



HAL
open science

Identification des paramètres rhéologique à l'aide d'une méthode d'optimisation appliquée à l'extrusion en 3D

Nadhir Lebaal, Fabrice Schmidt, Stephan Puissant

► To cite this version:

Nadhir Lebaal, Fabrice Schmidt, Stephan Puissant. Identification des paramètres rhéologique à l'aide d'une méthode d'optimisation appliquée à l'extrusion en 3D. 17e Congrès Français de Mécanique, Aug 2005, Troyes, France. hal-01798901

HAL Id: hal-01798901

<https://hal.science/hal-01798901>

Submitted on 5 Mar 2019

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

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



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Identification des paramètres rhéologique à l'aide d'une méthode d'optimisation appliquée à l'extrusion en 3D

Nadhir Lebaal^a, Fabrice Schmidt^a, Stephan Puissant^b

^aEcole des mines d'Albi-Carmaux (ENSTIMAC)
Campus Jarlard 81013 ALBI CT Cedex 09

^bInstitut Supérieur d'Ingénierie de la Conception (GIP-InSIC)
27, rue d'Hélicule, 88100 Saint-Dié-des-Vosges.

Résumé :

La viscosité est une propriété très importante pour caractériser la rhéologie des polymères fondus. Une filière plate a été développée chez Maillefer, pour faire des caractérisations rhéologiques. Notre objectif est d'appliquer une méthode d'optimisation suffisamment robuste pour identifier les paramètres rhéologiques à partir des mesures de pressions obtenues dans cette filière. Ainsi, on minimise l'écart entre les pressions calculées par un logiciel de calcul en 3D et les pressions mesurées en faisant varier les 3 paramètres (K , m et β) pour une loi puissance avec une thermodépendance de type Arrhenius.

Abstract :

Viscosity is an important characteristic of flow property's and processability for polymeric materials. A flat die was developed by Maillefer-extrusion, to make rheological characterizations. In this paper, the rheological parameters of the melt are identified through optimization by a response surface method. The objective is to minimize the differences between the measured pressure obtained in the flat die and the pressures computed by three dimensional finite element programme. An objective function is defined as the global relative error obtained through the differences between measured and computed pressures. This objective function is minimised by varying the rheological parameters. The rheological parameters permit to calculate the viscosity. Then we compare this calculated viscosity with an experimental viscosity measured on a capillary rheometer to validate this method.

Mots clefs : Rhéologie; Polymères; Filière plate; Extrusion; Optimisation; Surface de réponse.

1 Introduction

Les défauts d'extrusion (comme les lignes de soudure, la mauvaise répartition de matière, les problèmes de stagnation) sont influencés par la géométrie de la tête d'extrusion, les conditions opératoires (température de régulation, débit) et les paramètres rhéologiques des polymères mis en forme. Afin d'éliminer ces problèmes, on propose de déterminer une méthode d'optimisation suffisamment robuste pour être applicable en milieu industriel. Dans une première étape, afin de valider la méthode d'optimisation, nous allons identifier les paramètres rhéologiques de la matière plastique fondue à partir des points de mesure obtenus dans une filière plate. Malgré les nombreuses utilisations des matières plastiques, la connaissance et la maîtrise de leur comportement rhéologique restent un domaine de recherche ouvert. Des chercheurs ont essayé de caractériser les propriétés et le comportement de ces matériaux, à l'aide de plusieurs modèles de viscosité [1,2] comme le modèle loi Puissance, le modèle de Cross, le modèle de Carreau. Liang [3] a étudié la viscosité de matières plastiques dans l'écoulement régulier de cisaillement de plusieurs polymères en utilisant un rhéomètre capillaire. Geiger et Kuhnle [4] ont employé une corrélation empirique entre la densité, la pression et la température pour obtenir un modèle rhéologique et, à partir de ces 3 paramètres physiques, ils ont déterminé la viscosité du polymère.

Notre objectif est d'identifier le comportement rhéologique d'une matière plastique directement en série de production, sans employer des mesures conventionnelles sur des filières capillaires. Choissant une de ces

lois rhéologiques, nous identifions les paramètres rhéologiques qui permettent d'obtenir le minimum de l'erreur globale entre les pressions calculées en utilisant un logiciel de calcul en 3D par éléments finis et les pressions mesurées sur la filière plate. Nous utilisons un plan d'expérience composite [5] et un algorithme d'optimisation appelé la méthode de surface de réponse, avec une approximation diffuse [6, 7].

