Université Toulouse III - Paul Sabatier

École Doctorale Matériaux Structure Mécanique

THÈSE

Présentée pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Toulouse III

Génie Mécanique

par Eliette MATHEY

Optimisation numérique du refroidissement des moules d'injection de thermoplastiques basée sur la simulation des transferts thermiques par la méthode des éléments frontières

Directeur de thèse : F. RONDÉ-OUSTAU

Soutenue le 17 décembre 2004 devant le jury composé de :

J-J. BARRAU	Université Paul Sabatier de Toulouse	Président
F. BERTRAND	École Polytechnique de Montréal	Rapporteur
R. DETERRE	Université de Nantes	Rapporteur
L. PENAZZI	École des Mines d'Albi	Examinateur
F. RONDÉ-OUSTAU	École des Mines d'Albi	Examinateur
F. SCHMIDT	École des Mines d'Albi	Examinateur
T. BURRET	Pôle Européen de Plasturgie d'Oyonnax	Invité

Remerciements

Cette thèse a été préparée au Centre de Recherche sur les Outillages Matériaux et Procédés de l'École des Mines d'Albi. Je tiens donc tout d'abord à remercier Christophe Levaillant, directeur à mon arrivée, et Gérard Bernhart, qui lui a succédé, de m'avoir accueillie dans leur laboratoire.

Je tiens à remercier Jean-Jacques Barrau de l'Université Paul Sabatier de Toulouse d'avoir accepté de présider le jury. Je souhaite remercier François Bertrand de l'École Polytechnique de Montréal et Rémi Deterre de l'Université de Nantes pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail et le sérieux apporté à leur rôle de rapporteurs. Je souhaiterais également exprimer ma reconnaissance à Thierry Burret du Pôle Européen de Plasturgie d'Oyonnax pour ses remarques en tant qu'ingénieur calcul confronté aux problèmes de conception de moules.

Je remercie François Rondé-Oustau pour avoir accepté la direction de ce travail de recherche. Je souhaite exprimer toute ma reconnaissance à Luc Penazzi et Fabrice Schmidt pour leur implication dans le suivi de ces recherches au quotidien et leur aide à les mener à terme.

Les essais expérimentaux de cette thèse n'auraient pas été possibles sans l'aide des techniciens du laboratoire. Je tiens donc à exprimer ma gratitude à Pierre Samuel et Fabrice Rossi pour leur aide précieuse lors de la préparation et de la réalisation des essais.

Je souhaite aussi remercier Salah Elsankari, stagiaire de l'Université Paul Sabatier, pour son travail de test et validation du logiciel.

Je tiens aussi à saluer et à remercier Ibrahim Busuladzic, ancien doctorant au laboratoire. Nos discussions à propos des éléments frontières et de la programmation se sont souvent révélées fructueuses. Ses remarques à propos de la première version du logiciel m'ont été très utiles pour les développements suivants.

Je salue tous les membres de l'École que j'ai pu croiser au cours de mes années de présence (plus de 7 en tout) et qui ont rendu ce séjour des plus agréables. Je salue tout particulièrement les anciens doctorants du CROMeP et souhaite une bonne continuation aux futurs docteurs.

Je souhaite enfin remercier ma famille et mes amis qui, malgré l'éloignement et mes visites très rares, m'ont soutenue et aidée à continuer dans les moments difficiles.

Table des matières

Introduction **9**

Nomenclature **11**

1 Problématique industrielle **17**
1.1 Le procédé d'injection des thermoplastiques . . . 17
1.1.1 Déroulement de l'injection . . . 17
1.1.2 Polymères injectés . . . 19
1.1.3 Suivi de l'injection sur un diagramme PVT . . . 21
1.2 Importance de la thermique lors de la production de pièces injectées . . . 22
1.2.1 Lien productivité - refroidissement . . . 22
1.2.2 Défauts d'injection pouvant avoir une origine thermique . . . 22
1.3 Les méthodes de fabrication des moules et leurs conséquences pour la régulation thermique . . . 25
1.3.1 Fabrication "traditionnelle" des moules . . . 25
1.3.2 Procédés d'outillage rapide appliqués à la fabrication des moules d'injection . . . 27
1.3.3 Conséquences pour la régulation thermique des moules d'injection . . . 29
1.4 Les méthodes de conception de la régulation thermique des moules . . . 31
1.4.1 Quelques règles qualitatives pour le positionnement des canaux de refroidissement . . . 33
1.4.2 Méthodes analytiques de conception des canaux de refroidissement . . . 34
1.4.3 Simulations numériques des transferts thermiques lors de l'injection . . . 38

2 Modélisation des transferts thermiques lors de l'injection des thermoplastiques **43**
2.1 Évolutions de la température dans le moule . . . 43
2.2 Modèle stationnaire . . . 44
2.2.1 Équation de la chaleur . . . 44
2.2.2 Conditions aux limites . . . 45
2.3 Modèle transitoire . . . 49
2.3.1 Équation de la chaleur . . . 49
2.3.2 Conditions aux limites . . . 53
2.3.3 Conditions initiales . . . 55

3 Calculs thermiques par la méthode des éléments frontières **57**
3.1 Méthode des éléments frontières appliquée à la résolution de l'équation de Laplace (problème de potentiel stationnaire) . . . 58
3.1.1 Équation intégrale frontière . . . 58
3.1.2 Discrétisation de la frontière . . . 60
3.1.3 Calcul des solutions sur la frontière du domaine . . . 61
3.1.4 Calcul des solutions à l'intérieur du domaine . . . 63
3.2 Méthodes des éléments frontières et de la réciprocité duale appliquées à la résolution de l'équation de Poisson (problème de potentiel transitoire) . . . 63

3.2.1 Différentes méthodes de résolution possible basées sur la méthode des éléments frontières 63
3.2.2 Méthode de la réciprocité duale . . . 66
3.2.3 Choix des paramètres de la méthode . . . 68
3.3 Prise en compte d'autres types de conditions aux limites . . . 69
3.3.1 Convection . . . 69
3.3.2 Calculs multidomaines et condition de contact thermique . . . 70
3.4 Implantation dans Matlab® . . . 76
3.5 Validations par comparaison à des solutions analytiques . . . 77
3.5.1 Calculs stationnaires . . . 77
3.5.2 Calculs transitoires . . . 83

4 Procédure d'optimisation du refroidissement des moules d'injection 93
4.1 Méthodes d'optimisation utilisées pour des problèmes de positionnement et dimensionnement de canaux de refroidissement . . . 93
4.2 Méthodes d'optimisation non linéaires sous contraintes . . . 94
4.3 Méthodes d'analyse de sensibilité . . . 99
4.3.1 Calcul par différences finies . . . 99
4.3.2 Calcul par différentiation directe . . . 100
4.3.3 Calcul par la méthode de l'état adjoint . . . 101
4.3.4 Comparaison des méthodes . . . 101
4.4 Algorithme de la procédure d'optimisation . . . 102
4.5 Description du problème d'optimisation . . . 104
4.5.1 Fonctions objectifs possibles . . . 104
4.5.2 Paramètres à optimiser . . . 107
4.5.3 Contraintes . . . 109
4.6 Choix de la méthode d'optimisation . . . 111
4.6.1 Étude du relief des fonctions à optimiser . . . 111
4.6.2 Algorithme SQP de Matlab® . . . 113
4.6.3 Propriétés de cet algorithme . . . 117
4.7 Choix et implantation des méthodes d'analyse de la sensibilité . . . 117
4.7.1 Calcul par différences finies . . . 118
4.7.2 Implantation de la méthode par différentiation . . . 118
4.7.3 Comparaisons des calculs de dérivées par différences finies et par différentiation . . . 121

5 Applications et validations expérimentales 127
5.1 Exemple d'application de l'optimisation avec un modèle stationnaire . . . 127
5.1.1 Modèle . . . 127
5.1.2 Paramètres de l'optimisation . . . 127
5.1.3 Comparaison des résultats de simulation dans les configurations initiales et finales . . . 129
5.1.4 Effet du maillage sur le résultat de l'optimisation . . . 131
5.1.5 Prise en compte d'un coefficient de convection variable . . . 132
5.1.6 Influence du point initial et de la forme des contraintes . . . 134
5.2 Exemple d'application de l'optimisation avec un modèle transitoire . . . 150
5.2.1 Définition du problème d'optimisation . . . 150
5.2.2 Modèle transitoire . . . 151
5.2.3 Résultats . . . 152
5.2.4 Comparaison aux résultats obtenus par un calcul stationnaire . . . 153
5.2.5 Comparaison des résultats . . . 153
5.3 Comparaison à des mesures expérimentales . . . 155
5.3.1 Essais expérimentaux . . . 155
5.3.2 Calcul numérique . . . 161

Conclusion **171**

Bibliographie **175**

Annexes **183**

A Récapitulatif des modèles thermiques utilisés **183**

B Principe du passage de l'équation intégrale frontière au système d'équations de la méthode des éléments frontières **185**

C Calcul des solutions à l'intérieur des domaines par la méthode des éléments frontières **191**

D Discrétisation de l'équation intégrale pour la méthode de la réciprocité duale **193**

E Méthodes d'optimisation non linéaires sous contraintes **197**
E.1 Optimisation par programmation mathématique 197
E.1.1 Méthodes d'optimisation non linéaire sans contraintes 197
E.1.2 Méthodes d'optimisation non linéaire sous contraintes non linéaires 200
E.2 Optimisation non linéaire sous contraintes par des méthodes non-déterministes 205
E.2.1 Méthode de Monte-Carlo 205
E.2.2 Méthode du recuit simulé 206
E.2.3 Algorithmes génétiques 206

F Surfaces de réponse des fonctions objectif **209**

G Dérivées des fonctions objectifs en fonction des paramètres **215**

H Calculs intermédiaires nécessaires aux calculs des dérivées des matrices H et G par rapport aux paramètres d'optimisation **217**

I Cartes de sensibilité de la température par rapport aux paramètres **219**

J Erreur maximale lors du calcul de la sensibilité de température par rapport aux paramètres d'optimisation par différences finies et différentiation **223**

K Plans de l'insert massif original **225**

L Données fournisseur de l'acier 40CMD8S **231**

M Données fournisseur de l'ABS Novodur® P2H-AT **235**

N Données constructeur des capteurs de température Kistler® **237**

O Données fournisseur de l'huile Marlotherm® **243**

Introduction

L'injection est aujourd'hui l'un des procédés les plus utilisés pour la mise en forme des polymères avec l'extrusion et le soufflage (30% des polymères transformés). Il est généralement utilisé pour la production de très grandes séries pour l'automobile ou l'électroménager par exemple ou pour des séries plus réduites en aéronautique. Le procédé d'injection permet d'obtenir une productivité élevée avec une très bonne reproductibilité des pièces.

Afin de limiter les rebuts et de diminuer les temps de cycle, le choix des paramètres d'injection est important. En particulier, une mauvaise distribution de température dans le moule peut être à l'origine de défauts sur les pièces ou entraîne une augmentation inacceptable du temps de cycle. Toutefois, la conception initiale du moule joue un grand rôle pour faciliter l'obtention de bonnes pièces avec un temps de cycle raisonnable.

