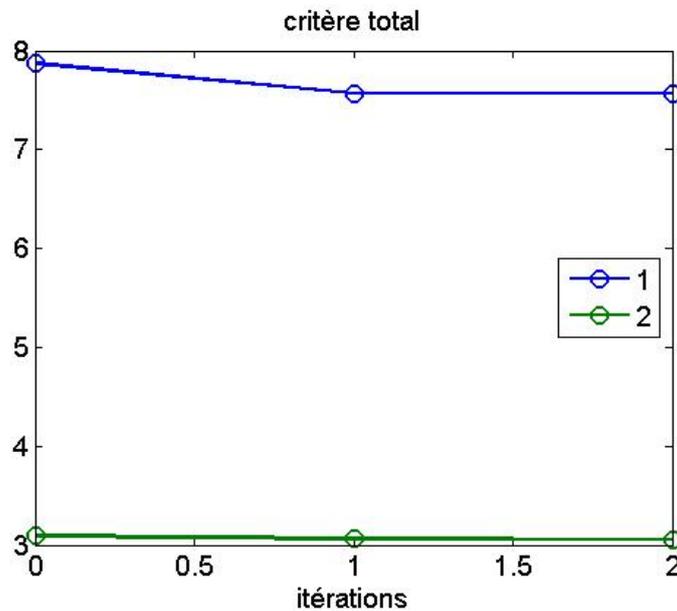


Figure 5.28 : Suivi des critères globaux pour le cas 1 (en bleu) et le cas 2 (en vert) au cours des itérations. Les cas 1 et 2 réfèrent respectivement à des différentiels de pression de 175×10^5 et 200×10^5 Pa pour une température de consigne de 473.15 K.

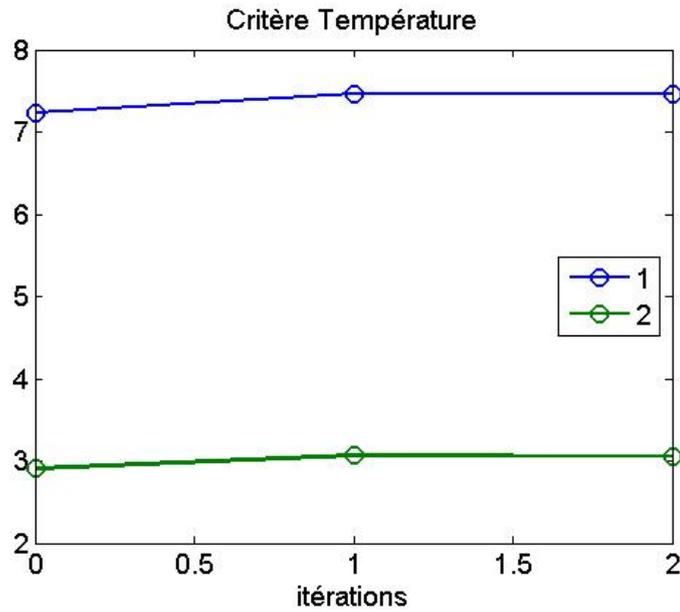


Figure 5.29 : Evolution des critères des moindres carrés de température au cours des itérations. Les cas 1 et 2 réfèrent respectivement à des différentiels de pression de 175×10^5 et 200×10^5 Pa pour une température de consigne de 473.15 K.

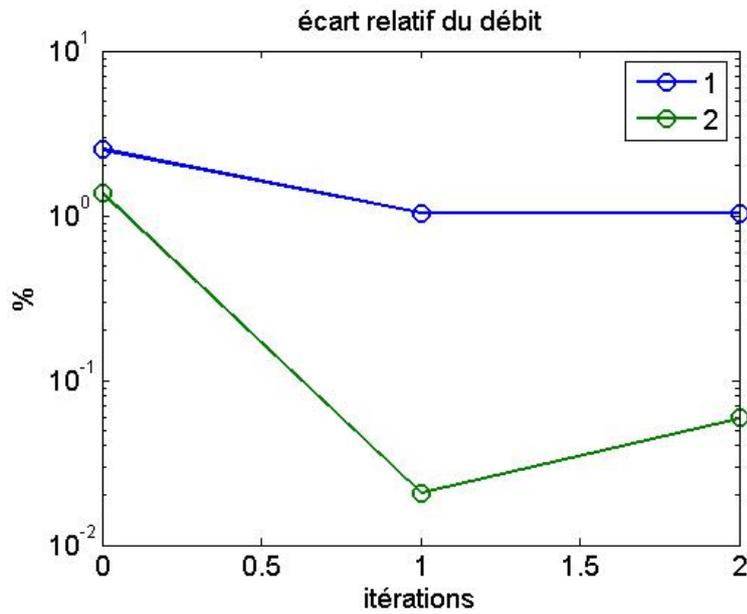


Figure 5.30 : Evolution des écarts des débits relatifs au cours des itérations. Les cas 1 et 2 réfèrent respectivement à des différentiels de pression de 175×10^5 et 200×10^5 Pa pour une température de consigne de 473.15 K.

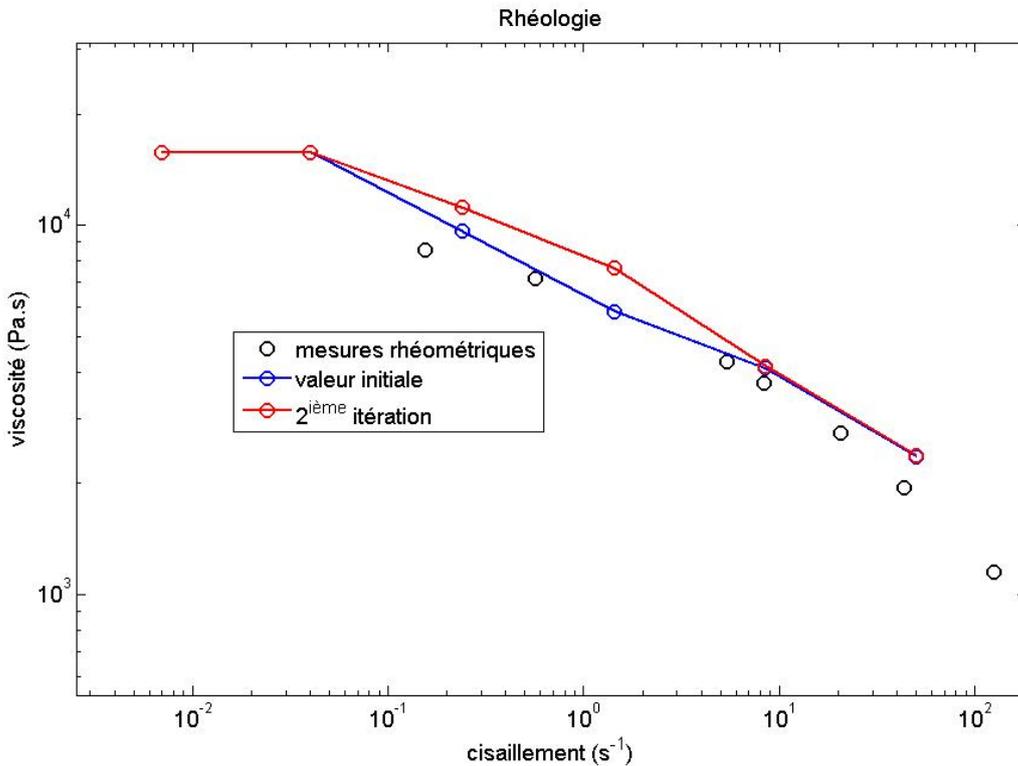


Figure 5.31 : Rhéologie estimée (en rouge) à partir de données expérimentales réelles. En bleu, l'estimation initiale. En noir, les mesures de viscosité obtenues via des rhéomètres classiques.

Tableau 5.11 : Différences dans les estimations en fonction du nombre de jeux de données utilisés

$\dot{\gamma}$ (s ⁻¹)	μ_i/μ_0 estimés	
	1 seul jeu de données expérimentales	2 jeux de données expérimentales
0.007	1.000	1.000
0.04	1.000	1.000
0.24	0.702	0.707
1.44	0.482	0.485
8.48	0.262	0.263
50	0.151	0.151

5.5.3 Discussion

En augmentant le nombre de données expérimentales, on généralise le résultat de l'estimation. Toutefois la thermique des différents cas étudiés n'étant pas rigoureusement maîtrisée (loi d'Arrhénius imparfaite, interpolation des mesures de température pour établir les conditions limites, pertes thermiques, profil d'entrée...), l'écart-type de l'erreur commise sur les températures est dégradé. La pondération du critère de débit permet toutefois une résolution de qualité, même si il est difficile d'évaluer la précision des paramètres.

Tableau 5.12 : Tableau récapitulatif des écarts observés avec les mesures réelles lors des simulations en fonction du modèle rhéologique choisi.

	Modèle de Carreau Yasuda du PEBD obtenu à partir de mesures rhéologiques classiques	Estimation initiale de la rhéologie	Estimation finale de la rhéologie
Ecart type des erreurs sur les températures (K)	0.59	0.65	0.66
Ecart relatif du débit pour le cas 1 (%)	11.7	2.5	1.04
Ecart relatif du débit pour le cas 2 (%)	14.0	1.37	0.06

5.6 Conclusion

En utilisant judicieusement les données expérimentales, l'algorithme d'estimation a pu être correctement initialisé. Des difficultés subsistent : une grande incertitude sur la condition limite inférieure de la filière, l'hétérogénéité du profil thermique en entrée de filière et la détermination des pertes thermiques. Pour résoudre ce problème, quelques hypothèses supplémentaires sont posées : symétrie parfaite de la filière qui permet de faire l'estimation que sur une demi-filière, détermination théorique de coefficients d'échange traduisant les pertes thermiques. Une pondération des critères relatifs aux températures et au débit est faite par rapport aux précisions expérimentales, et nuancée pour prendre en compte le problème des pertes thermiques.

L'utilisation de cette rhéologie estimée permet d'obtenir en simulation un accord entre la pression et le débit très supérieur à la rhéologie mesurée par des techniques rhéométriques classiques, ce qui justifie amplement l'utilisation de cette technique. L'estimation se fait sur 4 décades de cisaillement, bien que les paramètres à faibles taux de cisaillement ne soient sans doute pas très fiables. Cette technique permet de faire une estimation à des plus hauts taux de cisaillement qu'un rhéomètre cône-plan et à de plus bas taux de cisaillement qu'un rhéomètre capillaire. Elle s'affranchit de toutes les corrections classiques que sont les corrections de Bagley, Rabinovitch et l'hypothèse d'isothermie. On constate d'ailleurs que les paramètres de viscosité estimés sont plus grands que les points de mesure obtenus par méthode directe.