2 Mesures et données expérimentales

Les points expérimentaux sont obtenus sur une extrudeuse standard alimentée à différents débits avec une seule matière (LDPE) (Tableau 1). Une filière plate a été développée chez Maillefer Extrusion [8] (figure 1), équipées de 4 sondes de pression distantes de 100 mm. Seules les mesures des pressions d'entrée et de sortie sont prises en compte pour mesurer la perte de charge sur la longueur de la filière. Une première série d'essais a été réalisée à deux épaisseurs différentes en changeant la filière pour couvrir une gamme suffisante de taux de cisaillement pour faire des caractérisations rhéologiques.

Tableau 1.

Données expérimentales pour les deux épaisseurs (5mm et 10mm)

| Q [Kg/h] | T [K] | ΔP [bar] | ρ [Kg/m ³] | h [mm] |
|----------|-------|------------------|-----------------------------|--------|
| 11,2 | 439 | 53 | 779 | 5 |
| 60 | 448 | 99 | 779 | 5 |
| 143 | 465 | 125 | 773 | 5 |
| 239 | 483 | 138 | 767 | 5 |
| 10,9 | 458 | 12,7 | 779 | 10 |
| 69,2 | 468 | 26 | 772 | 10 |
| 189,5 | 483 | 34,3 | 761 | 10 |
| 339,5 | 502 | 36,7 | 755 | 10 |

Tableau 2.

Propriétés thermiques.

| | |
|-------------------------------------|-------|
| Chaleur spécifique C_p [J/Kg/°K] | 1900 |
| Conductivité thermique k [W/°C/m] | 0.115 |

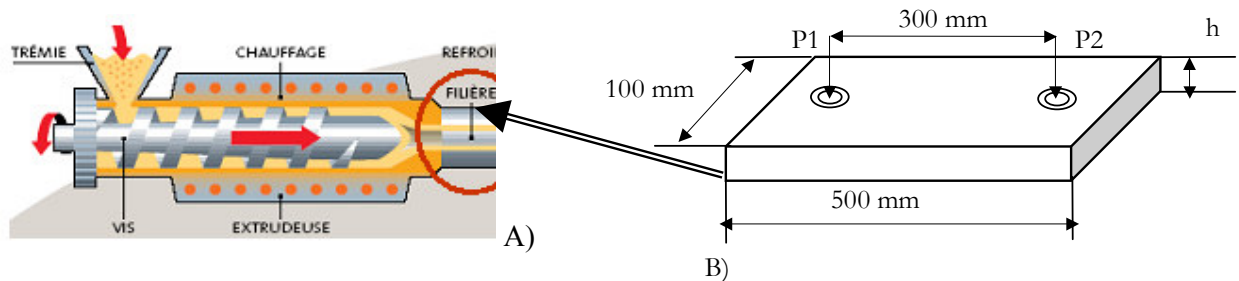


FIG. 1 – A) Principe de fonctionnement d'une extrudeuse [8], B) Géométrie de la filière.

3 Paramètres numériques de simulation

La mesure de la viscosité ne peut s'obtenir directement car le taux de cisaillement est inconnu de même que les trois paramètres pour la loi puissance. Par contre, trois grandeurs physiques liées à la viscosité telles que la pression, la température et le débit massique sont directement mesurables. On va utiliser un logiciel de calcul 3D par éléments finis REM3D® [9], qui permet de calculer les pressions à partir des débits, de la température, de la géométrie, tout en faisant varier les paramètres de la loi de rhéologie.

Le choix de cette géométrie a été fait en respectant le facteur de forme [10,11] qui représente le rapport entre l'épaisseur (h) et la largeur de la filière (W), ($\frac{h}{W} \leq 0.1$).

Tableau 3.

Nombres de nœud et d'éléments du maillage éléments finit.

| Nœuds | éléments | h [mm] |
|-------|----------|--------|
| 4110 | 18537 | 5 |
| 6892 | 33702 | 10 |

La température de la filière est Constante et égale à la température d'entrée.

4 Variable d'optimisation et fonction objectif

Une loi puissance avec une thermodépendance type Arrhenius est définie par l'équation suivante :

$$\eta = K_0 e^{\beta \left(\frac{1}{T}\right)} \dot{\gamma}^{m-1} \quad (1)$$

Avec

η : viscosité du polymère Pa.s

$\dot{\gamma}$: taux de cisaillement.

K_0 et m sont la consistance et l'indice de pseudo-plasticité, et β représente le rapport de E/R , où E est l'énergie d'activation, et R la constante des gaz parfaits.