La simulation numérique est de plus en plus utilisée dans l'industrie, aussi bien pour modéliser les écoulements que les transferts thermiques dans le moule. Des logiciels comme Moldflow® permettent en effet de déterminer des répartitions de température à la surface du moule et des temps de refroidissement. Même s'ils constituent une aide à la conception du moule, ces logiciels ne permettent qu'un calcul direct des solutions mais ne proposent pas d'axe d'amélioration des moules. La conception du moule et en particulier du système de refroidissement est donc basée sur l'expérience de l'utilisateur uniquement.

L'objectif de cette étude est double. Dans un premier temps, on cherche à simuler les transferts thermiques dans le moule lors de l'injection pour dans un second temps utiliser les résultats de simulation pour optimiser la géométrie du système de refroidissement. Ce travail permettra de faciliter la conception des canaux de refroidissement et ainsi d'éviter des retouches importantes sur le système de refroidissement lors de la mise au point du moule.

Une étude bibliographique réalisée au chapitre 1 montre que les simulations des transferts thermiques transitoires couplés dans le moule et le polymère ne sont jamais réalisées entièrement par la méthode des éléments frontières (en particulier dans le polymère). De même, les optimisations réalisées par éléments frontières sont toujours basées sur un modèle de transfert thermique stationnaire, les optimisations transitoires étant toujours réalisées à partir de calculs par éléments finis. La méthode des éléments frontières est pourtant bien adaptée à l'optimisation car les remaillages dus aux modifications de la géométrie sont plus facilement réalisées qu'avec la méthode des éléments finis. Le premier objectif est donc la programmation d'un logiciel de simulation des transferts thermiques (lors de la phase de refroidissement de l'injection) stationnaires par la méthode des éléments frontières et transitoires en combinant cette dernière à la méthode à la méthode de la réciprocité duale multi-domaines.

Le second objectif consiste à définir puis à résoudre le problème d'optimisation. Il est en effet nécessaire de définir les fonctions coûts relatives au refroidissement (distributions de température dans le moule et la pièce, temps de cycle) et les paramètres d'optimisation permettant de définir la géométrie (position et section des canaux) et le fluide de régulation (débit et température). Nous chercherons à déterminer les méthodes d'optimisation et d'analyse de la sensibilité adaptées à la résolution de ce problème non linéaire. De plus, lors de l'optimisation de

la géométrie des canaux de refroidissement, il est nécessaire de prendre en compte des contraintes pour limiter les positions possibles. Or, dans la littérature, elles apparaissent sous la forme de contraintes linéaires limitant très fortement les solutions et nécessitant des adaptations à chaque problème. Nous proposerons de tester différentes formes de contraintes sur les paramètres géométriques.

Ce mémoire est donc organisé de la façon suivante. Le premier chapitre présente la problématique industrielle liée à la thèse. Le principe du procédé d'injection et l'importance des phénomènes thermiques sont présentés. Les procédés de fabrication des moules et différentes technologies utilisées pour le refroidissement des moules sont évoquées. Enfin, les méthodes, analytiques et numériques, de conception des canaux de refroidissement couramment utilisées sont présentées.

Les modèles qui permettent de simuler les phénomènes thermiques dans le moule et le polymère au cours de l'injection sont présentés dans le chapitre 2. Deux modèles distincts ont été retenus pour cette étude. Le modèle stationnaire permet d'estimer rapidement la distribution moyenne de température dans le moule au cours d'un cycle. Le modèle transitoire donne accès aux évolutions de température dans le moule et la pièce polymère au cours d'un ou plusieurs cycles d'injection. Les hypothèses sur les comportements thermiques, les conditions aux limites et initiales utilisées sont détaillées également dans ce chapitre.

La méthode des éléments frontières utilisée dans cette étude pour la résolution des problèmes thermiques est présentée dans le chapitre 3. La formulation des équations de cette méthode dans le cas d'un problème thermique stationnaire linéaire est rappelée. De même, le principe de la méthode de la réciprocité duale utilisée pour résoudre les problèmes transitoires linéaires est détaillée. Ces deux méthodes sont adaptées à la résolution des modèles présentés dans le chapitre précédent pour prendre en compte des conditions aux limites mixtes et des conditions de contact entre plusieurs domaines. Enfin, les deux méthodes sont validées par résolution de problèmes simples dont les solutions analytiques sont connues.

Le chapitre 4 présente la procédure mise en place pour l'optimisation du refroidissement des moules d'injection. Une première partie traite du choix de la méthode d'optimisation et de la méthode d'analyse de la sensibilité. L'algorithme complet de la procédure est ensuite présenté de manière à détailler en particulier les objectifs, les paramètres et les contraintes qu'il est possible d'utiliser. Les détails de la méthode d'optimisation et de l'analyse de sensibilité adaptées à l'étude sont également présentés.

Enfin, le chapitre 5 propose des exemples d'applications de la démarche de conception (calcul thermique et optimisation) pour des cas stationnaires et transitoires. Ces exemples permettent en particulier d'étudier les effets du modèle de calcul (stationnaire ou transitoire, conditions aux limites), de l'objectif, des contraintes et des valeurs initiales des paramètres sur les résultats de l'optimisation. Des comparaisons des résultats numériques à des mesures expérimentales réalisées en condition de production avec un moule instrumenté sont présentées. Ces essais permettent principalement de valider la modélisation en régime transitoire et de comparer expérimentalement les effets de la géométrie des canaux de refroidissement sur les évolutions de température dans le moule.

Au final, l'application développée permet l'optimisation de la conception des canaux de refroidissement sur des sections 2D du moule. Cette optimisation est réalisée en se basant sur les répartitions de températures dans le moule et la pièce obtenues par une résolution des problèmes thermiques stationnaires ou transitoires réalisée par la méthode des éléments frontières.

Nomenclature

A, A_{eq}	Matrice de définition des contraintes linéaires inégalités et égalités
$\mathcal{A}$	Ensemble des contraintes saturées
Bi	Nombre de Biot
C	Matrice du second membre de la DRM
C_P	Capacité calorifique massique
C_{PF}	Capacité calorifique massique du réfrigérant
C_{PM}	Capacité calorifique massique du moule
C_{PP}	Capacité calorifique massique du polymère
D_C	Diamètre des canaux de refroidissement
D_F	Débit volumique du réfrigérant
F	Matrice des fonctions d'interpolation radiales
G	Matrice des solutions fondamentales en température
G_{ij}	Composante de la matrice G
H	Matrice des solutions fondamentales en gradient de température et des facteurs de formes c
$\hat{H}$	Matrice des solutions fondamentales en gradient de température
H_{ij}	Composante de la matrice H
I	Ensemble des indices des contraintes inégalités
J	Ensemble des indices des contraintes égalités
$\mathcal{H}$	Matrice Hessienne de la fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ d'un problème d'optimisation sous contraintes
J	Matrice Jacobienne de passage d'un élément réel à l'élément de référence
L_C	Longueur du canal
L_j	Longueur de l'élément j
$\mathcal{L}$	Fonction de Lagrange d'un problème d'optimisation sous contraintes
N_1, N_2	Fonctions d'interpolation linéaires
N_1^c, N_2^c	Fonctions d'interpolation linéaires continues
N_1^d, N_2^d	Fonctions d'interpolation linéaires discontinues
N_G	Nombre de points de Gauss pour l'intégration numérique

N_e	Nombre d'éléments
N_i	Nombre de points internes
N_n	Nombre de nœuds
Nu	Nombre de Nusselt
P	Pression dans le polymère
$\mathcal{P} = \{p_1\ p_2\ \dots\ p_p\}$	Vecteurs des paramètres d'optimisation
$\mathcal{P}^0$	Valeur initiale des paramètres d'optimisation
$\mathcal{P}^*$	Valeur optimale des paramètres d'optimisation
P_x, P_y	Coordonnées du centre des canaux de refroidissement
Pr	Nombre de Prandtl
Q_F	Quantité de chaleur absorbée par le réfrigérant
Q_P	Quantité de chaleur extraite du polymère pendant le refroidissement
Q_{solid}	Quantité de chaleur massique de solidification
R, R_1, R_2	Rayons des canaux de refroidissement
$\mathcal{R}$	Résistance thermique de contact entre deux domaines
$\mathcal{R}_{M/P}$	Résistance thermique de contact entre le moule et le polymère
$\mathcal{R}_{M_1/M_2}$	Résistance thermique de contact entre deux éléments du moule (par exemple au niveau du plan de joint)
Re	Nombre de Reynolds
T	Température
T^*	Solution fondamentale en température
$\hat{T}$	Solution particulière en température
$\dot{T}$	Dérivée temporelle de la température
T^n	Température au temps t^n
T^0	Température initiale (t=0)
T_F	Température du réfrigérant
T_M	Température à la surface du moule
T_{SC}	Température à la surface des canaux de refroidissement
T_{air}	Température de l'air ambiant
T_{ej}	Température d'éjection du polymère
T_{inj}	Température d'injection du polymère
T_j	Température du nœud j
T_{moy}	Température moyenne
T_{obj}	Température objectif
T_0	Température imposée sur une frontière
T_∞	Température du fluide lors d'un échange par convection

V	Volume
V_P	Volume de la pièce
$\mathcal{Y}, \mathcal{Z}$	Matrices intermédiaires pour la résolution du sous-problème quadratique de l'optimisation
a	Diffusivité
a_M	Diffusivité du moule
a_P	Diffusivité du polymère
b, b_{eq}	Vecteur du second membre des contraintes linéaires inégalités et égalités
c	Facteur de forme au point de collocation
d	Opposé de la projection de $\vec{r}$ sur la normale sortante $\vec{n}$ ($d = -\vec{r}.\vec{n}$)
d^k	Direction de progression à l'itération k de l'optimisation
$d^{k_{PQ}}$	Direction de progression à l'itération k_{PQ} de la résolution du sous-problème quadratique de l'optimisation
d_{cc}	Distance entre canaux
d_{sc}	Distance des canaux à la surface de la cavité
e_P	Épaisseur de la pièce
e_{air}	Épaisseur de la lame d'air entre le moule et le polymère
f_1, f_2	Distances des nœuds aux extrémités d'un élément discontinu
f	Fonction d'interpolation radiale
$g(\mathcal{P})$	Fonction contrainte inégalité des paramètres d'optimisation $\mathcal{P}$
$h(\mathcal{P})$	Fonction contrainte égalité des paramètres d'optimisation $\mathcal{P}$
h	Coefficient d'échange convectif
h_F	Coefficient d'échange convectif avec le réfrigérant
h_{air}	Coefficient d'échange convectif avec l'air ambiant
m_g	Nombre de contraintes inégalités
m_h	Nombre de contraintes égalités
$\vec{n}$	Normale sortante à la frontière
n_x, n_y	Composantes de la normale sortante $\vec{n}$
q	Gradient de température
q^*	Solution fondamentale en gradient de température
$\hat{q}$	Solution particulière en gradient de température
q_j	Gradient de température au nœud j
q_x, q_y	Gradient de température selon les directions du plan x et y
q_0	Gradient de température imposé sur une frontière
$q(d^k)$	Fonction quadratique à l'itération k du problème d'optimisation
$\vec{r}$	Vecteur du point de collocation à un point de la frontière
r, r_x, r_y	Norme et composantes du vecteur $\vec{r}$