Toutefois une faiblesse réside actuellement dans la prise en compte de la thermodépendance : la modélisation de celle-ci par une loi de type Arrhénius semble un peu approximatif. Couplée au problème des pertes thermiques latérales, à la nécessité d'interpoler les conditions limites de température à partir des points de mesures, et à la méconnaissance du profil thermique en entrée de filière, le comportement thermique du polymère n'est pas encore fidèlement reproduit. L'extension de l'estimation à la thermodépendance devrait permettre d'améliorer significativement le critère et donc la précision du modèle rhéologique ainsi estimé.

Bien qu'il reste des choses à améliorer, cette technique d'estimation de rhéologie par inversion de mesures, constitue une technique de mesure indirecte parfaitement adaptée aux procédés de mises en forme des polymères. De plus, il s'agit d'un outil d'évaluation adaptée au code de calcul avec lequel elle est couplée, ce qui confère au modèle une amélioration de ses capacités prédictive.

6 Conclusion

6.1 Bilan

Cette étude porte sur l'estimation de la rhéologie de polymères fondus lors de leur écoulement dans une filière plate d'extrusion. Pour ne pas fixer la forme du modèle rhéologique à l'avance, la rhéologie est modélisée comme un ensemble discret de couples taux de cisaillement – viscosité. La continuité du modèle est assurée par interpolation. Plus le nombre de paramètres est grand et plus le modèle est précis. L'étude du système a démontré qu'un modèle 2D est suffisant dans ce cas, et la symétrie du problème permet d'alléger considérablement les temps de calculs. Pour estimer les paramètres de viscosité du modèle rhéologique proposé, une technique inverse basée sur la minimisation du Lagrangien a été programmée. Elle s'appuie sur les équations adjointes de la température et de la vitesse, qui permettent le calcul de la direction de descente. Un calcul de sensibilité permet de déduire la profondeur de descente. Néanmoins le problème étant extrêmement mal posé au sens d'Hadamard, une technique de régularisation a été appliquée pour obtenir le caractère rhéofluidifiant des polymères considérés. Cette technique de régularisation consiste à imposer une décroissance de la pente de la courbe d'écoulement lorsque le taux de cisaillement augmente. Pour ce faire, les paramètres de viscosité violant ce principe, sont recalculés par interpolation. Enfin une méthode d'initialisation de l'algorithme a été présentée. Cette méthode ne s'appuie que sur les résultats expérimentaux et peut donc être automatisée. La technique d'estimation a par la suite été validée pour plusieurs cas numériques. Malgré une faiblesse pour les faibles taux de cisaillement, elle permet d'obtenir un modèle très représentatif du comportement rhéologique au regard des transferts thermiques et de l'écoulement. L'instrumentation et la modélisation de la rhéologie permettent de s'affranchir des habituelles approximations utilisées dans les rhéomètres traditionnels. Toutefois les imprécisions du modèle relative à la thermique (profil thermique en entrée de filière, pertes thermiques latérales, interpolation des conditions limites...) ne permettent pas d'obtenir la précision désirée sur les paramètres.

En définitive, une nouvelle méthode d'estimation de la rhéologie des polymères fondus est proposée. Le dispositif expérimental n'a pas permis d'en retirer les résultats optimaux, mais laisse déjà entrevoir le potentiel de la technique employée. Bien sûr, il reste encore beaucoup de travail pour finaliser l'estimation rhéologique mais ce premier jalon montre que c'est possible et ce qu'on est en droit d'en attendre.

6.2 Les perspectives

Pendant les trois années de cette étude, beaucoup de choses ont été vues, mais tout n'a pas pu être réalisé. Ces perspectives à court terme ont déjà été évoquées et concernent notamment la dépendance en température.

Dans un premier temps, l'inversion du paramètre d'Arrhénius est à programmer. Une proposition d'initialisation a été faite dans le chapitre 5. L'estimation du paramètre serait sans doute facilitée par un paramétrage par rapport à une température de référence :

$$\mu(T) = \mu_0 e^{A\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)}$$

On peut ensuite programmer le principe d'équivalence temps-température pour améliorer encore le modèle.

Ces améliorations permettent d'augmenter rapidement la capacité de la technique inverse. Mais la dépendance en température peut être programmée de la même façon que la dépendance en cisaillement : par le biais d'un nombre de triplets (cisaillement, température, viscosité). Ce modèle ne fixe pas la forme de la thermodépendance a priori, et nécessite sans doute une régularisation approfondie. C'est, à terme, la solution à privilégier.

Ce qu'on fait pour la température peut et doit être programmé pour la pression. Le modèle de piézo-dépendance suivant une loi exponentielle pose des difficultés d'application numérique. Le modèle rhéologique peut alors être décrit par un tableau à 4 dimensions, définissant pour chaque quartet un taux de cisaillement, une température, une pression et une viscosité associée. Pour être capable d'estimer correctement ces points, il est nécessaire d'avoir accès à des pressions beaucoup plus importantes, telles qu'on en rencontre en injection.

Pour revenir sur la technique d'inversion, des points peuvent être améliorés : l'initialisation peut être automatisée, permettant une utilisation en ligne de l'algorithme. La résolution de l'équation adjointe de la vitesse pourrait être améliorée en travaillant sur le solveur. Il faudrait étudier l'intérêt de fonctions de lissage dans la régularisation : il est possible qu'elles permettent d'estimer un plus grand nombre de paramètres et d'améliorer la précision.

Enfin la modélisation peut être améliorée en tenant compte des dépendances en température et en pression de toutes les constantes caractéristiques des polymères étudiés (masse volumique, capacité calorifique, conductivité).

Une autre étape déterminante serait de coupler ce travail avec celui de Mustapha Karkri. La viscosité dépendant de la température, il faudrait estimer simultanément les paramètres rhéologiques et le profil de température en entrée de la filière. Pour ce faire, il est nécessaire de faire une réduction de modèle du profil d'entrée, afin que le nombre de paramètres à estimer soit inférieur aux nombres de données expérimentales.

...

6.3 Conclusion

Les bases d'une nouvelle technique d'évaluation de la rhéologie ont été posées, mais il reste encore beaucoup de travail. Avis aux amateurs...

7 Bibliographie

- [Agassant et al., 1996] J.-F. Agassant, P. Avenas, J.-P. Sergent, B. Vergnes, M. Vincent, La mise en forme des matières plastiques □ 3^{ième} édition, Lavoisier, TEC & Doc, 1996
- [Alifanov et al., 1985] O.M. Alifanov, Inverse Heat Conduction, Ill-posed problems, Wiley Interscience, New York, 1985
- [Alifanov et al., 1995] O.M. Alifanov, E. Artyukhin et S.V. Rummyantsev, Extreme methods for solving ill-posed problems with applications to inverse heat transfer, Begell house, New-York, 1995.
- [Angot, 1998] P. Angot, Contribution à l'étude des transferts thermiques dans des systèmes complexes; application aux composants électroniques. Thèse de doctorat, Université Bordeaux I, spécialité mécanique, 1998.
- [Anju et al., 1997] Anju A., Kawahara M., Comparison of sensitivity equation and adjoint equation methods for parameter identification problems, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol 40 (1997), pp. 1015-1024.
- [Arquis, 1984] Arquis E., Caltagirone J.-P., Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-poreux : application à la convection naturelle. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Série II, n°1, pp. 1-4, 1984
- [Baranger et al., 1991] J. Baranger et al., Analyse numérique, Hermann Editeurs des Sciences et des Arts, Collection Enseignement des Sciences, 1991
- [Beck et al., 1996] J.V. Beck, B. Blackwell et A. Haji-Sheikh, Comparison of some inverse heat conduction methods using experimental data, International Journal of Heat and Mass Transfer, 1996, Vol. 39, N°17, pp.3649-3657
- [Beck et al., 1985] J.V. Beck, B. Blackwell, C.R. St Clair, Inverse Heat Condition : Ill-posed problems, Wiley Interscience, New york, 1985
- [Beck et al., 1977] J.V. Beck et K.J. Arnold, Parameter estimation in

- engineering and science, Chichester : Wiley Interscience, 1997
- [Blair et al., 2002]** S. Blair, C. McCabe et P.T. Cummings, Comparison of Nonequilibrium Molecular Dynamics with Experimental Measurements in the Nonlinear Shear-Thinning Regime, *Physical Review letters*, Vol 88, N°5, pp. 058302 1-4, 2002
- [Bird et al., 1977]** R.B. Bird, R.C. Armstrong et O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids*, Vol. 1, Fluid Mechanics, Wiley, New York, 1977
- [Bird et al., 1987]** R.B. Bird et al., *Dynamics of Polymeric Liquides : Fluid Mechanics & Kinetic Theory*, John Wiley and Sons, New York, 1987
- [Bonnet et al., 1999]** M. Bonnet et al., *Problèmes inverses de l'expérimentation à la modélisation*, Editions Tec & Doc, ARAGO 22, 1999
- [Bowers, 1986]** Development of inelastic models for the injection moulding process, *Prog. Rub. Plast. tech.*, 2, 23-38 (1986)
- [Breil, 2001]** Breil J., *Modélisation du remplissage en propergol de moteur à propulsion solide*, Thèse de doctorat 2001
- [Bueche, 1968]** F. Bueche, *J. Chem. Phys.*, 48, 4781 (1968)
- [Carreau, 1972]** P.J. Carreau, *Trans. Soc. Rheol.*, 16, 99 (1972)
- [Carrot et al., Techniques de l'Ingénieur]** C. Carrot, J. Guillet, *Viscoélasticité non linéaire des polymères fondus*, *Tech. Ing.*, AM1630
- [Chapman, 1996]** Chapman A., Saad Y., Wigton L., *High order ILU preconditionners for CFD problems*, Rapport technique, AMSI, Minesota Supercomputer Institute, 1996
- [Chorin, 1968]** Chorin A.J., *Numerical solution of the Navier-Stokes equations*, *Math. Comp.* 22, 1968.
- [CREPIM, 2003]** *Mesures des caractéristiques rhéologiques des polymères thermoplastiques*
- [Cross, 1965]** M.M. Cross, *J. Colloid. Science*, 20, 417 (1965)