Le but de cette simulation est de déterminer les paramètres rhéologiques qui permettent d'obtenir des pressions (obtenues par calcul) proches des pressions mesurées. Pour cela, on va minimiser l'écart entre les pressions calculées et les pressions mesurées. Nous avons choisi comme variable d'optimisation la rhéologie du polymère qui se définit par K , m et β . La fonction objectif représente la valeur de la somme des écarts au carré des pressions pour chaque point de mesure

$$J = (\sum_{\text{npm}} ((p_{\text{exp}} - p_{\text{cal}}) / P_{\text{exp}})^2). \quad (2)$$

5 Procédure d'optimisation

5.1 Choix de l'Algorithme

L'algorithme d'optimisation doit être soigneusement choisi. Le premier critère pour le choix de cet algorithme est le temps de calcul, quand une analyse simple a besoin de plusieurs heures de temps CPU. Les méthodes non déterministes ou stochastiques telles que la méthode de Monte-Carlo et l'algorithme génétique [12] permettent d'obtenir le minimum global, mais elles ont besoin de beaucoup d'évaluations pour que les fonctions convergent, ce qui augmente le temps de calcul. Les méthodes de gradient [13, 14] telles que BFGS, SQP, exigent le calcul des gradients des fonctions, qui sont estimés par différence finis, ce qui prend du temps. Pour ces raisons, nous avons décidé du choix de la méthode de surface de réponse.

5.2 Méthode de surface de réponse

La méthode de surface de réponse consiste à construire une expression approchée \tilde{f} de la fonction coût à partir d'un nombre limité d'évaluations de la fonction réelle [4, 5]. L'ensemble k^0 des points d'évaluation \bar{x}^0 de départ est choisi de manière arbitraire à partir d'un plan d'expérience composite, et la fonction \tilde{f}^0 est construite en utilisant une méthode d'approximation à partir de $f(\bar{x}_i^0), i = 1, \dots, k^0$. La minimisation de \tilde{f}^0 donne une première approximation du minimum de f . Pour minimiser \tilde{f}^0 , on peut utiliser des méthodes faisant un grand nombre d'appels à la fonction, car l'évaluation fréquente de la fonction approchée ne pose pas de problèmes.

6 Approximation diffuse :

Dans cette section nous présentons l'approximation diffuse en 2D sur la base polynomiale quadratique :

$$\tilde{f}_i = c + H_i b + \frac{1}{2} H_i A H_i^T \quad (3)$$

Avec :

$$b(x_0, y_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \\ \frac{\partial \tilde{f}}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (4)$$

et

$$A(x_0, y_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial y^2} \end{bmatrix} \quad (5)$$

avec : $H = [x \ y]$

qui peut s'écrire :

$$\tilde{f}(x) = P(x) a^T(x) \quad (6)$$

Nous chercherons les coefficients a_i de l'approximation \tilde{f} de la fonction $f(x)$ avec des fonctions de base $P(x)$ et les valeurs de la fonction f sur une collection de points x_i « voisins » du point x .

Les coefficients $a(x)$ sont déterminés par minimisation de l'expression ci-dessous de la méthode des moindres carrés :

$$J(a) = \sum w_i (f_i - P(x)^T a(x))^2 = \frac{1}{2} (f - Pa)^T (f - Pa) \quad (7)$$

Où w_i sont des fonctions de pondération [6],

$$w_i(x, y) = \begin{cases} \frac{\exp(-(d_i/c)^2) - \exp(-(r/c)^2)}{1 - \exp(-(r/c)^2)} & d_i \leq r \\ 0 & d_i \geq r \end{cases} \quad (8)$$

d_i est la distance entre le point x et les autres points voisins x_i dans le domaine de rayon r et c représente le paramètre de dilatation $c = r/4$, $J(a)$ est l'erreur entre la fonction d'approximation et la fonction « réelle ». La minimisation de $J(a)$ donne $J'(a) = 0$.

Ainsi nous aurons :

$$a(x) = Q^{-1} B Z \quad (9)$$

avec $Q = P^T W P$ et $B = P^T W Q$

7 Surface de réponse globale

Le but de cette technique est de chercher le minimum global dans tout le domaine de recherche, en limitant les variables. Dans notre cas on a respectivement $400 \text{ Pa.s}^m < K < 20000 \text{ Pa.s}^m$, $0.2 < m < 1$ et $500 \text{ K} < \beta < 3000 \text{ K}$ pour les trois variables d'optimisation K , m , et β , ce qui représente l'ordre de grandeurs de la majorité des polymères. Dans un premier temps, nous construisons une grille globale de 31 points d'échantillonnage pour la première itération et nous construisons une première surface de réponse polynomiale quadratique globale (sur tout le domaine). Puis on diminue la zone de recherche par 2.