s	Abscisse curviligne le long de la cavité
t	Temps
t^n	Temps après le pas n
t_{ref}	Temps de refroidissement
x, y	Coordonnées d'un point du repère
ΔH	Variation d'enthalpie massique du polymère
ΔP_F	Perte de charges dans le circuit de refroidissement
$\Delta T = T_{\max} - T_{\min}$	Fonction objectif mesurant l'écart maximal de température
Δp	Variation du paramètre p pour un calcul par différences finies
Δt	Pas de temps
Γ	Frontière du domaine Ω
Γ_C	Surface des canaux de refroidissement
Γ_E	Surface extérieure du moule
Γ_M	Surface de la cavité du moule
Γ_T	Frontière sur laquelle est imposée une température
Γ_h	Frontière sur laquelle est imposée une condition limite de convection
Γ_ϕ	Frontière sur laquelle est imposé une densité de flux (ou gradient de température)
Ω	Domaine de calcul de frontière Γ
Ω_F	Domaine occupé par le réfrigérant
Ω_M	Domaine occupé par le moule
Ω_P	Domaine occupé par le polymère
$\Phi(\mathcal{P})$	Objectif de l'optimisation, fonction du vecteur de paramètres $\mathcal{P}$
$\bar{\Phi}(\mathcal{P})$	Fonction de mérite utilisée par la méthode d'optimisation
$\hat{\Phi}(\mathcal{P})$	Fonction objectif augmentée pour le calcul de sensibilité par la méthode de l'état adjoint
Φ^0	Valeur initiale de l'objectif
Φ^*	Valeur optimale de l'objectif
$\Psi\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)$	Objectif de l'optimisation, fonction de la température T, du gradient de température q et du vecteur de paramètres $\mathcal{P}$
Σ	Interface entre deux domaines
$\Sigma_{M/P}$	Interface moule/polymère
Σ_{M_1/M_2}	Interface située sur le plan de joint du moule
α	Vecteur du terme source interpolé par la DRM
α^k	Pas d'avancée à l'itération k de l'optimisation
$\alpha^{k_{PQ}}$	Pas d'avancée à l'itération k_{PQ} de la résolution du sous-problème quadratique de l'optimisation
α_C	Orientation des canaux de refroidissement elliptiques

α_P	Coefficient de dilatation du polymère
γ	Fraction volumique
δ	Jeu minimal autorisé entre deux frontières lors de l'optimisation
δ_P	Distribution de Dirac au point P
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
δ_τ	Distribution de Dirac au temps τ
ϵ_M	Émissivité du moule
$\varepsilon_C, \varepsilon_{\mathcal{P}}, \varepsilon_\Phi$	Critères d'arrêt de l'optimisation
ζ	Coefficient de frottement (calcul de pertes de charges)
η_F	Viscosité dynamique du réfrigérant
η_P	Viscosité dynamique du polymère
θ_T	Paramètre de l'interpolation temporelle de la température
θ_q	Paramètre de l'interpolation temporelle du gradient de température
κ	Multiplicateurs de Lagrange
λ	Conductivité
λ_F	Conductivité du réfrigérant
λ_M	Conductivité du moule
λ_P	Conductivité du polymère
λ_{air}	Conductivité de l'air
ν_F	Viscosité cinématique du réfrigérant
ξ	Abscisse le long de l'élément de référence
ξ_k	Abscisses des points d'intégration de Gauss sur l'élément de référence
ρ	Masse volumique
ρ_F	Masse volumique du réfrigérant
ρ_M	Masse volumique du moule
ρ_P	Masse volumique du polymère
σ_B	Constante de Boltzmann
σ_P	Fonction objectif mesurant l'écart de la température à la température moyenne T_{moy} dans le polymère au moment de l'éjection
σ_1	Fonction objectif mesurant l'écart de la température en surface du moule à une température objectif T_{obj}
σ_2	Fonction objectif mesurant l'écart de la température en surface du moule à la température moyenne T_{moy}
$\phi = -\lambda\vec{\nabla}T.\vec{n}$	Densité de flux de chaleur
ϕ_P	Densité de flux de chaleur provenant du polymère
ϕ_x, ϕ_y	Densités de flux de chaleur selon les directions du plan
χ	Taux de cristallinité du polymère

ω	Facteur de pondération entre deux objectifs d'optimisation
ω_k	Poids de Gauss pour l'intégration numérique

Chapitre 1

Problématique industrielle

L'objectif de ce chapitre est de présenter le procédé d'injection des thermoplastiques, en insistant sur les aspects thermiques. L'importance du contrôle de la température, en particulier pour éviter l'apparition de défauts, sur la production des pièces sera étudiée. Les principaux procédés de fabrication des moules ainsi que les technologies de refroidissement seront recensées. Enfin, les méthodes de conception analytiques et numériques du refroidissement seront également étudiées.

1.1 Le procédé d'injection des thermoplastiques

Le procédé d'injection est un procédé de mise en forme des thermoplastiques par moulage permettant la production de pièces minces jusqu'à quelques millimètres d'épaisseur. Ce procédé est très répandu pour les productions de grandes séries comme l'automobile, l'électroménager ou l'électricité.

1.1.1 Déroulement de l'injection

Une presse d'injection se compose de trois groupes :
- le groupe de plastification et d'injection (figure 1.1) comprenant la vis, le fourreau chauffant et la trémie d'alimentation.
- le groupe de fermeture (figure 1.1) qui accueille le moule d'injection et contrôle ses ouvertures et fermetures.
- l'unité de contrôle.

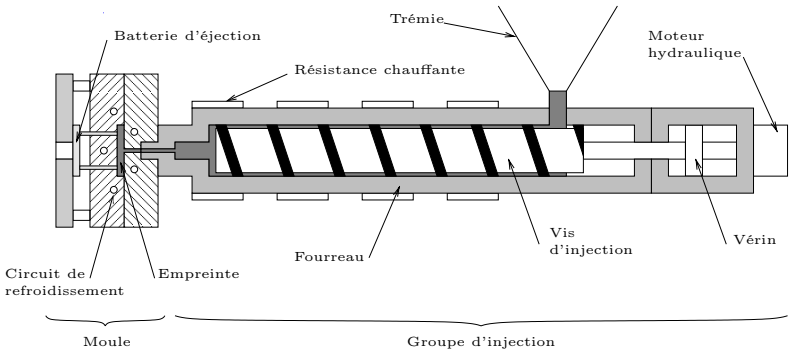


Fig. 1.1 – Schéma d'une presse à injecter (d'après [1])

Le polymère, généralement sous forme de granulés, est introduit dans la trémie pour alimenter la vis. Celle-ci entraîne le polymère par rotation. Un échauffement du polymère est obtenu par chauffage et dissipation visqueuse due au cisaillement de la matière entre le fourreau et la vis. L'échauffement du polymère entraîne son ramollissement (ou plastification) au fur et à mesure de la progression dans la vis jusqu'à un état liquide (fluide). Le polymère est alors injecté dans un moule possédant la géométrie de la pièce à produire et refroidit dans le moule jusqu'à une température permettant l'éjection sans risque de déformations de la pièce. Cette température d'éjection dépendra du polymère.

L'injection se divise donc en trois grandes étapes (figure 1.2) :

1. Moule fermé, la vis est utilisée comme un piston pour pousser le polymère dans l'empreinte ; c'est la phase d'injection ou de remplissage.
2. Le polymère est ensuite maintenu sous pression pendant la première partie du refroidissement pour compenser le retrait ; c'est la phase de compactage et de maintien en pression.
3. Enfin, l'application de la pression par la vis est stoppée pour laisser le polymère refroidir librement dans l'empreinte. Cette phase de refroidissement commence généralement une fois que le seuil d'injection de l'empreinte est solidifié et qu'il est alors inutile de continuer à appliquer une pression. Le polymère refroidit librement dans la cavité moulante jusqu'à une température permettant l'éjection. Pendant cette période, la quantité de matière nécessaire pour la pièce suivante est dosée en avant de la vis.

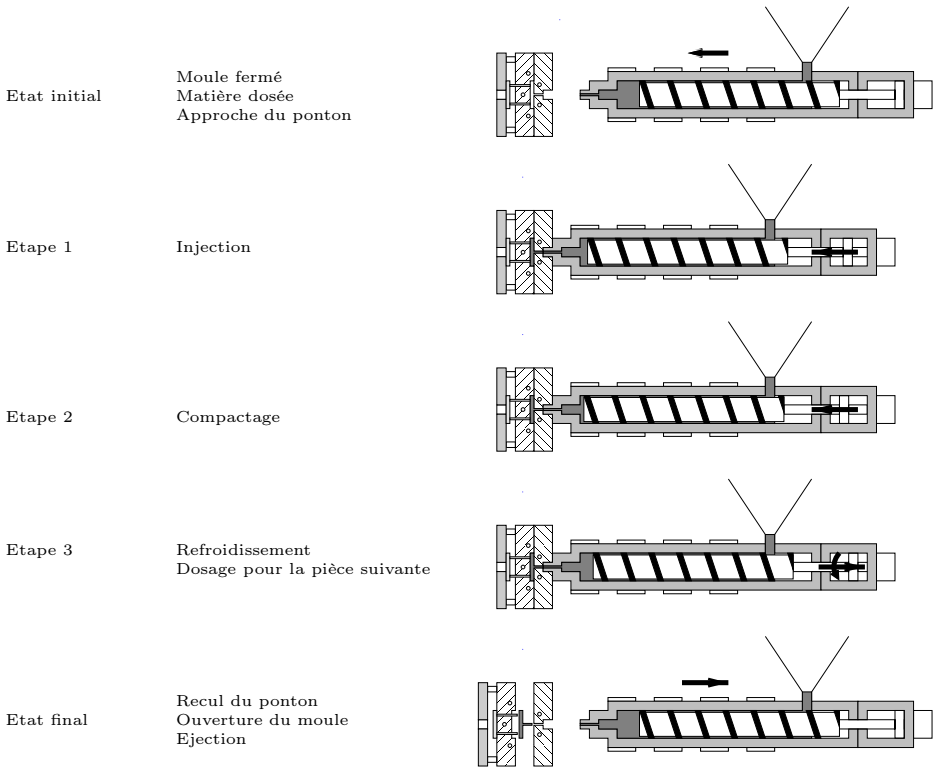


Fig. 1.2 – Déroulement d'un cycle d'injection (d'après [1])

Le moule est l'élément dont la fonction première est de donner la forme voulue au polymère. Parmi les autres fonctions importantes du moule, nous nous intéresserons plus particulièrement à la fonction de régulation thermique : la température du moule doit être suffisamment contrôlée pour permettre un bon remplissage du

moule puis un refroidissement du polymère dans les meilleures conditions possibles (en terme de temps de refroidissement et d'uniformité de température) jusqu'à l'éjection.