- [Dealy et Wissbrun, 1990]** J.M. Dealy et K.F. Wissbrun, Melt Rheology and its Role in Plastics Processing, Van Nostrand, New York, 1990
- [Elégant et al., Techniques de l'Ingénieur]** L. Elégant et J. Rouquerol, Applications des microcalorimètres aux mesures thermiques, Tech. Ing., R3010.
- [Erner, 2005]** A. Erner, Etude expérimentale de thermoformage assisté par poinçon d'un mélange de polystyrènes, Thèse de doctorat, Mines de Paris, CEMEF, Sophia Antipolis, 2005
- [Favenec, 2005]** Y. Favenec, Optimisation and adjoint state, METTI 2005
- [Ferry, 1970]** J.D. Ferry, Viscoplastic Properties of Polymers, 2nd edition, Wiley, New York, 1970
- [Fin, 2004]** S. Fin, Rhéologie non newtonienne pour la simulation d'une filière d'extrusion, Rapport de stage de spécialisation (3^{ième} année d'école d'ingénieur – Ecole Nationale Supérieure de Physique et de Chimie de Bordeaux), 2004
- [Fortin et al., 1982]** Fortin M., Glowinski R., Méthodes de Lagrangien Augmenté – Application à la résolution numérique de problèmes aux limites. Méthodes Mathématiques de l'Informatique, Dunod, 1982
- [Garcia, 1999]** Garcia S., Experimental design optimization and thermophysical parameter estimation of composite materials using genetic algorithms, Thèse de doctorat, Université de Nantes, Laboratoire de Thermocinétique, 1999
- [Gavrus et al., 1996]** Gavrus A., Massoni E., Chenot J.L., An inverse analysis using a finite element model for identification of rheological parameters, Journal of Materials Processing Technology, Vol 60 (1996), pp. 447-454
- [Gejadze et al., 2002]** I. Gejadze, Y. Jarny, An inverse heat transfer problem for restoring the temperature field in a polymer melt flow through a narrow channel, International Journal of Thermal Sciences 41 (2002), pp. 528-535
- [Glockner, 2000]** Glockner S., Contribution à la modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes, thèse de doctorat, Université Bordeaux I, 2000

- [Graessley, 1967] W.W. Graessley, J. Chem. Phys. 47, 1942 (1967)
- [Grimstadt et al., 1998] Grimstadt A. A. et Mannseth T., Nonlinearity, Scale and Sensitivity for a Class of Parameter Estimation Problems, Proc. 9th Conf. Inverse Problems in Eng., Muncie, IN, 1998
- [Gustafssons, 1978] Gustafssons I., On first and second order symmetric factorisation methods for the solution of elliptic difference equations, Chalmers University of Technology, 1978.
- [Hadamard, 1923] J. Hadamard, Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations, New Haven, CT : Yale University Press, 2003
- [Han, 1976] C.D. Han, Rheology in Polymer Processing, Academic Press, New York, 1976
- [Hansen, 1998] P.C. Hansen, Rank-Deficient and discrete Ill-posed Problems, SIAM, Philadelphia
- [Harlow et al., 1965] Harlow F.H., Welch J.E., Numerical calculation of time dependent viscous incompressible flow, Physics of fluids, 8:21-82, 1965
- [Hensel, 1991] E. Hensel, Inverse theory and applications for engineers, Prentice Hall, New Jersey, 321 p., 1991
- [Hirsch, 1990] Hirsch C., Numerical computation of internal and external flows, John Wiley and sons, 1990.
- [Jarny et al., 1991] Y. Jarny, N. Ozisik, J.P. Bardon, A general optimization methode using adjoint equation for solving multidimensional inverse heat conduction, International Journal of Heat and Mass Transfer, 1991, Vol. 34, N°11, pp. 2911-2919
- [Jarny, 2005] Y. Jarny, Inverse Problems and regularized solutions, METTI 2005
- [Jun Liu, 1996] Jun Liu, A stability Analysis on Beck's Procedure for Inverse Heat Conduction Problems, Journal of Computational Physics, vol 123, pp. 65-73, 1996

- [Jurkowski et al., 1992]** T. Jurkowski, D. Delaunay, Y. Jarny, Conductivité pour mesurer en régime transitoire la conductivité d'un matériau injectable ou non, Brevet international, n°93919439.5-2204, Septembre 1992
- [Jurkowski et al., 1997]** T. Jurkowski, Y. Jarny et D. Delaunay, Estimation of thermal conductivity of thermoplastics under moulding conditions : an apparatus and an inverse algorithm, International Journal of Heat and Mass Transfer, 1997, Vol. 40, N° 17, pp 4169-4181
- [Karkri et al., 2005]** M. Karkri, Y. Jarny, P. Mousseau, Estimation of the initial temperature profile in the channel of an experimental extrusion die, Proceeding of 5th international Conference on Inverse Problems in Engineering : Theory and Practice, Cambridge, UK, 11-15th July 2005
- [Karkri et al., 2003]** M. Karkri, Y. Jarny, P. Mousseau, R. Deterre, Thermique de l'écoulement d'un polymère pseudoplastique, Congrès français de Thermique, SFT 2003, Grenoble, 3-6 juin 2003
- [Karkri et al., 2004]** M. Karkri, Y. Jarny, P. Mousseau, Inverse heat transfer analysis in a polymer melt flow within an extrusion die, Inverse Problems, Design and Optimization Symposium, Rio de Janeiro, Brazil, 2004
- [Karkri, 2004]** M. Karkri, Transferts de chaleur dans un écoulement stationnaire de polymère fondu dans une filière d'extrusion : métrologie thermique et technique inverse, Thèse de doctorat, Université de Nantes, Laboratoire de Thermocinétique, décembre 2004
- [Kurpisz et al., 1995]** K. Kurpisz et A.J. Nowak, Inverse Thermal problems, CMP, Wessex Institute of Technology, Southampton, 1995
- [Laun, 2003]** H. M. Laun, Pressure dependent viscosity and dissipative heating in capillary rheometry of polymer melts, Rheologica Acta, 42, pp 295-308, 2003
- [Le Niliot, 2003]** C. Le Niliot, L'estimation de flux et de températures pariétaux à l'aide de techniques inverses, METTI 2003
- [Lebaal et al., 2005]** N. Lebaal, S. Puissant, F.M. Schmidt, Rheological parameters identification using in situ experimental data

- of a flat die extrusion, *Journal of Materials Processing technology*, 164-165 (2005), 1524-1529
- [Liu, 1994]** Liu X-D., Osher S., Chan T., Weighted Essentially Non-Oscillatory Schemes, *Journal of Computational Physics*, Volume 115, Issue 1, Nov 1994, pp. 200-212
- [Maillet et al., 1995]** D. Maillet, J.C. Batsale et A. Degiovanni, Inversion de champs de température bidimensionnels par méthode spectrale et régularisation, *Journée d'études SFT-GUT, Métrologie Thermique et Techniques Inverses Bidimensionnelles*, 10 mai 1995
- [Mandel, 1966]** J. Mandel, *Cours de Mécanique des Milieux Continus, Annexe XXI*, Gauthiers-Villars, Paris, 1966
- [Massé, 2001]** Massé H., *Couplages thermomécaniques lors de la solidification de matériaux polymères*, Thèse de doctorat, 2001.
- [Mohammadi et al., 2003]** B. Mohammadi et J.H. Saïac, *Pratique de la Simulation Numérique*, Dunod, Industries et Technologies, Série Conception, 2003, ch 13
- [Murio, 1993]** D. Murio, *The mollification method and the numerical solution of ill-posed problems*, Wiley Interscience, New York, 254 p., 1993
- [Nakajima et Collins, 1974]** N. Nakajima et E.A. Collins, *Polym. Eng. Sci.*, 14, 137 (1974)
- [Nicolas et al., 1997]** Nicolas X., Traore P., Mojtabi A., Caltagirone J.-P., Augmented Lagrangian method and open boundary conditions in 2D simulation of Poiseuille-Bénard channel flow, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 25, n°2, pp. 265-283, 1997
- [Ostwald, 1923]** K. Ostwald, *Kolloid-Z*, 36, 99 (1923)
- [Park et al, 2003]** H.M. Park, H.J. Shin, Shape identification for natural convection problems using the adjoint variable method, *Journal of computational physics*, 186 (2003), pp. 198-211
- [Patankar, 1980]** Patankar S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, New York, 1980.

- [Piau., Techniques de l'Ingénieur]** J.-M. Piau, Fluides non-newtoniens, Tech. Ing. A710
- [Poutot, 2002]** Poutot Géraldine, Etude des transferts thermiques lors de la cristallisation d'un polymère semi-cristallin, Thèse de doctorat, Université de Nantes, Laboratoire de Thermocinétique, décembre 2002
- [Pujos et al., 2005 a]** C. Pujos, N. REGNIER, G. DEFAYE, Thermal sensitivity study of an unsteady polymer flow inside an extrusion die (poster), 17-20 mai, Cachan (France), ICCHMT 2005
- [Pujos et al., 2005 b]** C. Pujos, N. REGNIER, G. DEFAYE, Etude d'un écoulement visqueux thermodépendant dans une filière d'extrusion (communication orale), 29 août au 2 septembre, CFM 2005
- [Pujos et al., 2005 c]** C. Pujos, N. REGNIER, G. DEFAYE, Détermination du profil de température à l'entrée d'une filière d'extrusion en régime transitoire (communication orale), 20-22 Septembre, SFGP 2005
- [Pujos et al., 2006 a]** C. Pujos, P. Mousseau, N. Regnier, G. Defaye, Y. Jarny, Influence des paramètres de process sur le profil thermique d'un polymère en entrée d'une filière d'extrusion (poster), 16-19 Mai, SFT 2006
- [Pujos et al., 2006 b]** C. Pujos, N. REGNIER, G. DEFAYE, Determination of the inlet temperature profile of an extrusion die in unsteady flow, *Chemical Engineering and Processing (2006)*, accepté
- [Raynaud, 1998]** M. Raynaud, Le problème inverse de la conduction de la chaleur, Techniques de l'Ingénieur, traité Génie énergétique, Vol BE 8265, pp. 1-17, 1998
- [Scarpa, 1995]** F. Scarpa et G. Milano, Kalman filter smoothing technique applied to the inverse heat conduction problem, Numerical Heat Transfer, 1995, Part B, Vol 28, pp.79-96
- [Sokala et al., 2003]** M. Sokala, B. Kruk, Beck's procedure – sensitivity of the algorithm to measurement error, Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics 2, 370-371 (2003)
- [Sweby, 1984]** Sweby P.K., High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, SIAM, J. Numer. Analysis, 21, pp. 995-1011, 1984.