8 Résultats :

La figure 3 représente l'évolution de la fonction objectif en fonction du nombre d'itérations pendant le processus d'optimisation. La solution optimale, qui représente l'écart minimal entre les pressions calculées par REM3D et les pressions mesurées, est obtenue au bout de 12 itérations. La valeur de la fonction

objectif obtenue est $3.04 \cdot 10^{-2}$, avec $K=8563 \text{ Pa} \cdot \text{s}^m$, $m=0.444$ et $\beta=1521 \text{ K}$. Le temps CPU est de 31h13, sur une machine Pentium IV, 2.4 GHz, 1 Go Ram.

On remarque dans la figure (3) qu'à partir de la 6^{ème} itération la fonction objectif égale à $3.33 \cdot 10^{-2}$, avec $K= 8397 \text{ Pa} \cdot \text{s}^m$, $m= 0.4547$ et $\beta=1517 \text{ K}$. avec un temps CPU de 15h 25. Les résultats des pressions à l'itération 12 sont présentés dans le tableau ci après.

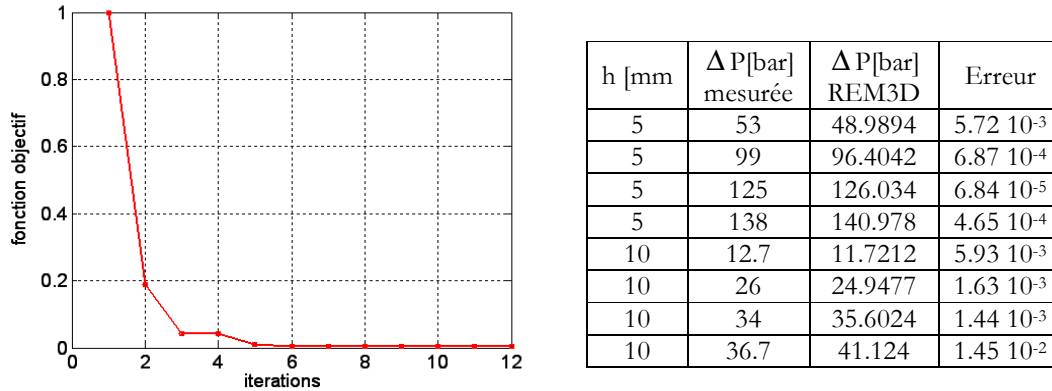


FIG. 3 – Evolution de la fonction objectif en fonction des itérations et résultats d'optimisation

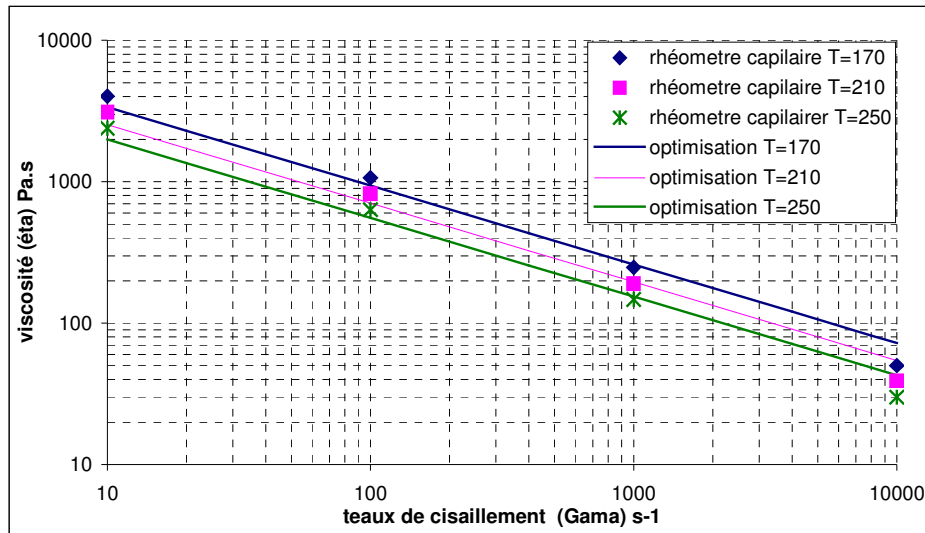


FIG. 4 – Courbe de viscosité donnée par rhéométrie capillaire et déterminée par optimisation.