1.1.2 Polymères injectés

Polymères amorphes et semi-cristallins L'observation des évolutions du volume spécifique des polymères lors du refroidissement en fonction de la pression fait apparaître deux types de comportements représentés sur les diagrammes PVT (Pression - Volume - Température) des figures 1.3 et 1.4 :

- les polymères amorphes restent à un état surfondu jusqu'à la température de transition vitreuse T_g qui marque le passage de l'état liquide à l'état solide vitreux amorphe.
- les polymères semi-cristallins restent surfondus jusqu'à la température de fusion puis subissent brutalement une diminution du volume lors de leur cristallisation à la température T_c.

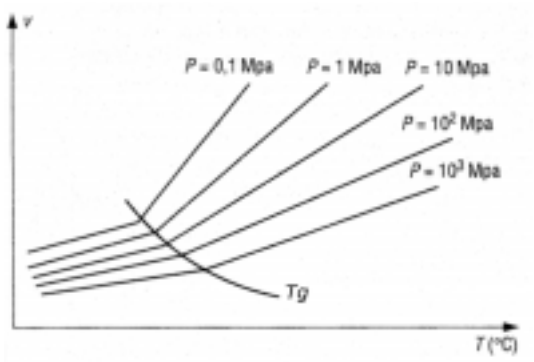


FIG. 1.3 – Allure du diagramme PVT d'un polymère amorphe [1]

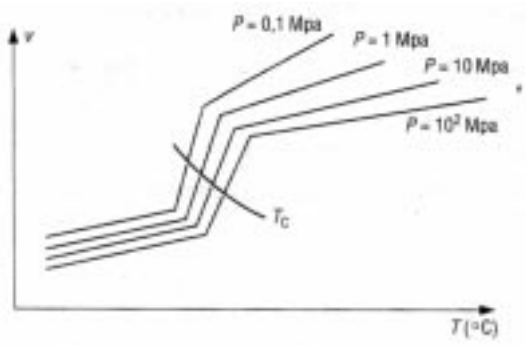


FIG. 1.4 – Allure du diagramme PVT d'un polymère semi-cristallin [1]

L'état amorphe vitreux correspond à un état moléculaire désordonné avec une structure de liquide figé hors équilibre dans lequel les chaînes moléculaires n'ont pas pu se réarranger. Cet état peut être du à un refroidissement trop rapide ou au polymère lui-même dont les chaînes sont complexes et ne peuvent se réorganiser.

L'état cristallin correspond à un état ordonné et compact des chaînes moléculaires. Cet état est caractérisé par l'absence de transition vitreuse mais l'existence d'un point de fusion. La cristallisation n'est jamais complète en pratique (irrégularités structurales, lenteur du réarrangement, enchevêtrement des chaînes de la phase amorphe). Les polymères semi-cristallins présentent donc un taux de cristallinité χ qui est fonction de la vitesse de refroidissement et du polymère lui-même ($0 \leq \chi \leq \chi_{\max}$) et peuvent présenter un comportement amorphe si la vitesse de refroidissement est suffisamment élevée.

La cristallisation est une réaction exothermique et les polymères présentent une enthalpie du fusion. De plus, les polymères semi-cristallins présentent un retrait plus important (la compacité dans l'état cristallin ordonné est supérieure à celle de l'état amorphe).

Rhéologie des polymères Les polymères à l'état fondu sont des fluides visqueux. La viscosité η caractérise le rapport entre contrainte et vitesse de déformation. En particulier, en cisaillement, on a $\sigma = \eta\dot{\gamma}$, où $\dot{\gamma}$ est la vitesse de cisaillement et σ la contrainte. La viscosité dépendra de la température, de la pression et de la vitesse de déformation. Pour décrire le comportement des polymères, différents modèles de comportement sont disponibles [2] :

- le comportement newtonien,
- le comportement non-newtonien,
- le comportement viscoélastique.

Pour un comportement newtonien, la dépendance de la vicosité avec la vitesse de déformation est négligée. La viscosité newtonienne est donc suffisante pour caractériser le polymère. Au contraire, lorsqu'un comportement non-newtonien est considéré, on introduit un adoucissement de la contrainte lorsque le taux de cisaillement augmente (figure 1.5).

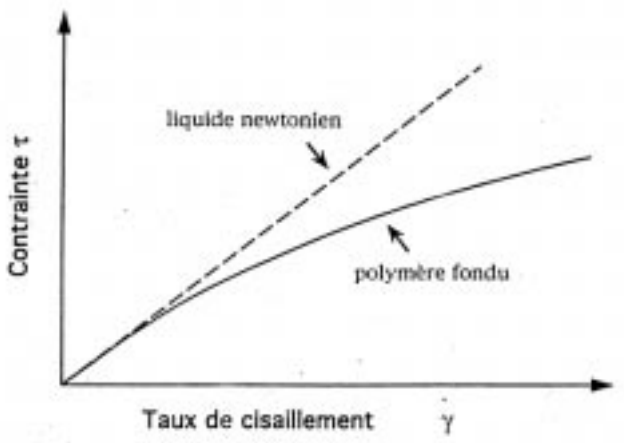


FIG. 1.5 – Évolution de la contrainte de cisaillement en fonction de taux de cisaillement pour des fluides newtoniens et non-newtoniens (polymère fondu) [2]

Ce comportement peut être décrit en utilisant par exemple une loi puissance (équation (1.1) en 1D) où K est la consistance du polymère et m l'indice de pseudo-plasticité. D'autre lois de comportement comme les lois de Cross ou Carreau permettent également de simuler un comportement non-newtonien (voir [2]).

$$\eta = K\,|\dot{\gamma}|^{m-1} \tag{1.1}$$

Enfin pour décrire certains phénomènes relatifs à l'écoulement des polymères fondus (le gonflement en sortie de filière d'extrusion par exemple), il est nécessaire d'utiliser un modèle de comportement viscoélastique. On pourra utiliser pour cela une loi de Maxwell (voir [2]) qui combine un comportement purement élastique et un comportement purement visqueux. Ce dernier est alors décrit par l'équation suivante :

$$\sigma = \eta \frac{d\epsilon}{dt} \tag{1.2}$$

Lors de l'écoulement d'un polymère pendant le remplissage d'un moule par exemple, on a un échauffement du à la viscosité importante (voir figures 1.6 et 1.7). L'ordre de grandeur de la puissance dissipée par unité de longueur lors de l'écoulement entre deux plans parallèles séparés d'une distance e_P à une vitesse moyenne v est $\dot{Q} = \eta \frac{v^2}{e_P}$ [2]. L'échauffement sera donc d'autant plus important que la viscosité et la vitesse d'écoulement sont élevées et que l'épaisseur est faible.

Propriétés thermiques Les polymères sont caractérisés par une très faible conductivité thermique de l'ordre de 0,1 à 0,2W.m^{-1}.K^{-1} et une diffusivité thermique de l'ordre de 10^{-8} à 10^{-7}m^2.s^{-1}. Lors d'un choc thermique, le temps nécessaire pour que le front de chaleur arrive à 1mm de profondeur est de 10s pour une diffusivité de 10^{-7}m^2.s^{-1} [2]. Les phénomènes thermiques sont donc très longs par rapport aux autre phénomènes comme l'écoulement.

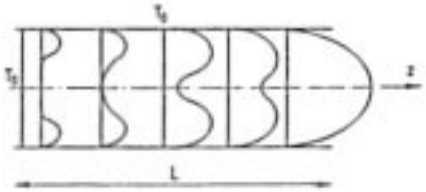


Fig. 1.6 – Évolution du profil de température dans l'épaisseur d'un polymère en écoulement entre deux plans parallèles [2]

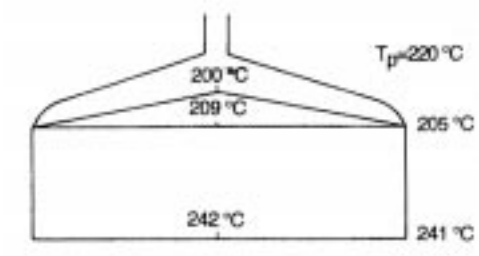


Fig. 1.7 – Température du polymère en différents points d'une filière d'extrusion de faible épaisseur (1,5mm) [2]

1.1.3 Suivi de l'injection sur un diagramme PVT

Les évolutions de la pression et de la température moyennes dans le polymère au cours des différentes phases de l'injection sont représentées de manière schématique sur la figure 1.8.

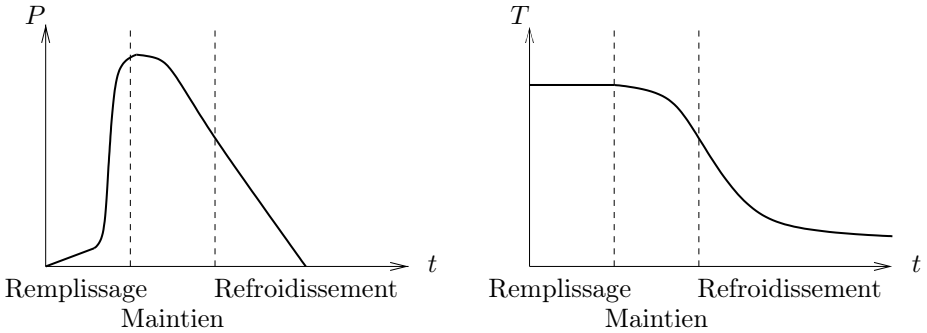


Fig. 1.8 – Evolution de la pression moyenne et de la température moyenne dans le polymère au cours de l'injection (d'après [3])

Si l'on représente schématiquement le chemin suivi par le polymère lors de l'injection sur un diagramme PVT (figure 1.9), on constate différents types d'évolution :

- AB : le remplissage et le compactage peuvent être considérés comme une étape de mise en pression isotherme ;
- BE : le maintien en pression est composé d'une phase de maintien isobare (BC) puis on observe une brusque diminution de la pression et de la température lors de la cristallisation (D). Lorsque le seuil d'injection est figé, le refroidissement isochore s'accompagne d'une diminution de la pression jusquà la pression atmosphérique (EF)
- FG : le refroidissement se poursuit à la pression atmosphérique ce qui entraîne le retrait ΔV du polymère.

L'évolution du polymère au cours de l'injection est donc un phénomène thermo-mécanique complexe. Dans cette étude, nous nous intéresserons aux transferts thermiques ayant lieu après le remplissage, pendant les phases de maintien en pression et refroidissement.