- [Tanner, 1985]** R.I. Tanner, Engineering Rheology, Clarendon Press, Oxford, 1985
- [Tikhonov et al, 1977]** A.N. Tikhonov et V.Y. Arsenin, Solutions of ill-posed Problems, V.H. Winston and Sons, Washington, D.C., 1977
- [Truffart et al., 1993]** B. Truffart, Y. Jarny, D. Delaunay, A general optimization algorithm to solve 2-D boundary inverse heat conduction problems using finite elements, First Conference on Inverse Problems in Engineering : Theory and Practice, Palm Coast Florida, ASME Publication, pp. 53-60, 1993
- [Vand der Vorst, 1992]** Van der Vorst H.A., A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of non-symmetric linear systems, SIAM, J. Sci. Statis. Comput., 13, pp.631-644, 1992.
- [Vergnes et Puissant, Techniques de l'Ingénieur]** B. Vergnes et S. Puissant, Extrusion Monovis (partie 1), Tech. Ing., AM 3650
- [Vincent, 1999]** Vincent S., Caltagirone J.-P., Efficient solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems, Int. J. Numer. Methods Fluids, vol.30, pp. 795-811, 1999.
- [De Waele, 1923]** A. de Waele, Oil and color Chem. Assoc., J., 6, 33 (1923)
- [Wales, 1975]** J.L.S. Wales, Rapport TNO n°P 748B, A collaborative study of capillary flow of a highly lubricated unplasticized polyvinylchloride, 1975
- [Walters, 1978]** K. Walters, Developments in Non-Newtonian Fluid Mechanics, a Personal View, Communication à l'IUTAM Symposium on Non-Newtonian Fluid Mechanics, Louvain La Neuve, Belgique (1978)
- [WLF, 1955]** M.L. Williams, R.F. Landel et J.D. Ferry, J. Am. chem. Soc., 77, 3701 (1955)
- [Yasuda et al, 1981]** K.Y. Yasuda, R.C. Armstrong et R.E. Cohen, Rheol. Acta, 20, 163 (1981)

8 Nomenclature

A	rapport de l'énergie d'activation et de la constante des gaz parfaits dans la loi d'Arrhénius on trouve a dans le chapitre méth inv
a_μ	constante de réduction de viscosité pour l'énoncé du principe d'équivalence temps-température
a_τ	constante de réduction du taux de cisaillement pour l'énoncé du principe d'équivalence temps-température
b	observables (en général)
C_p	capacité calorifique (J/(K*kg))
d	direction de descente
DP_n	degré moyen de polymérisation en nombre
DP_w	degré moyen de polymérisation en poids
E	module d'Young
\vec{e}_i	vecteur unitaire dans la i-ème direction
F	matrice de Fisher
\vec{g}	vecteur gravité (m/s ²)
h	hauteur de la filière
I	indice de polydispersité
J	fonctionnelle à minimiser ou critère
K	consistance du matériau Pa.s ^m
L	longueur de la filière
m	indice de pseudoplasticité
m_i	masse d'une chaîne de degré de polymérisation i
M_i	Masse molaire d'une chaîne de degré de polymérisation i
M_n	masse molaire moyenne en nombre
M_w	masse molaire moyenne en poids

\vec{n}	vecteur normal
N_i	nombre de chaînes de masse molaire M_i
p	pression (Pa)
pfd	profondeur de descente
Q	débit
\tilde{Q}	débit expérimental ou de référence
S_u	sensibilité par rapport à la variable d'état u
S_u^*	sensibilité normalisée par rapport à la variable d'état u
T	Température (K)
t	le temps
\tilde{T}	température expérimentales ou de référence
T_g	Température de Transition vitreuse (K)
\vec{V}	vecteur vitesse (m/s)
V_x	vitesse selon x
V_z	vitesse selon z
W	largeur de la filière
α	coefficient de pondération
$\dot{\gamma}$	taux de cisaillement (/s)
Γ	frontières des domaines (e: entrée, s: sortie, sup: supérieure, inf: inférieure, 1- métal à gauche, 2- métal à droite, c: cannal)
$\dot{\gamma}_i$	i -ème taux de cisaillement du modèle de viscosité
Δ	avec x ou t , différence entre 2 unités de temps ou d'espace
ε	erreur
λ	conductivité thermique $W/(m \cdot K)$
Λ	Lagrangien
μ	viscosité dynamique (Pa.s)

μ_0	viscosité newtonienne (Pa.s) ou constante de normalisation des viscosités
μ_i	i-ème paramètre du modèle de viscosité
ρ	masse volumique (kg.m ⁻³)
σ	contrainte
φ	variable adjointe de la température
Φ	terme de dissipation visqueuse (W)
χ	coefficient de piézodépendance (/Pa)
ψ	variable adjointe de la vitesse selon x
∇	opérateurs de divergence, gradients, scalaire et matriciel

9 Annexe : Capteurs

Tableau Récapitulatif des positions des capteurs et comparaison entre les positions théoriques et réelles, à partir du tableau 5.3 et de la figure 5.24 de la thèse de Karkri.

Position générale	Position théorique			Position réelle		
	x ($\times 10^{-3}$ m)	z ($\times 10^{-3}$ m)		x ($\times 10^{-3}$ m)	z ($\times 10^{-3}$ m)	
		bloc inférieur	bloc supérieur		bloc inférieur	bloc supérieur
Entrée de filière	0	2.5	26.5	0	2.4	26.4
	0	13.5	37.5	0	13.4	37.4
Interfaces chaufferettes/filière	7.5	0	40	7.63	0	40
	27.5	0	40	27.56	0	40
	47.5	0	40	47.46	0	40
	67.5	0	40	67.4	0	40
	87.5	0	40	87.55	0	40
	107.5	0	40	107.51	0	40
	127.5	0	40	127.37	0	40
	147.5	0	40	147.31	0	40
	167.5	0	40	167.33	0	40
187.5	0	40	187.39	0	40	
Interfaces filière/canal d'extrusion	5	18	22	4.94	18	22
	10	18	22	9.94	18	22
	15	18	22	15.09	18	22
	30	18	22	29.88	18	22
	50	18	22	50.02	18	22
	70	18	22	69.99	18	22
	90	18	22	89.98	18	22
	110	18	22	109.92	18	22
	130	18	22	129.96	18	22
	150	18	22	149.96	18	22
	170	18	22	169.99	18	22
190	18	22	189.71	18	22	
Sortie de filière	200	2.5	22.5	200	2.59	22.59
	200	7.5	27.5	200	7.58	27.53
	200	12.5	32.5	200	12.47	32.42
	200	17.5	37.5	200	17.41	37.41

10 Annexe : Loi de Student

	Seuil de risque α			Nb. DL	Seuil de risque α		
	0,05	0,01	0,001		0,05	0,01	0,001
Nb. DL	0,05	0,01	0,001	16	2,120	2,921	4,015
1	12,6	63,7	636,0	17	2,110	2,898	3,965
2	4,303	9,925	31,600	18	2,101	2,878	3,922
3	3,182	5,841	12,940	19	2,093	2,861	3,883
4	2,776	4,604	8,610	20	2,086	2,845	3,850
5	2,571	4,032	6,859	21	2,080	2,831	3,819
6	2,447	3,707	5,959	22	2,074	2,819	3,792
7	2,365	3,499	5,405	23	2,069	2,807	3,767
8	2,306	3,355	5,041	24	2,064	2,797	3,745
9	2,262	3,250	4,781	25	2,060	2,787	3,725
10	2,228	3,169	4,587	26	2,056	2,779	3,707
11	2,201	3,106	4,437	27	2,052	2,771	3,690
12	2,179	3,055	4,318	28	2,048	2,763	3,674
13	2,160	3,012	4,221	29	2,045	2,756	3,659
14	2,145	2,977	4,140	30	2,042	2,750	3,646
15	2,131	2,947	4,073	infini	1,960	2,576	3,291

11 Annexe : Pertes thermiques

<i>Traitement du rayonnement</i> :.....	187
<i>Traitement de la convection libre</i> :.....	187
<i>Problème de l'ailette</i>	189
<i>Problème de l'ailette bi-constituants ou bi-couches</i> :.....	191
<i>Filière</i>	192
<i>L'arrière de la filière (partie S₄):</i>	195
<i>Avant de la filière</i>	196
<i>Partie S3 : acier, juste recouvert d'une épaisseur de résine (19 mm de longueur, 40 de hauteur)</i>	197
<i>Partie S2 : la connectique</i>	198
<i>A₁</i>	199
<i>A₂</i>	199
<i>A₃</i>	199
<i>P_{sup}</i>	200
<i>P_{inf}</i>	200
<i>P_{At}</i>	201
<i>Bilan</i>	202
<i>Détermination des coefficients d'échange pour l'intégration dans les termes sources volumiques d'Aquilon</i>	203

L'objectif de cette étude est la quantification des pertes thermiques lors de l'extrusion. Cette quantification doit se faire par le calcul de coefficients d'échange volumiques, intégrés comme des termes sources dans Aquilon. Nous postulons au cours de cette étude que ces échanges thermiques se font par rayonnement et par convection. De plus, nous considérerons tous les blocs apposés à la filière comme des ailettes.

Traitement du rayonnement :

Le flux de rayonnement d'un matériau est fonction de son émissivité ε , de la température des parois de ce matériau (T_p) ainsi que de la température des matériaux de l'environnement (T_{env}). Il s'exprime par la formule suivante :

$$\Phi^{ray} = \sigma \cdot \varepsilon \cdot S \cdot (T_p^4 - T_{env}^4)$$

où σ est la constante de Stefan-Boltzman (qui vaut $5.675 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$).

Notre objectif étant d'obtenir un coefficient d'échange équivalent, nous le traduirons par une relation classique du type :

$$\Phi_{eq}^{ray} = h_{eq}^{ray} \cdot S \cdot (T_p - T_{env})$$

On déduit de ces deux relations l'expression de notre coefficient d'échange équivalent :

$$h_{eq}^{ray} = \sigma \cdot \varepsilon \cdot \frac{T_p^4 - T_{env}^4}{T_p - T_{env}}$$

Traitement de la convection libre :

Du livre d'Agassant page 176..., on tire les relations utiles à la détermination des coefficients d'échange correspondant à la convection libre. Ce coefficient d'échange est obtenu à partir du nombre de Nusselt, lui même fonction des nombres de Grashof et de Prandtl, ou bien du nombre de Rayleigh. Trois domaines successifs sont ainsi généralement observés :

- $Ra < 10^3$ à 10^5 : Nu varie lentement avec Ra. L'essentiel du transfert se fait par conduction.
- 10^3 à $10^5 < Ra < 10^7$ à 10^9 : $Nu \propto Ra^{1/4}$. Ecoulement du fluide laminaire.
- $Ra > 10^7$ à 10^9 : $Nu \propto Ra^{1/3}$. Ecoulement du fluide turbulent.

Les cas qui nous intéressent sont ceux des plaques verticales ou horizontales.

Plaque verticale :

La dimension caractéristique L est la hauteur de la plaque.