On constate (fig.4) dans le graphe de viscosité obtenu par les coefficients de la loi de rhéologie que l'erreur est faible entre les points de mesures et les viscosités obtenues par la méthode d'optimisation, sauf dans la zone à fort taux de cisaillement, à cause de la non connaissance des températures d'entrées. Les mesures obtenues en utilisant le rhéomètre capillaire utilisent des simplifications, c'est-à-dire supposent que la température de sortie est égale à la température d'entrée. Par contre, à ce niveau de taux de cisaillement, le polymère se réchauffe et cette simplification n'est pas valable [15]. Dans notre simulation, on prend en compte l'auto échauffement, ce qui augmente la viscosité par rapport aux mesures faite à haut taux de cisaillement.

9 Conclusion :

Le fait d'obtenir de bons résultats par la méthode de surface de réponse nous permet de connaître la rhéologie d'une matière plastique directement en série de production. On ne sera pas obligé de faire des mesures sur des rhéomètres capillaires standard. Egalement, cette méthode nous permet d'identifier les paramètres rhéologiques en conditions industrielles, à partir de la vraie géométrie, même si cette géométrie est complexe, en utilisant des mesures de pression, des débits et des températures.

10 Perspective :

Ont va essayer d'utiliser une autre méthode d'interpolation pour bien approximer la surface de réponse globale on utilisant la méthode de Krigeage [16], qui permet de mieux représenter la fonction coût, et nous fera gagner du temps de calcul.

References

- [1] J. F. Agassant P. Avenas, J. PH. Sergent, P. J. Carreau, Polymer Processing. Principles and Modelling, Hanser Publishers, Minich, 1991.
- [2] C. Rauwendahl, Polymer Extrusion, 3rd Ed, Hanser Publishers, Munich, 1994.
- [3] J-Z Liang, Characteristics of melt shear viscosity during extrusion of polymers, Polymer Testing, Vol 21, pp. 307-311, 2002.
- [4] K. Geiger, H. Kuhnle, Analytische Berechnung einfacher Scherströmungen aufgrund eines Fließgesetzes vom Carreauschen Typ, Rheo Acta, Vol.23, pp. 355-367,1984.
- [5] J. Goupy, Plans d'expériences pour surfaces de réponse, Industries Techniques, Paris, 1999.
- [6] K. M. Liew, Y. Q. Huang, J. N. Reddy, Vibration analysis of symmetrically laminated plates based on FSDT using the moving least squares differential quadrature method, Comput. Methods Appl. Mech. Eng, Vol 192, pp. 2203-2222, 2003.
- [7] Y. Krongauz, T. Belytschko, Enforcement of essential boundary conditioned in mesh less approximations using finite elements, Comput. Methods Appl. Mech. Eng, Vol 131, pp. 133-145, 1996.
- [8] D. Schläfli, Filière rhéométriques théorie/filière plate, rapport interne, Nokia Maillefer, 1997.
- [9] REM3D, User's Manuals Version 2-2, Transvalor, 2004.
- [10] M. A. Huneault, P. G. Lafleur, P. J. Carreau, Evaluation of the FAN Technique for Profile Die Design, Intern Polym Proc, Vol. XI pp. 50-57, 1996.
- [11] S.J. Kim, T. H. Kwon, A Simple Approach to determining three-dimensional Screw Characteristics in the Metering Zone of Extrusion Processes Using a Total Shape Factor, Polym Eng Sci, Vol. 35, pp. 274-283, 1995.
- [12] J. M. Renders, Algorithmes génétiques et réseaux de neurones, Hermès, Paris, 1995.
- [13] J. L. Morales, A numerical study of limited memory BFGS methods, Appl Math Lett, pp. 481-487, 2002.
- [14] B. Horowitz, S. M. B. Afonso, Quadratic programming solver for structural optimisation using SQP algorithm, Adv Eng Soft, p 669-674, 2002.
- [15] P. Steeman, W. Zoetelief, H. Cao, Rheological properties of optical fiber coating resins at high shear rates, Intern Wire & Cable Symposium, pp. 532-535, 2004.
- [16] F. Trochu, P. Terriault, Nonlinear modelling of hysteretic material laws by dual kriging and application, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. Vol 151, pp. 545-558, 1998.