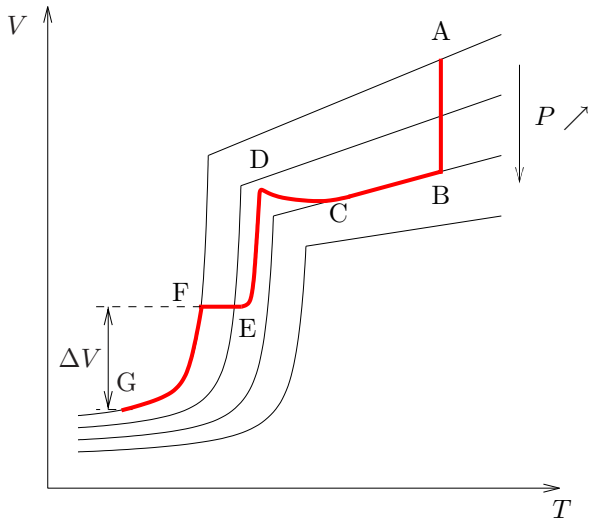


FIG. 1.9 – Suivi du cycle d'injection sur le digramme PVT d'un polymère semi-cristallin (d'après [3] et [4])

1.2 Importance de la thermique lors de la production de pièces injectées

1.2.1 Lien productivité - refroidissement

Les polymères possèdent une très faible diffusivité thermique (de l'ordre de 10^{-8} à 10^{-7}m^2.s^{-1} alors qu'elle est de l'ordre de 10^{-5}m^2.s^{-1} pour un acier). La conduction de chaleur dans le polymère est donc très difficile ce qui entraîne des temps de refroidissement souvent élevés et ce d'autant plus que la pièce est épaisse.

A part pour certaines pièces très minces, la phase de refroidissement est la plus longue du cycle d'injection. Elle dure typiquement plus de 50% du cycle et peut atteindre plus de 90% [5, 6, 4]. La vitesse de refroidissement est donc un facteur important de productivité et des gains importants peuvent être réalisés en diminuant le temps de refroidissement de pièces présentant des zones chaudes mal refroidies. Une mauvaise conception du système de refroidissement par rapport à la géométrie de la pièce peut faire apparaître des zones de température plus élevée dans le moule. Le temps de refroidissement pour l'ensemble est alors plus long.

1.2.2 Défauts d'injection pouvant avoir une origine thermique

Parmi les nombreux défauts pouvant apparaître lors de l'injection, un certain nombre peut être lié à une mauvaise régulation de la température du moule.

Défauts dimensionnels Le type de défauts le plus grave est le non-respect des dimensions et de la forme des pièce injectées. Une température de moule trop faible peut par exemple conduire à des pièces incomplètes ou présentant des hésitations lors de l'écoulement (en particulier pour des pièces de faible épaisseur) [7].

D'autre part, une température de moule trop élevée peut conduire à l'apparition de bavures (le polymère trop fluide se glisse dans le plan de joint) ou à une refusion des pièces si le temps de refroidissement n'est pas adapté à cette température (en sortie du moule, la température au centre du polymère est trop élevée et par diffusion, la surface de la pièce chauffe et peut se déformer) [8].

Des dimensions incorrectes sont obtenues en cas de température de moule inadaptée et variable [9, 10]. Le retrait n'est pas conforme à celui attendu et il est souvent nécessaire d'augmenter le temps de refroidissement pour l'adapter à la température de moule et maintenir la qualité des pièces produites.

Enfin, un refroidissement non uniforme est à l'origine de déformations et d'un gauchissement des pièces. En sortie de moule, la pièce prend une forme différente de celle de l'empreinte due à un retrait inégal (vitesses de refroidissement différentes) selon les zones de l'empreinte [11]. Ce phénomène se rencontre en particulier sur les pièces présentant des variations d'épaisseur, en particulier dans des zones angulaires, l'exemple le plus typique étant une boîte rectangulaire (figure 1.10).

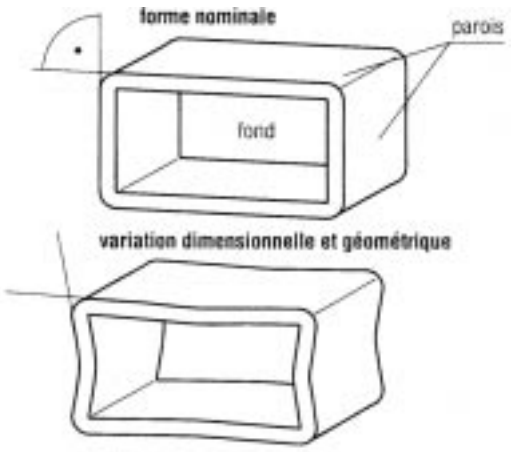


Fig. 1.10 – Déformations typiques d'une boîte en sortie de moule [1]

Défauts structurels Des mauvaises conditions de moulage peuvent conduire à des pièces ne possédant pas les propriétés (mécaniques, optiques...) souhaitées. Une température de moule trop faible peut amplifier l'apparition de retassures et vacuoles (dépressions en surface ou dans l'épaisseur dues à des retraits variables selon l'épaisseur de la pièce, voir figure 1.11), la fragilité des lignes de soudure (zones dans laquelle deux fronts de matière se rejoignent), le délaminage des pièces (fragilisation des pièces due à un gradient de vitesse d'écoulement dans l'épaisseur) [12]. Dans le cas de polymères chargés, un moule trop froid peut également entraîner une forte hétérogénéité du taux de charge dans la pièce finale.

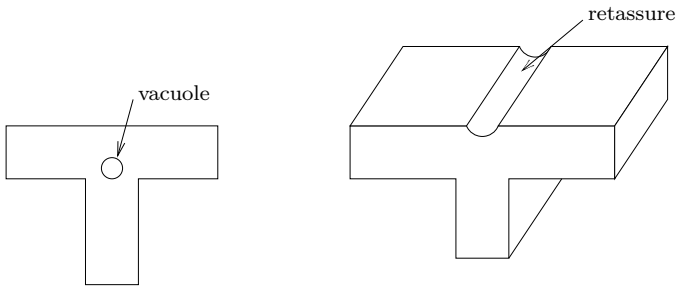


Fig. 1.11 – Vacuoles et retassures (d'après [12])

Le lien entre retassures et paramètres de maintien (pression et durée) a été montré expérimentalement [13] dans le cas de plaques refroidies asymétriquement. L'augmentation de la différence de température dans le moule conduit à une augmentation de la profondeur des dépressions. Pour contrer ce phénomène, il est nécessaire d'augmenter la pression de maintien ou la durée du maintien, ce qui aboutit encore à une perte de productivité.

L'injection de pièces de précision, par exemple des lentilles optiques, nécessite un contrôle très précis de la température du moule car c'est l'un des paramètres les plus influents sur les contraintes résiduelles dans la pièce et sur ses propriétés optiques [9, 10]. Augmenter la température et le temps de refroidissement permet de réduire les distortions optiques. De plus, à une température de moule donnée, augmenter le temps de refroidissement permet de réduire les erreurs de géométrie. Pour obtenir une qualité de pièces suffisante, le choix du temps de refroidissement doit être fait de manière à atteindre une température inférieure à la température de transition vitreuse T_g en tout point de la pièce et éventuellement un équilibre thermique avant l'éjection. Les évolutions de températures étant très lentes en profondeur de la pièce (figure 1.12), le temps de refroidissement choisi doit être très long (supérieur à 140 secondes dans ce cas pour une pièce très épaisse).

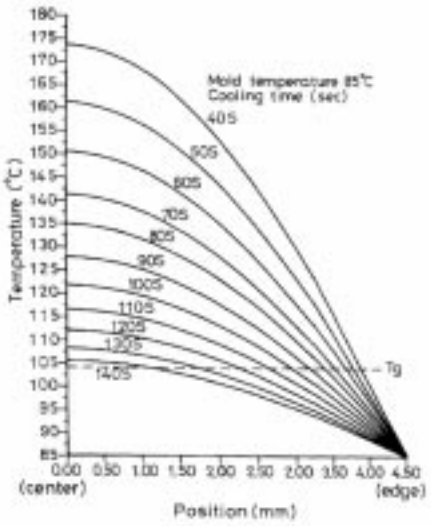


FIG. 1.12 – Évolution de la température dans l'épaisseur du polymère (PMMA) avec le temps [10]

D'autre part, des calculs thermo-mécaniques du refroidissement ont également permis de montrer l'effet d'un refroidissement non homogène sur les contraintes résiduelles [11, 14]. Les contraintes dues à l'écoulement sont fonctions de la viscosité du polymère η et de la vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}$: $\sigma = \eta\dot{\gamma}$. Les contraintes d'origine thermique sont dues aux gradients de température dans la pièce à la fin du maintien en pression. Le retrait dû aux déformations thermiques lors du refroidissement $\varepsilon_P = \alpha_P \Delta T$ est alors non uniforme ce qui entraîne l'apparition de contraintes résiduelles dans la pièce. Dans le cas d'un cylindre creux par exemple, la surface extérieure est refroidie plus rapidement que la surface intérieure car le noyau présente une surface d'échange plus faible et une température plus élevée. Ce refroidissement asymétrique créée des contraintes de compression différentes sur les surfaces internes et externes et des contraintes de traction dans l'épaisseur. Enfin, contrôler l'histoire (l'évolution) de la température du moule au lieu de réguler à une température constante permet de limiter les contraintes résiduelles dans le polymère [15].

Défauts d'aspect Une température de moule non uniforme ou non adaptée au polymère favorise l'apparition de défauts d'aspects [12]. Par exemple, une température de moule trop faible peut conduire à l'apparition de

traces de givrage (dues à la vapeur d'eau présente dans le polymère), de défauts de type peau d'orange (plissement de la surface perpendiculairement à l'écoulement par glissement de la matière), de traces d'écoulement qui marquent une position instantanée du front de matière lors du remplissage [16]. Au contraire, une température de moule trop élevée peut conduire à l'apparition de marques de brûlure.

La température du moule a également un effet sur le taux de cristallinité χ des polymères semi-cristallins et la morphologie des phases cristallines [17]. Le taux de cristallinité augmente avec la température du moule puisque le refroidissement est plus lent (dans le cas du polypropylène, il passe de 55,9 à 60% en augmentant la température du moule de 60 à 140°C).

Une mauvaise régulation thermique des moules d'injection peut donc avoir de graves conséquences sur la qualité des pièces produites et sur les cadences de production. De plus, la température du moule est un des paramètres les plus difficiles à modifier lors de la production car les temps de stabilisation peuvent être très longs. On a souvent peu de contrôle direct sur la température à la surface de la cavité moulante. La prise en compte des problèmes thermiques lors de la conception et la fabrication des moules peut permettre de réduire ces problèmes et éviter des rectifications du moule.

1.3 Les méthodes de fabrication des moules et leurs conséquences pour la régulation thermique

1.3.1 Fabrication "traditionnelle" des moules

1.3.1.1 Procédés

Les méthodes par enlèvement de matière représentent la très grande majorité des méthodes utilisées pour la fabrication des moules et inserts pour moules d'injection [18]. Après usinage par les procédés classiques (fraisage, tournage, perçage...), une ou plusieurs étapes de finition et un traitement de surface sont souvent nécessaires pour obtenir l'état de surface souhaité. Les autres méthodes par enlèvement de matière peuvent être l'électroérosion, la découpe à fil, l'usinage électrochimique, les attaques chimiques... Les autres grands procédés utilisables sont la fonderie, le dépôt de métal ou le dépôt électrolytique. Le choix du procédé utilisé dépendra de la taille et de la géométrie de la cavité, des matériaux utilisables, du coût et des délais de fabrication.