- $10^4 < Ra < 10^9 \rightarrow Nu = 0.59 Ra^{1/4}$
- $10^9 < Ra < 10^{12} \rightarrow Nu = 0.13 Ra^{1/3}$

Plaque horizontale :

La dimension caractéristique L est la petite dimension de la plaque dans le plan horizontal.

Pour le flux supérieur :

- $10^4 < Ra < 2 \times 10^7 \rightarrow Nu = 0.54 Ra^{1/4}$
- $2 \times 10^7 < Ra < 3 \times 10^{11} \rightarrow Nu = 0.14 Ra^{1/3}$

Pour le flux inférieur :

$$Nu = 0.27 Ra^{1/4}$$

A noter :

- Le flux de chaleur supérieur, favorisé par la poussée d'Archimède, est plus grand que le flux inférieur (deux fois plus grand en régime laminaire).
- Le flux supérieur devient turbulent pour un nombre de Rayleigh de 2×10^7 , alors que le flux inférieur ne l'est pas encore pour un nombre de Rayleigh de 3×10^{11} .

Rappelons maintenant la définition de ces différents nombres adimensionnels.

Le nombre de Grashof :

Il est lié à l'intensité des courants de convection provoqués par des gradients horizontaux de température. Si l'écart de température est ΔT sur une largeur L, ce nombre s'écrit :

$$Gr = \frac{g \cdot \alpha \cdot \Delta T \cdot L^3}{\nu^2}$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide $\left(\nu = \frac{\mu}{\rho} \right)$.

Le nombre de Prandtl :

Pour un fluide donné, c'est le rapport des diffusivités de la quantité de mouvement (c'est à dire la viscosité cinématique ν) et de la chaleur :

$$Pr = \frac{\nu}{a} = \frac{\eta \cdot C_p}{\lambda}$$

Le nombre de Rayleigh :

$$Ra = \frac{\rho \cdot g \cdot \alpha \cdot \Delta T \cdot L^3}{\eta \cdot a}$$

où $\alpha = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\rho}{dT}$, coefficient de dilatation du liquide, g est l'accélération de la pesanteur (9.81 m.s⁻²).

Rayleigh a par ailleurs montré que la convection libre apparaît lorsque $Ra > Ra_{critique} \simeq 1700$.

Le nombre de Nüsselt :

Nu représente approximativement le rapport entre la chaleur transférée réellement et celle qui le serait par conduction pure.

$$Nu = \frac{h_{conv} \cdot L}{\lambda}$$

Donc $h_{conv} = \frac{L \cdot Nu}{\lambda}$.

Or on a vu que Nu pouvait s'écrire de la forme $Nu = A \cdot Ra^B$.

D'où $h_{conv} = \frac{A \cdot L}{\lambda} \cdot Ra^B$.

Soit avec l'expression du nombre de Rayleigh :

$$h_{conv} = \frac{A \cdot L}{\lambda} \cdot \left(\frac{\rho \cdot g \cdot \alpha \cdot \Delta T \cdot L^3}{\eta \cdot a} \right)^B$$

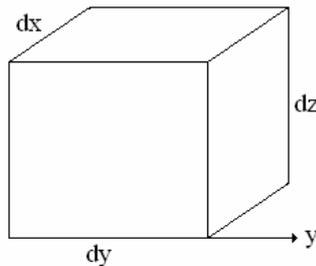
Pour conclure, le coefficient de transfert équivalent tenant compte du rayonnement sera donné par la somme :

$$h_{eq} = h_{eq}^{ray} + h_{conv}$$

Ce coefficient sera le coefficient d'échange équivalent pour l'ailette considérée. Rappelons à présent la résolution du problème de l'ailette.

Problème de l'ailette

Si on représente un volume élémentaire, on obtient la représentation suivante :



La conservation du flux s'écrit alors :

$$\lambda \cdot dx \cdot dz \cdot \left[\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y+dy} - \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_y \right] = h_{conv} \cdot (2 \cdot dx + 2 \cdot dz) \cdot dy \cdot (T(y) - T_\infty)$$

En intégrant selon x et z, on obtient alors :

$$\lambda \cdot S \cdot \left[\left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y+dy} - \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_y \right] = h_{conv} \cdot p \cdot dy \cdot (T(y) - T_\infty) \quad / \quad \begin{cases} p = 2 \cdot (L + h) \\ S = L \cdot h \end{cases}$$

soit

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{h_{conv} \cdot P}{\lambda \cdot S} \cdot (T(y) - T_\infty)$$

Dans le cas d'une ailette monocouche de longueur e , la fonction $T(y)$ est de la forme :

$$T(y) = A \cdot ch(\omega \cdot y) + B \cdot sh(\omega \cdot y) + T_\infty \quad / \quad \omega = \sqrt{\frac{h_{conv} \cdot P}{\lambda \cdot S}}$$

A cela, ajoutons les conditions limites :

$$\begin{cases} T(y=0) = T_0 \\ -\lambda \cdot S \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=e} = h \cdot S \cdot [T(y=e) - T_\infty] \end{cases} \quad \text{conservation du flux de chaleur en } y = e$$

De la première condition limite, on tire :

$$A = T_0 - T_\infty$$

De la seconde, on obtient :

$$\omega \cdot A \cdot sh(\omega \cdot e) + \omega \cdot B \cdot ch(\omega \cdot e) = -\frac{h}{\lambda} \cdot A \cdot ch(\omega \cdot e) - \frac{h}{\lambda} \cdot B \cdot sh(\omega \cdot e)$$

soit

$$B = -\frac{\omega \cdot sh(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot ch(\omega \cdot e)}{\omega \cdot ch(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot sh(\omega \cdot e)} A$$

$$B = -\frac{\omega \cdot sh(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot ch(\omega \cdot e)}{\omega \cdot ch(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot sh(\omega \cdot e)} \cdot (T_0 - T_\infty)$$

d'où

$$T(y) = (T_0 - T_\infty) \cdot \left[ch(\omega \cdot y) - \frac{\omega \cdot sh(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot ch(\omega \cdot e)}{\omega \cdot ch(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda} \cdot sh(\omega \cdot e)} \cdot sh(\omega \cdot y) \right] + T_\infty$$

Solution qu'on écrit traditionnellement sous la forme suivante :

$$\frac{T(y) - T_\infty}{T_0 - T_\infty} = \frac{ch(\omega \cdot (e - y)) + \frac{h}{\omega \cdot \lambda} \cdot ch(\omega \cdot (e - y))}{ch(\omega \cdot e) + \frac{h}{\omega \cdot \lambda} \cdot sh(\omega \cdot e)}$$

Le calcul du flux dissipé dans l'ailette se fait plus facilement en remarquant que c'est le même que celui transmis par la conduction à la base de l'ailette.

$$\varphi_{pertes} = -\lambda \cdot S \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=0}$$

$$\varphi_{pertes} = \omega \cdot \lambda \cdot S \cdot (T_0 - T_\infty) \frac{sh(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda \cdot \omega} \cdot ch(\omega \cdot e)}{ch(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda \cdot \omega} \cdot sh(\omega \cdot e)}$$

$$\varphi_{pertes} = \omega \cdot \lambda \cdot S \cdot (T_0 - T_\infty) \frac{th(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda \cdot \omega}}{1 + \frac{h}{\lambda \cdot \omega} \cdot th(\omega \cdot e)}$$

d'où la valeur de h_{conv} équivalent à cette ailette :

$$h_{conv}^{eq} = \omega \cdot \lambda \cdot \frac{th(\omega \cdot e) + \frac{h}{\lambda \cdot \omega}}{1 + \frac{h}{\lambda \cdot \omega} \cdot th(\omega \cdot e)}$$

Dans le cas de notre filière, les nombreuses ailettes sont constituées de deux matériaux, ce qui complique quelque peu la résolution.

Problème de l'ailette bi-constituants ou bi-couches :

L'équation à résoudre est alors :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{h_{conv} \cdot p}{\lambda_i \cdot S} \cdot (T(y) - T_\infty) \quad , \quad i \in [1;2]$$

La solution est alors continue par morceaux (continuité en l'interface résine/isolant) et présente la même forme générale, à savoir :

$$T(y) = A_i \cdot ch(\omega_i \cdot y) + B_i \cdot sh(\omega_i \cdot y) + T_\infty \quad / \quad \omega_i = \sqrt{\frac{h_{conv} \cdot p}{\lambda_i \cdot S}}$$

Si on appelle d , l'épaisseur de la couche de résine et e la longueur totale de l'ailette, les conditions limites sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1(y=0) = T_0 \\ T_2(d) = T_1(d) \quad \text{continuité entre les deux morceaux} \\ -\lambda \cdot S \cdot \left(\frac{\partial T_2}{\partial y} \right)_{y=e} = h \cdot S \cdot [T_2(y=e) - T_\infty] \quad \text{conservation du flux de chaleur en } y = e \end{array} \right.$$

La détermination des constantes se fait alors par la résolution du système suivant :

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 \\
 ch(\omega_1 \cdot d) & sh(\omega_1 \cdot d) & -ch(\omega_2 \cdot d) & -sh(\omega_2 \cdot d) \\
 -\lambda_1 \cdot \omega_1 \cdot sh(\omega_1 \cdot d) & -\lambda_1 \cdot \omega_1 \cdot ch(\omega_1 \cdot d) & -\lambda_2 \cdot \omega_2 \cdot sh(\omega_2 \cdot d) & -\lambda_2 \cdot \omega_2 \cdot ch(\omega_2 \cdot d) \\
 0 & 0 & -\lambda_2 \cdot \omega_2 \cdot sh(\omega_2 \cdot e) & -\lambda_2 \cdot \omega_2 \cdot ch(\omega_2 \cdot e) \\
 0 & 0 & -\frac{h}{S} \cdot ch(\omega_2 \cdot e) & -\frac{h}{S} \cdot sh(\omega_2 \cdot e)
 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} T_0 - T_\infty \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

La solution analytique est possible à obtenir mais extrêmement complexe. La résolution numérique est au contraire assez aisée à l'aide de Matlab par exemple. On obtient dès lors le flux de pertes par l'ailette avec l'expression suivante :

$$\varphi_{pertes} = \int_0^e h \cdot p \cdot (T(y) - T_\infty) dy + h \cdot S \cdot (T(y=e) - T_\infty)$$

On en déduit alors le coefficient d'échange équivalent :

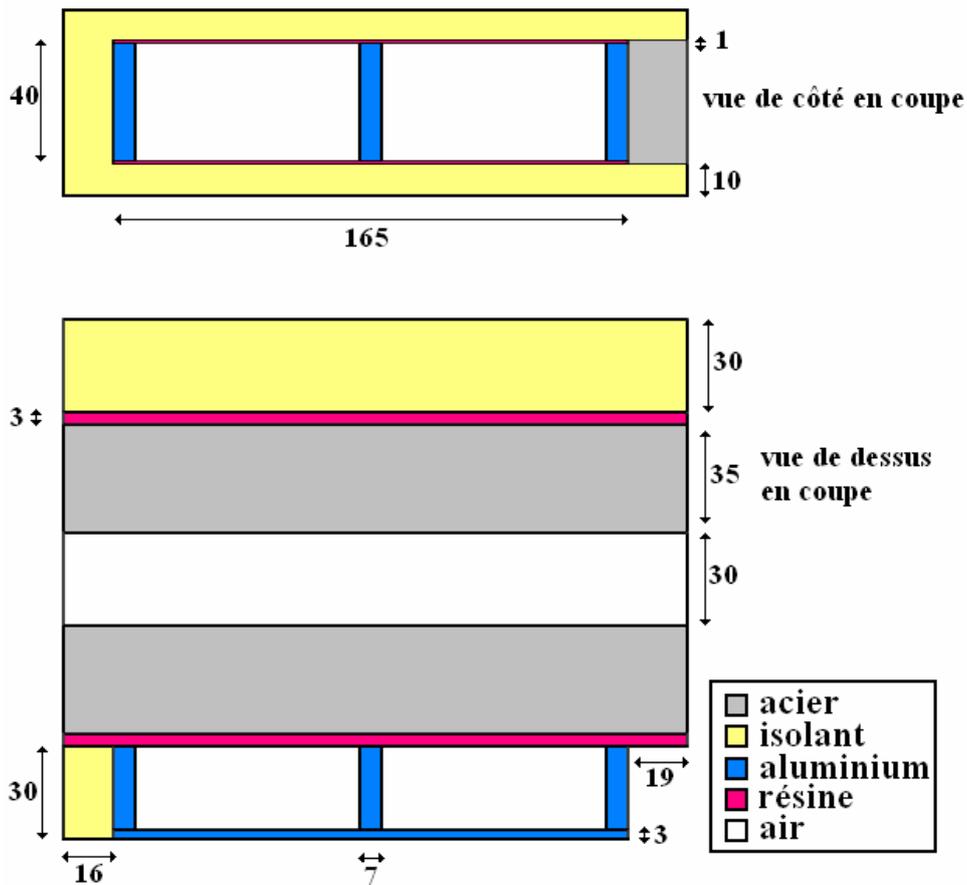
$$h_{conv}^{eq} = \frac{\varphi_{pertes}}{S \cdot (T_0 - T_\infty)}$$

Remarque :

Le périmètre p de l'ailette permet de calculer la surface d'échange de l'ailette. En conséquence, le périmètre est fonction des blocs qui entourent l'ailette. Ainsi si celle-ci a un bloc à sa droite et un bloc à sa gauche, son périmètre efficace ne vaut plus que deux fois sa longueur, les surfaces d'échange latérales n'étant plus utilisables pour le refroidissement.

Filière

Il est temps à présent de s'attaquer à la description de notre problème précis. Pour commencer, décrivons la filière et son isolation.

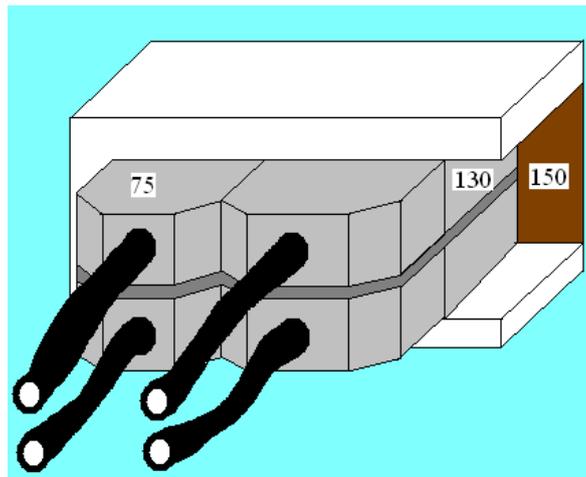
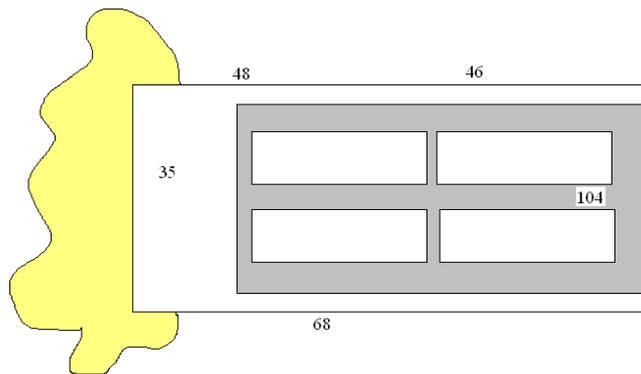
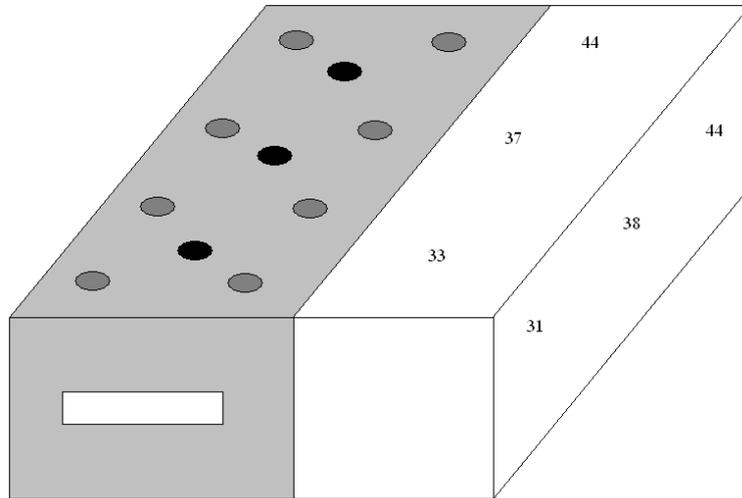


L'isolation de la filière d'extrusion est loin d'être homogène. La partie connectique revêt ainsi un aspect complexe avec plusieurs couches de nature différentes. Il convient donc de séparer en différentes zones les « ailettes » que nous allons considérer.

Pour l'étude et la recherche des coefficients d'échange correspondant aux pertes thermiques de notre système, nous ferons l'hypothèse d'une filière vide, dont la température de l'acier est homogène et égale à 200°C, alors que l'air ambiant et le reste de l'environnement est à une température de 20°C.

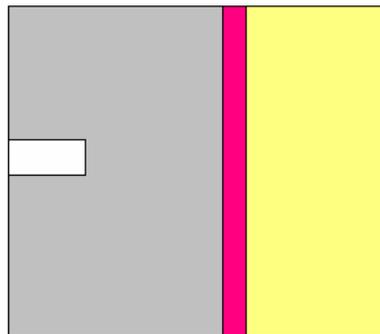
Commençons par traiter le cas simple du côté opposé aux connecteurs que nous nommerons l'arrière de la filière. Celui-ci est juste recouvert d'une couche de résine et d'une couche d'isolant.

Pour quelques applications numériques, nous nous appuyerons sur des mesures de température effectuées avec un thermocouple sur les parois des différents constituants de « l'isolation ». Ces mesures et leur localisation sont représentées sur les graphes suivants :



Ajoutons qu'elles ont été effectuées pour une température extérieure de 25 °C.

L'arrière de la filière (partie S₄):



Hypothèse H1 : l'ailette constituée par la résine et l'isolant ne draine de la chaleur que sur la moitié de la filière.

Hypothèse H2 : on considère en première approximation que la température en tout point de l'acier (y compris l'interface avec la résine) est de 200°C noté T_0 .

Hypothèse H3 : la température de l'interface résine/isolant est la même en tout point.

Ces hypothèses seront les mêmes pour chacun des cas envisagés.

Soit notre système constitué de la demi-filière (dans le sens de la largeur (direction y)), de la couche de résine et de la couche d'isolant. Nous nous intéressons ici à la température aux parois de notre ailette et considérerons uniquement la solution stationnaire. L'équilibre se fait donc entre la conduction et le flux de pertes.

Nous nous trouvons dans le cas de l'ailette bi-couches traité précédemment, et il ne reste plus qu'à appliquer la recette.

$$d = 4 \text{ mm}$$

$$e = 34 \text{ mm}$$

$$\lambda_1 = 0.3 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$\lambda_2 = 0.04 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$$

$$L = 200 \text{ mm}$$

$$h = 40 \text{ mm}$$

$$T_0 = 200 \text{ °C}$$

$$T_\infty = 20 \text{ °C}$$

Pour le calcul du h de convection avec l'air, il nous faut quelques calculs complémentaires à l'aide des formules citées plus haut.

Intéressons nous d'abord au nombre de Rayleigh. Compte tenu de la forme de l'ailette, nous tiendrons compte de la convection selon chacune des faces en contact avec l'air (soit 5 faces), en moyennant le h final par le rapport des aires.

$$Ra = \frac{\rho \cdot g \cdot \alpha \cdot \Delta T \cdot L^3}{\eta \cdot a}$$

Pour l'air, nous avons :

$$\rho = 0.92 \text{ kg.m}^{-3}$$

$$g = 9.81 \text{ m.s}^{-2}$$

$$\alpha = 2.8 \times 10^{-3}$$

$$\eta = 22 \times 10^{-6} \text{ Pa.s}$$

$$a = 3.23 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$C_p = 11.77 \text{ J.kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le choix du ΔT est un peu plus périlleux car il s'appuie non pas sur la différence entre T_0 et T_∞ mais entre la température aux parois de l'ailette et T_∞ . La température aux parois reste toutefois assez méconnue. Des mesures expérimentales avec un thermocouple semblent indiquer qu'elle se situe autour de 40°C (pour une température ambiante de 25°C). En appliquant la formule, on obtient alors :

$$\text{Convection verticale : } h = 7.02 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

$$\text{Convection horizontale sup : } h = 6.69 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

$$\text{Convection horizontale inf : } h = 3.34 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

$$\text{D'où } h_{\text{conv}} = 6.24 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

Ensuite l'ailette dissipe de la chaleur par convection et par rayonnement.

Pour le rayonnement, nous utiliserons les valeurs suivantes :

Emissivité $\varepsilon = 0.9$ (ordre de grandeur pour un isolant)

La température aux parois sera prise à 40°C .

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.9 \times \frac{(273 + 40)^4 - (273 + 25)^4}{(40 - 25)} = 5.8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le coefficient d'échange sera donc au final :

$$h = h_{\text{conv}} + h_{eq}^{ray} = 6.2 + 5.8 = 12.0 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le flux de pertes est alors de 11.0 W .