1.3.1.2 Matériaux

Les matériaux utilisés pour la fabrication des moules d'injection de thermoplastiques sont principalement des aciers choisis selon le procédé de fabrication retenu pour le moule et les conditions d'utilisation (sollicitations, interactions avec les polymères...) [18].

La conductivité thermiques des aciers dépend de la composition et de la charge en éléments d'alliages [19] et varie environ entre 15 et 40W.m^{-1}.K^{-1}. Le choix des aciers pour moules d'injection ne doit cependant pas dépendre uniquement des propriétés thermiques mais aussi de la résistance mécanique et à la corrosion. L'augmentation des propriétés mécaniques se traduit par l'ajout d'éléments d'alliage qui peuvent être nuisibles aux propriétés thermiques (par exemple le chrome utilisé pour la résistance à la corrosion a tendance à faire diminuer la conductivité thermique).

L'utilisation d'aluminium pour la fabrication de moules d'injection commence à être souvent envisagée. Les alliages d'aluminium offrent en effet un grand nombre d'avantages par rapport aux aciers [20]. En plus d'une meilleure usinabilité, ils présentent l'avantage d'avoir une conductivité thermique jusqu'à 5 fois supérieure à celle des aciers. Une meilleure uniformité de température est donc possible dans le moule en utilisant moins de canaux de refroidissement (en particulier dans les zones critiques). La grande capacité thermique permet

également d'envisager la production de pièces difficiles à obtenir dans des moules acier : pièces épaisses et à section plus massive et pièces complexes.

1.3.1.3 Technologies "traditionnelles" de régulation thermique des moules

Dans la plupart des cas, la régulation des moules d'injection est assurée par circulation d'un fluide caloporteur dans des canaux percés dans le moule. Un circuit complet peut être fabriqué par perçage de canaux rectilignes et l'utilisation de bouchons pour fermer le circuit (figure 1.13). Ce système est très efficace pour le refroidissement de plaque planes et rectangulaires puisque les canaux peuvent être repartis régulièrement à une distance constante de la pièce. Un refroidissement quasiment uniforme sera donc assuré. Par contre, l'utilisation de canaux rectilignes ne permet pas d'obtenir un refroidissement uniforme de pièces circulaires ou non planes (figure 1.14).

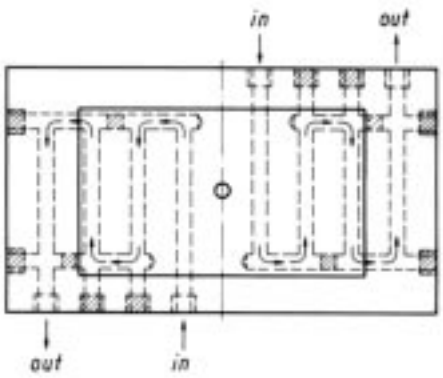


Fig. 1.13 – Exemple de circuit obtenu à partir de canaux rectilignes [18]

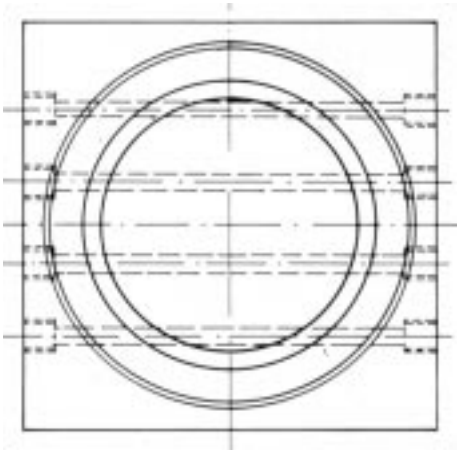


Fig. 1.14 – Problème de refroidissement d'une pièce circulaire avec des canaux rectilignes [18]

Pour des zones très chaudes mais disposant de peu d'espace pour permettre la mise en place d'une circulation de fluide (par exemple les noyaux étroits), le refroidissement peut être effectué en utilisant des fontaines ou des inserts de matériaux très conducteurs (cuivre, bronze ou béryllium par exemple) en contact à l'autre extrémité avec un canal éloigné de la surface (figure 1.15) [18, 21].

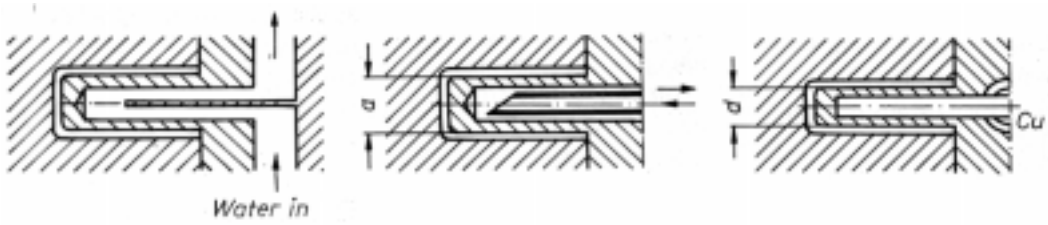


Fig. 1.15 – Refroidissement de noyaux par utilisation de fontaines ou d'inserts conducteurs [18]

L'utilisation de caloducs est également possible. Un caloduc est un tube creux dont la paroi intérieure est recouverte d'un couche poreuse saturée de fluide (figure 1.16) [22]. L'augmentation de chaleur à une extrémité du caloduc provoque l'évaporation du fluide qui se condense à l'autre extrémité (qui est refroidie) puis retourne vers la source de chaleur par capillarité dans la paroi. Le changement d'état consomme de l'énergie et permet

donc d'évacuer une partie de la chaleur. Les plages de température de fonctionnement doivent être choisies avec soin pour que la température du moule corresponde à la température d'évaporation du fluide.

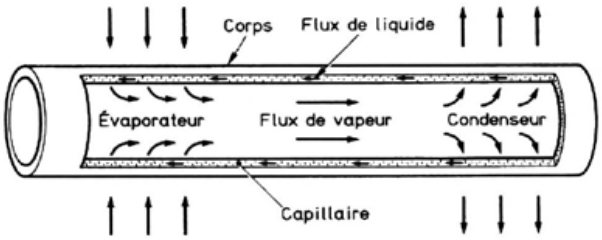


FIG. 1.16 – Schéma de principe d'un caloduc [22]

Le choix du nombre, de la taille et de la position des canaux de refroidissement dépendra, pour une même pièce, du matériau constitutif du moule et en particulier de sa conductivité thermique. La faible conductivité thermique des aciers conduit à une multiplication des canaux de refroidissement dans les zones critiques pour uniformiser les températures. D'autre part, la conductivité thermique élevée des alliages d'aluminium permet d'utiliser moins de canaux, plus éloignés de la surface tout en améliorant le temps de refroidissement et l'uniformité de température.

1.3.2 Procédés d'outillage rapide appliqués à la fabrication des moules d'injection

De nouveaux procédés de fabrication des moules d'injection font aujourd'hui leur apparition pour des moules pouvant être utilisés pour des moyennes et grandes séries. Ces procédés de prototypage rapide appliquées à la fabrication des outils permettent d'obtenir rapidement et à moindre coût des pièces "bonne matière/bon procédé".

Le nombre de procédés rapides existants aujourd'hui est important et un petit nombre d'entre eux possèdent des possibilités d'adaptation à l'outillage rapide (voir [23] pour une aide au choix de procédés rapides selon les procédés et [24] pour ceux applicables à l'injection). Parmi les procédés directs (outillage rapide), les procédés les plus prometteurs (classés par nombre de pièces productibles croissant) sont la stéréolithographie, l'impression 3D, le frittage laser de poudre, l'assemblage de strates.

1.3.2.1 Principes des procédés rapides

Tous ces procédés sont basés sur une fabrication par empilement de couches élémentaires plus ou moins épaisses selon le procédé. Le découpage de la géométrie est effectué à partir d'un fichier CAO de la géométrie au format STL (approximation des surfaces par triangulation). La fabrication est ensuite variable pour chaque procédé.

La stéréolithographie Le procédé consiste à solidifier une résine photosensible (résine époxyde) sous l'action d'une source lumineuse (faisceau laser ou UV) balayant les couches successives. Un traitement éventuel de post-polymérisation permet de compléter la transformation de la résine en cœur de pièce et d'éviter la poursuite de la réaction lors des injections [25].

La faible conductivité thermique des résines peut poser des problèmes de refroidissement et induire des problèmes de distorsion de pièces [26]. De plus, la rapide diminution des propriétés mécaniques des résines époxydes avec la température oblige à augmenter les temps de cycles pour laisser le moule refroidir et éviter de dépasser la température de transition de la résine (entre 60 et 90°C).

L'impression 3D L'impression 3D est un procédé semblable au frittage de poudre mais la fusion partielle par frittage est remplacée par l'utilisation d'un liant pour maintenir la poudre en forme avant le recuit [27]. Le procédé est semblable à l'impression jet d'encre mais avec un empilement successif des couches.

Le frittage laser de poudre métallique Le procédé consiste à étaler de fines couches de poudre métallique qui sont successivement frittées par balayage d'un laser (figure 1.17). Un recuit après construction permet de densifier la pièce mais conduit à un retrait important et à des fissurations en cas de conception de pièce non adaptée. La méthode directe désigne le frittage d'un métal seul alors que la méthode indirecte implique la présence d'un liant à plus bas point de fusion comme un polymère ou un deuxième métal à température de fusion plus faible [28].

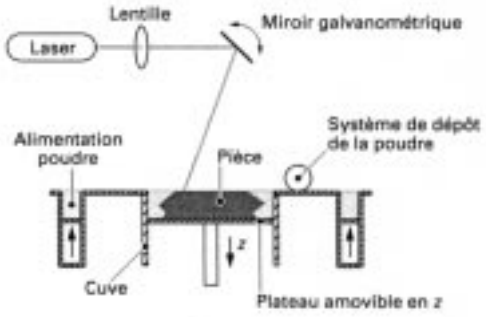


Fig. 1.17 – Principe du frittage laser de poudre [29]

Les poudres métalliques utilisées peuvent être des alliages à base de fer, nickel, cobalt ou cuivre [30], de la poudre acier avec une couche de liant polymère [30, 31]. Les moules obtenus après frittage permettent de mouler entre quelques centaines et quelques milliers de pièces.

L'infiltration de résine époxy avant le recuit [32] permet de réduire la porosité de la pièce. Toutefois, la conductivité thermique de la résine pouvant être jusqu'à 1000 fois inférieure à celle de l'acier, il est nécessaire soit de reconcevoir l'insert pour prendre en compte cette diminution de la conductivité globale soit d'allonger les temps de cycles pour que la température du moule descende suffisamment avant le cycle suivant.