Avant de la filière

Partie S₁ : isolant (16 mm de longueur, 40 de hauteur).

Pas de grande différence entre cette zone et les pertes dues à l'arrière de la filière, puisqu'il s'agit du même matériau. Toutefois, les surfaces d'échange sont différentes et le volume de la filière correspondant au drain de chaleur est lui aussi différent.

Tout d'abord, une face est en contact avec le connecteur, ce qui modifie le rapport des aires d'échange en convection libre et donc la valeur du coefficient d'échange.

Convection verticale : $h = 7.02 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

Convection horizontale sup : $h = 6.69 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

Convection horizontale inf : $h = 3.34 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

Pas de modification jusqu'à présent mais la pondération de la convection verticale dans le calcul du h moyen diminue d'une surface latérale verticale ($h \times e$)

D'où $h_{\text{conv}} = 6.06 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$

Le coefficient d'échange par rayonnement ne change pas et on a donc :

$$h = h_{\text{conv}} + h_{\text{eq}}^{\text{ray}} = 6.06 + 5.8 = 11.9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour le calcul du flux dissipé par l'ailette, il faut tenir compte de la diminution du périmètre effectif dans le calcul. En effet, la surface d'échange avec la filière est toujours de $16 \times 40 \text{ mm}^2$, mais le périmètre d'échange est réduit d'une hauteur (correspondant à la face verticale en contact avec le connecteur) et vaut donc $2 \times 16 + 40 \text{ mm}$.

Le flux de pertes est alors de 1.3 W.

Partie S3 : acier, juste recouvert d'une épaisseur de résine (19 mm de longueur, 40 de hauteur).

Pour le calcul du coefficient de convection libre, nous nous situons cette fois-ci clairement dans le cas d'une plaque verticale. Les paramètres pour l'air ne changent pas. Mais l'écart de température est cette fois-ci beaucoup plus important, puisque d'après nos hypothèses, la température du métal est de 200°C , donc à la paroi de notre ailette, elle doit être autour de 190°C et on obtient donc :

$$h_{\text{conv}} = 12.78 \text{ W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

Du point de vue du rayonnement, l'aluminium étant oxydé, on prendra également une émissivité de 0.9.

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.9 \times \frac{(273+190)^4 - (273+20)^4}{(190-20)} = 11.6 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$h = h_{conv} + h_{eq}^{ray} = 12.8 + 11.6 = 24.4 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le flux de pertes est alors obtenu par le calcul suivant :

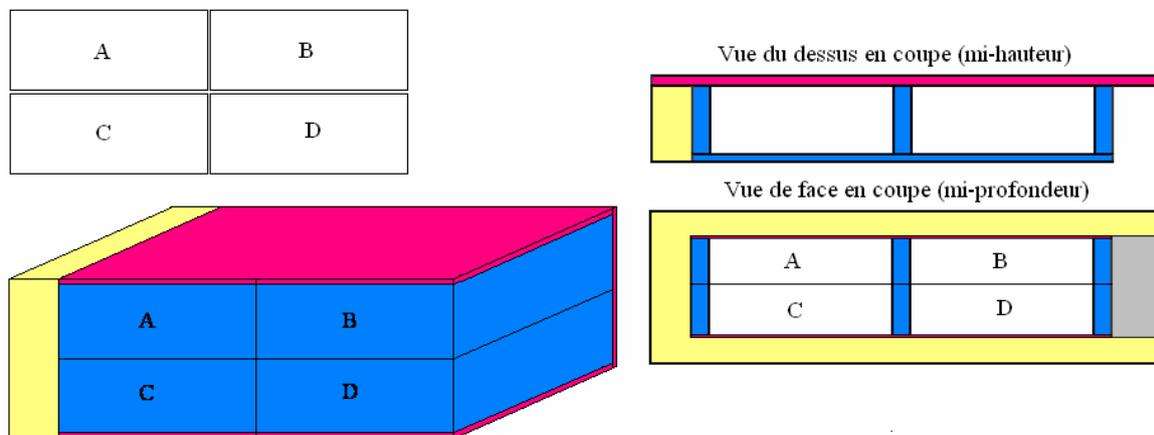
$$\varphi_{pertes} = h \cdot S \cdot (T_0 - T_\infty) = 24.4 \times 40 \times 10^{-3} \times 19 \times 10^{-3} \times (200 - 20) = 3.3 \text{ W}$$

(si on fait un calcul d'ailette, avec un périmètre égal à une hauteur, on trouve un flux de 3.1 W).

Partie S2 : la connectique

La connectique est la partie la plus difficile à modéliser en raison notamment de son hétérogénéité. Nous ferons l'hypothèse que les quatre blocs de la connectique n'en forment en fait qu'un seul.

Le schéma ci-dessous tente de montrer les différentes parties de la connectique. D'abord il y a la plaque de résine entre la filière et le reste des connecteurs. Puis trois blocs d'aluminium en bleu qui soutiennent la connectique. Deux plaques de résine (en haut et en bas) isolent le « bloc ». Une plaque d'aluminium verticale relie les trois petits blocs. Entre ces parallélépipèdes se tiennent les fils relatifs aux thermocouples. L'espace qui les entoure est rempli d'air (en blanc sur le schéma).



Nous ne tiendrons pas compte de la séparation horizontale entre les blocs supérieurs et inférieurs. Nous considérerons les 3 blocs internes d'aluminium et les noterons A_1 , A_2 et A_3 . Les plaques de résine supérieure et inférieure seront notées P_{sup} et P_{inf} , tandis que la plaque verticale d'aluminium sera nommée P_{Al} . La plaque verticale de résine sera intégrée dans le calcul des ailettes constituées par A_1 , A_2 et A_3 .

Notre hypothèse sur les flux de chaleur est que ceux-ci sont concentrés sur A_1 , A_2 et A_3 , puis dissipés dans les plaques P_{sup} , P_{inf} , P_{Al} ainsi que par convection sur la face non isolée de A_3 . Nous ferons l'hypothèse supplémentaire que le flux dissipé à travers P_{sup} , P_{inf} , P_{Al} provient de

façon également répartie entre chacun des blocs A_1 , A_2 et A_3 . Ainsi A_1 est responsable d'1/3 du flux dissipé par P_{sup} .

A l'intérieur des blocs, nous supposons que l'air est immobile et négligeons donc la convection libre dans ces espaces clos. De plus, la température y étant à peu près homogène, nous y négligerons également le rayonnement.

A_1

A_1 est une ailette de 7mm de large, 34 mm de long (dont les 4 mm de résine) et 40 mm de haut. Le flux qui la traverse est donné par la somme suivante :

$$\varphi_{A1} = \frac{1}{3}\varphi_{P_{sup}} + \frac{1}{3}\varphi_{P_{inf}} + \frac{1}{3}\varphi_{PAI}$$

Sa surface d'échange avec la filière est de $7 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \text{ m}^2$.

A_2

Idem que A_1

A_3

A_3 dissipe également une partie de sa chaleur en agissant comme une ailette de périmètre 40 mm (la hauteur de la face en contact avec l'air).

$$\varphi_{A3} = \frac{1}{3}\varphi_{P_{sup}} + \frac{1}{3}\varphi_{P_{inf}} + \frac{1}{3}\varphi_{PAI} + \varphi_{ailette}$$

Commençons par calculer le flux qu'elle dissipe de façon spécifique.

La plaque est purement verticale et le coefficient d'échange de convection est donc :
 $h_{conv} = 12.78 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$

Concernant le rayonnement, l'émissivité est réduite à 0.3, car il s'agit d'aluminium peu oxydé. Pour le ΔT , nous prendrons une température de paroi de 130°C pour une température ambiante de 25°C (valeurs approximatives déterminées expérimentalement avec un thermocouple). Le coefficient d'échange par le rayonnement ainsi obtenu est :

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.3 \times \frac{(273 + 130)^4 - (273 + 20)^4}{(130 - 25)} = 3.0 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

D'où le coefficient d'échange pour l'ailette :

$$h = h_{conv} + h_{eq}^{ray} = 12.8 + 3.0 = 15.8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

A noter que la conductivité de l'aluminium est de $165 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$.
Le flux de pertes est alors de 2.2 W.

Il reste maintenant à calculer les flux dissipés par les ailettes P_{sup} , P_{inf} , P_{Al} .

P_{sup}

Au-dessus de cette plaque, se trouve une couche de 10 mm d'isolant. Par conséquent, ses échanges avec l'air par convection libre se font selon ses faces verticales, et la face horizontale de l'isolant. La plaque de résine a une longueur de 165 mm, une hauteur de 1 mm et une épaisseur de 30 cm. Mais il faut ajouter les 10 mm d'isolant et constituer une ailette bi-couche.

En nous appuyant sur des mesures avec un thermocouple, nous prendrons une température de paroi (en surface de l'isolant) autour de 50°C pour une température ambiante de 20°C .

Pour les 2 faces verticales ($165 \times 10^{-3} \times (10+1) \times 10^{-3} + 30 \times 10^{-3} \times (10+1) \times 10^{-3} \text{ m}^2$)

$$h_{conv} = 11.01 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour la face horizontale supérieure ($165 \times 10^{-3} \times 30 \times 10^{-3} \text{ m}^2$)

$$h_{conv} = 7.84 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Ce qui donne un coefficient moyen d'échange par convection de

$$h_{conv} = 9.67 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour le rayonnement, on considérera une émissivité de 0.9.

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.9 \times \frac{(273 + 500)^4 - (273 + 25)^4}{(50 - 25)} = 6.1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$h = h_{conv} + h_{eq}^{ray} = 9.7 + 6.1 = 15.8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le flux trouvé est alors

$$\varphi_{P_{sup}} = 2.1 \text{ W}$$

Notons pour ce calcul que la surface S d'où provient le flux dissipé par l'ailette est de $3 \times 7 \times 10^{-3} \times 30 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ (faces de A_1 , A_2 et A_3 en contact avec P_{sup}). Quant au périmètre considéré, il vaut $165 \times 10^{-3} + 30 \times 10^{-3} \text{ m}$ car les autres faces sont en contact avec l'isolant ou la filière elle-même.

P_{inf}

Raisonnement symétrique de P_{sup} , sauf que cette fois-ci, nous considérons la convection dessous une plaque plane.

Pour les 2 faces verticales ($165 \times 10^{-3} \times (10+1) \times 10^{-3} + 30 \times 10^{-3} \times (10+1) \times 10^{-3} \text{ m}^2$)

$$h_{conv} = 11.01 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour la face horizontale inférieure ($165 \times 10^{-3} \times 30 \times 10^{-3} \text{ m}^2$)

$$h_{conv} = 3.92 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Ce qui donne un coefficient moyen d'échange par convection de

$$h_{conv} = 8.01 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour le rayonnement, on considérera une émissivité de 0.9.