L'assemblage de strates La pièce est fabriquée par assemblage de plaques (métalliques ou autres) d'épaisseur pouvant aller jusqu'à quelques millimètres (figure 1.18). La pièce à fabriquer est décomposée selon des plans dont l'espacement correspond à l'épaisseur des plaques utilisées. L'usinage est réalisé séparément pour chaque tranche et celles-ci sont ensuite assemblées manuellement et assemblées par brasage [33, 34], collage ou assemblage mécanique. Dans le cas des moules d'injection, la solution du brasage semble la plus favorable car elle permet d'obtenir des résistances suffisantes par rapport à des sollicitations subies lors de l'injection et l'étanchéité nécessaire pour les canaux de refroidissement. Pour des séries de quelques centaines de pièces, un assemblage mécanique peut être suffisant [35]. Enfin, une finition peut être nécessaire pour respecter les états de surface au niveau des interfaces [36, 37].

Ce procédé a également été appliqué à la fabrication de moules d'extrusion-soufflage [38], d'injection soufflage [39] et de moussage [40] en aluminium, de moules de fonderie sous pression [41] et de formage superplastique [33].

Fig. 1.18 – Principe de la fabrication par strates (procédé Stratoconception®) [38]

1.3.3 Conséquences pour la régulation thermique des moules d'injection

1.3.3.1 Possibilités géométriques pour la fabrication des canaux de refroidissement

Les procédés permettent la fabrication de formes complexes impossibles à obtenir par usinage. L'utilisation de formes complexes pour la fabrication des circuits de refroidissement permet d'envisager une diminution du temps de refroidissement et une augmentation de la qualité en placant les canaux à une distance constante de la pièce (canaux conformes).

Canaux conformes L'une des premières applications en terme de refroidissement a été la fabrication de canaux qui suivent la surface de la pièce à refroidir (canaux conformes) afin de diminuer les temps de cycle et les différences de température dans les pièces (par exemple [42]). Cette possibilité est particulièrement intéressante dans le cas de pièces non planes et circulaires comme des pièces cylindriques (figure 1.19). Les canaux conformes permettent dans ce cas de réduire les différences de refroidissement entre le noyau et la matrice du moule [43].

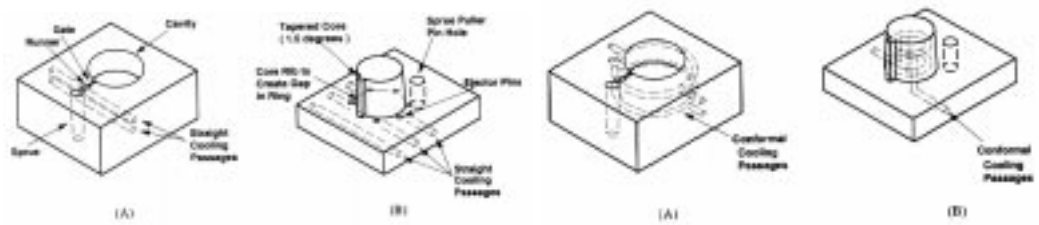


Fig. 1.19 – Canaux rectilignes et canaux conformes [43]

Des simulations effectuées par éléments finis sur des moules en acier et des moules obtenus par impression 3D montrent que pour un même débit de fluide, des canaux conformes permettent de réduire le temps de cycle (de 19%), les distortions de la pièce (13%) et améliorer les conformités de dimensions de la pièce avec le moule, malgré les propriétés thermiques moins intéressantes du matériau utilisé (36,5W.m^{-1}.K^{-1} pour un acier 40CMD8 et 28W.m^{-1}.K^{-1} pour un matériau utilisé pour l'impression 3D) [44]. Une amélioration encore plus importante serait possible en utilisant un matériau possédant les propriétés de l'acier 40CMD8 pour obtenir un refroidissement conforme.

Les canaux conformes peuvent également être utilisés pour stabiliser plus rapidement la température du moule lors des premiers cycles [45] et éviter d'obtenir des pièces différentes entre les premiers cycles et les suivants. La distance des canaux à la surface de la pièce est alors calculée de manière à pouvoir évacuer la totalité de la chaleur apportée par le polymère pendant le refroidissement [27]. La température du moule reste alors globalement constante au cours des cycles.

Les procédés de prototypage rapide sont néanmoins limités par l'orientation de fabrication choisie. Par exemple dans le cas des assemblages stratifiés, les canaux doivent se trouver soit dans le plan des plaques soit perpendiculairement à ce plan (ou avec un angle très faible) pour permettre l'usinage. Pour les autres procédés, l'ajout de supports lors de la fabrication peut s'avérer nécessaire pour fabriquer des cavités dans la pièce.

Sections non circulaires De la même manière, les sections des canaux de refroidissement ne sont plus limitées à des formes circulaires comme c'est le cas lors d'une fabrication par usinage. Des canaux de forme rectangulaire et elliptique ont été réalisés par stéréolithographie [46] et stratoconception [47]. La modification de la section seule suffit à améliorer l'évacuation de chaleur (ce qui ce traduit par une température de moule globalement plus faible). Il faut toutefois rester prudent pour ne pas augmenter le rayon hydraulique équivalent des canaux qui pourrait aboutir à une diminution rapide du coefficient d'échange.

Une amélioration du refroidissement peut également être obtenue en introduisant des éléments perturbant l'écoulement à l'intérieur même des canaux. Une amélioration importante a en effet été obtenue par ajout d'une texture à la surface des canaux de refroidissement obtenus par impression 3D [43]. Le coefficient d'échange a ainsi été multiplié par 8 par rapport à un canal lisse.

D'autre part, les possibilités géométriques permettent d'envisager le refroidissement des moules non pas à l'aide de canaux dans lesquels circule un fluide mais avec de véritables surfaces d'échanges suivant les surface de la pièce à refroidir à la manière d'échangeurs thermiques (figure 1.20) [39].

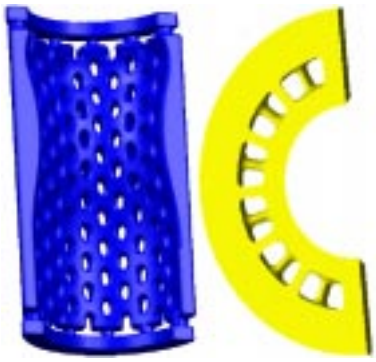


Fig. 1.20 – Proposition de refroidissement d'un moule d'extrusion-soufflage stratifié pour la production de bouteilles et strate élémentaire correspondante [39]

1.3.3.2 Conductivité thermique des matériaux utilisés

Les procédés rapides ne permettent pas aujourd'hui l'utilisation de n'importe quel matériau pour la fabrication des moules. De plus, après fabrication, les propriétés équivalentes sont souvent inférieures aux propriétés des matériaux massifs équivalents. En particulier, la conductivité thermique des moules obtenus est très variable selon les procédés utilisés (tableau 1.1).

Matériaux	Procédés	Conductivité thermique [$W.m^{-1}.K^{-1}$]
Acier	Usinage, Stratoconception	15 à 40 [48]
Poudre acier	Impression 3D, Frittage	20 [27, 31]
Aluminium	Usinage, Stratoconception	110 à 160 [49]
Cuivre	Usinage	160 à 400 [50]
Poudre cuivre/polyamide	Frittage	40 [31]
Résine	Stéréolithographie	0,2 [51, 52]

Tab. 1.1 – Ordres de grandeur des conductivités thermiques des matériaux utilisés pour la fabrication des moules d'injection

Le frittage de poudre et l'impression 3D donnent généralement des matériaux poreux ce qui ne permet pas de retrouver globalement les propriétés du matériau massif, en particulier pour la conductivité thermique. Pour améliorer celle-ci, il est alors possible de réaliser des infiltrations (de bronze ou de cuivre par exemple) [27].

La fabrication par empilement de strates entraîne des discontinuités au niveau de chaque interface entre strates. Selon l'assemblage et la conductivité thermique du moyen d'assemblage, les conséquences sur la conductivité thermique globale sont variables.

La stéréolithographie utilise des résines de très faible conductivité thermique, environ 100 fois inférieure à celle d'un acier. L'utilisation de canaux de cuivre incorporés directement dans le moule lors de sa fabrication permet de réduire ce défaut [53]. Toutefois, les moules produits par stéréolithographie sont destinés aux pré-séries ou petites séries (quelques milliers de pièces maximum) [53] pour lesquelles la productivité n'est pas nécessairement importante. La faible conductivité thermique et les températures de moule limitées ne sont donc pas des facteurs prépondérants lors du choix de ce procédé.

Hopkinson, Ferraira et Harris [54, 53, 52, 55] ont montré que la diminution de la conductivité thermique aura des conséquences sur :
- le temps de cycle qui s'allonge, jusqu'à plusieurs minutes pour des pièces épaisses (figure 1.21),
- la température du moule qui augmente et présente des gradients importants,
- la qualité des pièces produites (dilatation du moule plus grande) et la cristallinité dans le cas de polymères semi-cristallins.

Les procédés traditionnels de fabrication des moules sont limités pour la fabrication de circuits de refroidissement complexes. Le recours à d'autres méthodes de refroidissement (inserts, fontaines...) est donc courant pour remédier aux problèmes de refroidissement de pièces complexes. Les procédés d'outillage rapide offrent beaucoup plus de possibilités géométriques pour créer des canaux de géométries plus évoluées. Toutefois, selon les procédés, les matériaux disponibles n'offrent pas les mêmes caractéristiques thermiques que l'acier. L'utilisation des ces procédés devrait conduire à repenser les méthodes de conception du refroidissement.

1.4 Les méthodes de conception de la régulation thermique des moules

Lors de la conception des moules d'injection, la phase concernant le refroidissement est souvent l'une des dernières étapes après la conception des composants de toutes les autres fonctions du moule : distribution du polymère fondu, mise en forme, solidification et éjection du polymère.

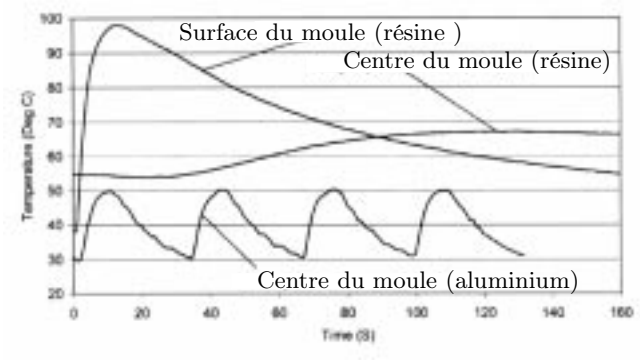


FIG. 1.21 – Comparaison des températures dans un moule aluminium et un moule obtenu par stéréolithographie (d'après [54])

Les étapes de la conception du moule comprennent (dans l'ordre proposé dans [18]) :

- la définition du plan de joint ;
- le choix du nombre de cavités dans le moule ;
- la conception de l'alimentation du moule et des empreintes (canaux et seuils) ;
- la conception du refroidissement ;
- le calcul des dimensions exactes de l'empreinte ;
- la conception du système d'éjection ;
- l'intégration des dispositifs de guidage et d'alignement ;
- le choix du nombre et de la position des évents ;
- le système de montage.