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.9 \times \frac{(273 + 50)^4 - (273 + 25)^4}{(50 - 25)} = 6.1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$h = h_{conv} + h_{eq}^{ray} = 8.0 + 6.1 = 14.1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Le flux trouvé est alors

$$\varphi_{P_{inf}} = 2.0 \text{ W}$$

P_{AI}

La plaque d'aluminium est verticale donc le coefficient de convection sera issu du modèle vertical, sans pondération. Expérimentalement, il a été observé une température de paroi aux alentours de 100°C pour une température ambiante de 25°C.

La surface considérée fait $165 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \text{ m}^2$.

$$h_{conv} = 10.50 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

Pour le rayonnement, on considérera une émissivité de 0.5 (l'aluminium de la plaque est beaucoup plus oxydé que sur les bords)

$$h_{eq}^{ray} = 5.675 \times 10^{-8} \times 0.5 \times \frac{(273 + 100)^4 - (273 + 25)^4}{(100 - 25)} = 4.3 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$h = h_{conv} + h_{eq}^{ray} = 10.5 + 4.3 = 14.8 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\text{d'où } \varphi_{PAI} = 5.2 \text{ W}$$

Notons pour ce calcul que la surface S d'où provient le flux dissipé par l'ailette est de $3 \times 7 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \text{ m}^2$ (faces de A_1 , A_2 et A_3 en contact avec P_{sup}). Quant au périmètre considéré, il vaut $(2 \times 165 + 40) \times 10^{-3} \text{ m}$ car les autres faces sont en contact avec l'isolant ou la filière elle-même.

Ce flux est un peu faible par rapport à cette partie assez critique de l'isolation. En réalité, les connecteurs sont branchés dans le bloc S2 et prolongent l'ailette constituée par la plaque d'aluminium de 30 mm. Si on ajoute cette longueur, et qu'on réduit la conductivité à 5 au lieu de 165 (car on n'est plus dans un bloc homogène d'aluminium), on trouve alors un flux de perte :

$$\varphi_{\text{connecteurs}} = 27.3W$$

NB : la température des connecteurs (70 à 80°C) montrent qu'ils ne sont pas du tout négligeables dans leur rôle de dissipation.

Bilan

Si on représente maintenant les flux de perte dans le système, on a :

S4				
11				
S1	S2			S3
1.3	P_{sup}	P_{inf}	P_{Al}	Ailette A4
	2.1	2.0	27.3	2.3
				3.3

Soit une somme de 49.3 W

Sachant par ailleurs que les chaufferettes perdent directement :

$$\varphi_{\text{pertes}}^{\text{chauff sup\&inf}} = 2 \times (250 \times 10^{-3} \times 100 \times 10^{-3}) \times 13 \times (200 - 20) = 117W$$

$$\varphi_{\text{pertes}}^{\text{chauff sortie}} = (100 \times 10^{-3} \times 60 \times 10^{-3}) \times 18.5 \times (200 - 25) = 20.0W$$

13 et 18.5 sont les coefficients d'échange équivalents. La hauteur de 60 mm vient du fait que la chaufferette de sortie est plus grande que la filière à proprement parler : le bloc final filière + régulation mesure 60 mm de haut. De même les chaufferettes supérieures et inférieures s'étendent sur 250 mm de long.

Soit en tout 186.3 W.

Il se trouve que le relevé des tensions et intensités débitées par les alimentations des régulateurs donnent un flux total de 187 W (moins de 1% d'écart).

On peut donc être assez satisfait de ce résultat.

D'après l'analyse précédente, on en déduit les flux dissipés par A₁, A₂ et A₃.

$$\varphi_{A1} = \frac{1}{3} \varphi_{P_{\text{sup}}} + \frac{1}{3} \varphi_{P_{\text{inf}}} + \frac{1}{3} \varphi_{PAI}$$

$$\varphi_{A1} = \frac{2.1}{3} + \frac{2.0}{3} + \frac{27.3}{3}$$

$$\varphi_{A1} = 10.5W$$

De même,

$$\varphi_{A2} = 10.5W$$

Pour A₃,

$$\varphi_{A3} = \varphi_{A1} + \varphi_{ailette}$$

$$\varphi_{A3} = 10.5 + 2.3$$

$$\varphi_{A3} = 12.8W$$

Détermination des coefficients d'échange pour l'intégration dans les termes sources volumiques d'Aquilon

Tout le problème provient de la détermination des volumes dont sont drainés les flux de chaleurs dissipés par les ailettes.

De plus, les 50 cm qui précèdent la filière sont vraisemblablement à prendre en compte dans les flux de chaleur dissipés.

Pour la face arrière, le coefficient d'échange volumique est obtenu en divisant le flux de perte par le demi-volume de la filière. Ce qui donne :

$$h_{S4} = \frac{11}{200 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 153$$

Pour la partie S₁, isolant face avant, le volume associé est le volume correspondant à la surface de l'isolant, pour une profondeur égale à la demi-largeur de la filière.

$$h_{S1} = \frac{1.3}{16 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 225$$

Pour la partie S₃, (plaque de résine seule) face avant,.

$$h_{S3} = \frac{3.3}{\left(\frac{165}{2} + 19\right) \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 90$$

Pour la partie A₁,

$$h_{A1} = \frac{10.5}{\left(16 + \frac{165}{2}\right) \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 296$$

Pour la partie A₂,

$$h_{A2} = \frac{10.5}{\frac{165}{2} \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 354$$

Pour la partie A₃,

$$h_{A3} = \frac{12.8}{\left(\frac{165}{2} + 19\right) \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 350$$

Du coup, si on calcule sur les 4 zones :

Entrée / isolant	Connecteurs A & C	Connecteurs B & D	Sortie
153+225+296 =674	153+296+354 =803	153+354+350 =857	153+350+90 =593

En ajoutant les 50 cm du début (ce qui augmente les flux en S₁ et S₄), on obtient :

Pour la face arrière, le coefficient d'échange volumique est obtenu en divisant le flux de perte par le demi-volume de la filière. Ce qui donne :

$$h_{S4} = \frac{13.5}{200 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 150$$

Pour la partie S₁, isolant face avant, le volume associé est le volume correspondant à la surface de l'isolant, pour une profondeur égale à la demi-largeur de la filière.

$$h_{S1} = \frac{3.8}{16 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 160$$

Entrée / isolant	Connecteurs A & C	Connecteurs B & D	Sortie
150+160+296 =606	150+296+354 =800	150+354+350+90 =944	150+350+90 =590

Si on réduit le volume de drain de S₃,

$$h_{s3} = \frac{3.3}{19 \times 10^{-3} \times 40 \times 10^{-3} \times 50 \times 10^{-3} \times (200 - 20)} = 483$$

Entrée / isolant	Connecteurs A & C	Connecteurs B & D	Sortie
150+160+296 =606	150+296+354 =800	150+354+350 =854	150+350+483 =983

On sent au vu de ces résultats que les zones de recouvrement d'influence des ailettes est problématique. L'entrée a manifestement beaucoup trop de pertes et l'influence de la partie S_3 s'étend certainement un peu plus loin qu'au volume correspondant à sa surface d'échange. De même, le recouvrement des zones de connecteurs n'est pas forcément la méthode la plus appropriée qui soit pour évaluer correctement les fuites.

Estimation de la rhéologie d'un polymère dans une filière d'extrusion Simulation d'écoulement avec transferts thermiques et Inversion de mesures

Résumé

L'objectif de cette thèse est la mise en place d'une méthode d'estimation de rhéologie à partir de mesures de débits et de températures. Le dispositif expérimental est une filière d'extrusion instrumentée, déjà utilisée pour déterminer le profil thermique en entrée de la filière. Arguant du fait que les nombreux modèles rhéologiques existants sont différemment adaptés en fonction des polymères considérés, nous avons opté pour un modèle original de rhéologie. Ce modèle, outre le fait de ne pas avoir de forme mathématique imposée, n'a que des paramètres du même ordre de grandeur, ce qui simplifie l'estimation de mesures par méthode inverse. La méthode inverse est une méthode de minimisation appliquée à un critère d'écart quadratique entre les variables calculées et les grandeurs mesurées, sous la contrainte des équations de l'énergie et de Navier-Stokes. Elle s'appuie sur la formulation du Lagrangien. Les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes sont calculés par la résolution des équations adjointes. Un problème de sensibilité complémentaire permet la détermination de la profondeur de descente. La décroissance de la viscosité lorsque le taux de cisaillement augmente, a été prise en compte dans la régularisation. Pour finir, la méthode inverse a été insérée dans le code volumes finis Aquilon, développé au laboratoire TREFLE.

En définitive, sur une filière mieux isolée, la méthode développée permet d'obtenir une connaissance du comportement rhéologique précise, sans l'hypothèse d'isothermie habituellement faite pour les mesures rhéologiques expérimentales. Elle génère un modèle rhéologique adapté au code de simulation numérique du point de vue de l'écoulement et de la thermique. Enfin elle ouvre le chemin pour de nombreuses applications notamment dans le domaine de l'injection.

Mots-Clefs :

Écoulement, Filière d'extrusion, Méthode de l'adjoint, Polymère, Problème inverse, Rhéologie, Transferts thermiques

Abstract

The aim of this study is the development of a method of rheological estimation from temperature and flow measurements. An instrumented extrusion die, which was built in order to estimate inlet thermal profile, is used to obtain experimental data. Although numerous rheological models exist, no one describes each polymer rheological behavior. That is the reason why an original table-like model has been chosen. This model presents two major advantages: it has no imposed mathematical form and each parameter has the same order of magnitude. The inverse method is a minimization method of a criterion, which is the quadratic norm of the difference between calculated values of flow and temperatures and experimental ones. The minimization is done under the energy and Navier-Stokes equations constraints. The minimization climbs on the Lagrangian formula. Lagrangian factors are calculated thanks to the adjoint equations. A sensitivity problem allows to determine the descent depth. The decrease of the viscosity when shear rate increases, is taken in account into regularization. Eventually the inverse method is programmed into the finite volume code AQUILON, which is developed in TREFLE laboratory.

To conclude, with a best insulated die, the developed method allows to obtain an accurate knowledge of the rheological behavior, without usual hypothesis of isotherm polymer. The method calculates a rheological model adapted to the numerical simulation code, giving good agreement with experiment for flow and thermal phenomena. In this way, it opens a large door to numerous applications, as for example in injection field.

Key words :

Adjoint method, Extrusion die, Flow, Inverse problem, Polymer, Rheology, Thermal transfers