En pratique, l'étape de conception du refroidissement est souvent reléguée dans les dernières étapes (voire parfois après les premiers tests du moule). Les possibilités d'implantation des canaux de refroidissement sont alors très limitées par les composants des autres fonctions du moule et la régulation n'est pas toujours optimale.

Les objectifs d'une conception d'un système de refroidissement de moule sont [56] :

- un refroidissement uniforme de la pièce pour minimiser l'apparition de défauts,
- l'obtention de la température de moule désirée en début de cycle pour permettre l'écoulement du polymère et le remplissage complet du moule tout en restant à un niveau de température conforme à celui préconisé pour la mise en forme du polymère,
- la limitation du temps de cycle.

Le placement des canaux de refroidissement est limité par la géométrie du moule, le plan de joint, les éjecteurs et tous les éléments mobiles du moule. Les méthodes utilisées pour concevoir le circuit de refroidissement vont de l'expérience du concepteur basée sur quelques règles qualitatives jusqu'à la simulation numérique permettant de reproduire le refroidissement de pièces complexes en passant par des calculs analytiques permettant de concevoir simplement des circuits pour des pièces simples.

Le but des ces méthodes est de déterminer le diamètre des canaux D_C, l'entraxe d_{cc} et la distance d_{sc} des canaux à la cavité moulante par exemple dans le cas d'une plaque dont la section est représentée sur la figure 1.22.

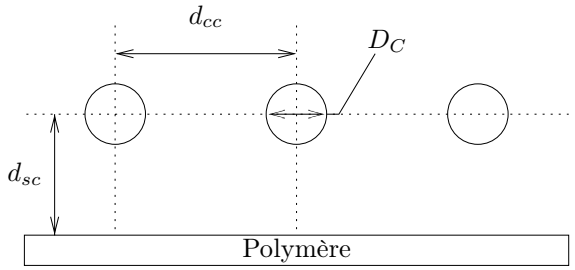


FIG. 1.22 – Définitions des longueurs représentatives du positionnement des canaux

1.4.1 Quelques règles qualitatives pour le positionnement des canaux de refroidissement

L'influence de la position des canaux sur la température en surface du moule peut être qualitativement expliquée dans le cas du refroidissement d'une pièce plane. On suppose que les isothermes sont circulaires autour des canaux de refroidissement (figure 1.23) [57].

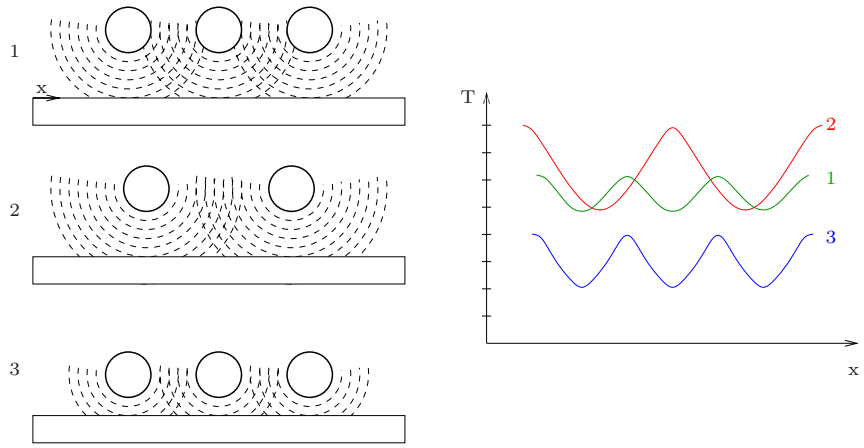


FIG. 1.23 – Effet de la position des canaux sur la température en surface de moule (d'après [57])

Ce schéma permet de retrouver les règles de conception de la bibliographie [20, 56, 58] :
- La distance conseillée entre les canaux et la cavité doit être égale à 2 ou 3 fois le diamètre des canaux. Dans ce cas, on obtient une température uniforme à la surface du moule (cas 1).
- Augmenter la distance entre les canaux (cas 2) entraîne une augmentation de la température moyenne à la surface du moule et une diminution de l'uniformité de température.
- Plus la distance entre la cavité et les canaux est petite (cas 3), plus la température en surface du moule sera faible (la pièce sera donc refroidie plus rapidement) mais les différences de température sont supérieures à la configuration initiale.

Un problème de conception similaire apparaît lors de la conception du refroidissement des moules de fonderie [57]. Des règles simples sont également données pour placer des canaux de refroidissement selon le réfrigérant utilisé. Par exemple, pour un refroidissement par eau et une épaisseur de pièce e_P de 2mm, le diamètre des canaux conseillé est $D_C = 6$ à 8mm, la distance des canaux à la surface de la cavité moulante d_{sc} est de 8 à 10 fois le diamètre et la distance entre canaux d_{cc} est environ égale à d_{sc}.

Selon l'objectif principal et le matériau utilisé, ces règles peuvent être adaptées.
- Pour diminuer le temps de refroidissement, plusieurs options sont possibles :
  - approcher les canaux de la surface du moule,
  - diminuer la distance entre les canaux,
  - diminuer la température du liquide de refroidissement,
- Pour améliorer l'uniformité de température, on pourra :
  - éloigner les canaux de la surface du moule,
  - diminuer la distance entre les canaux,
- Utiliser un matériau de conductivité thermique plus élevée permet d'améliorer l'uniformité et diminuer la température moyenne en limitant le nombre de canaux [20].

1.4.2 Méthodes analytiques de conception des canaux de refroidissement

Des méthodes analytiques ont été proposées pour positionner et dimensionner les canaux de refroidissement par rapport à une pièce plane [18, 20, 59]. Les différentes méthodes proposées reposent sur les mêmes étapes : calcul du temps de refroidissement, bilan thermique des échanges du moule et calcul de la géométrie du système de refroidissement (diamètre et position des canaux) et vérification de l'uniformité de température.

1.4.2.1 Calcul du temps de refroidissement

Un calcul mono-dimensionnel simplifié peut donner une bonne précision du temps de refroidissement. Les pièces injectées sont des pièces minces : l'épaisseur est beaucoup plus faible que les autres dimensions. Lors du refroidissement, on peut donc considérer que le transfert de chaleur n'a lieu que dans la direction de l'épaisseur. On considère alors une plaque infinie d'épaisseur e_P. La température à la surface de la pièce est supposée égale à la température en surface du moule qui est considérée constante et égale à T_M (figure 1.24). A l'instant initial, on considère que la pièce est à une température uniforme égale à la température d'injection T_{inj}.

La température à l'intérieur du polymère vérifie l'équation de la chaleur (1.3) où a_P est la diffusivité thermique du polymère ($a_P = \frac{\lambda_P}{\rho_P C_{PP}}$).

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{a_P}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \forall x \in [0, e_P] \quad [18,\ 59] \tag{1.3}$$

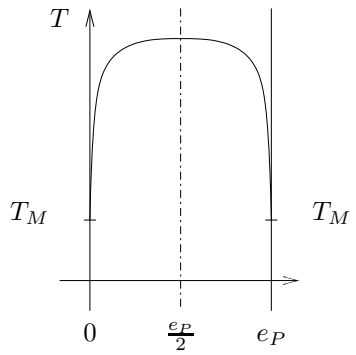


Fig. 1.24 – Représentation schématique de la répartition de température dans le polymère

Agassant [2] rappelle la solution de l'équation (1.3) obtenue par Carslaw et Jaeger [60] :

$$T(x,t) = T_M + \frac{4}{\pi}\left(T_{inj} - T_M\right)\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{(-1)^n}{2n+1}e^{\frac{-a_P(2n+1)^2\pi^2 t}{e_P^2}}\cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{e_P}\right)\right) \tag{1.4}$$

La série converge très vite lorsque $\frac{a_P t}{e_P^2}$ est grand (en pratique la solution approchée est très proche de la solution exacte si $\frac{a_P t}{e_P^2} > 0,1$). En se limitant au premier terme de la série, le temps de refroidissement t_{ref} est alors obtenu lorsque la température maximale dans la pièce (en $x = \frac{e_P}{2}$) est inférieure à la température d'éjection T_{ej} :

$$t_{ref} = \frac{e_P^2}{a_P \pi^2} \ln\left(\frac{4}{\pi}\left(\frac{T_{inj} - T_M}{T_{ej} - T_M}\right)\right) \tag{1.5}$$

Pour une diffusivité thermique de $10^{-7}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ et une épaisseur de 2mm, on a $\frac{a_P}{e_P^2} = 0,025$. On peut donc considérer que la solution sera exacte après $t = 4$s.

Si on considère que le temps de refroidissement est atteint lorsque la température moyenne dans la pièce est inférieure à la température d'éjection (critère utilisé en particulier pour des pièces épaisses), on obtient une expression différente du temps de refroidissement :

$$t_{ref} = \frac{e_P^2}{a_P \pi^2} \ln\left(\frac{8}{\pi^2}\left(\frac{T_{inj} - T_M}{T_{ej} - T_M}\right)\right) \tag{1.6}$$

Le temps de refroidissement est calculable de la même manière pour des pièces simples de forme cylindrique, sphérique ou cubique [18]. Pour des hypothèses différentes (en particulier les conditions limites à la surface du moule), les coefficients de l'expression obtenue pour le temps de refroidissement sont légèrement différentes [61].

1.4.2.2 Bilan thermique sur le moule

Le bilan des échanges thermiques avec son environnement permet de déterminer la quantité de chaleur qu'il est nécessaire d'évacuer pendant un cycle à l'aide du système de régulation.

Chaleur apportée par le polymère La quantité de chaleur à évacuer est due à la variation d'enthalpie de la pièce pendant le refroidissement [20, 62]. On note ρ_P la masse volumique du polymère, V_P le volume de la pièce et ΔH la variation d'enthalpie massique entre la température d'injection et la température d'éjection. La quantité de chaleur totale libérée de la pièce Q_P est donc :

$$Q_P = \Delta H \rho_P V_P \tag{1.7}$$

Cette variation d'enthalpie prend en compte la baisse de température de la pièce depuis la température d'injection T_{inj} à la température d'éjection T_{ej} et éventuellement la chaleur due à la solidification (cristallisation partielle du polymère). La quantité de chaleur apportée par le polymère peut donc également s'écrire selon l'équation (1.8) [58] où C_P est la capacité calorifique massique du polymère, Q_{solid} la quantité de chaleur massique apportée par la solidification.

$$Q_P = ((T_{inj} - T_{ej})C_P + Q_{solid})\rho_P V_P \tag{1.8}$$

Échange de chaleur du moule avec son environnement La chaleur apportée par le polymère est évacuée du moule par convection avec le liquide de refroidissement et par des échanges (conductifs, convectifs et radiatifs) avec son environnement [62, 20].

Les échanges par conduction, convection dans l'air et radiation sont souvent négligés [59, 18]. L'équilibre permet donc de déterminer la quantité de chaleur que le liquide de refroidissement doit absorber :

$$Q_F = Q_P \tag{1.9}$$

Fluide caloporteur Le débit volumique de fluide doit permettre d'absorber la chaleur provenant du polymère en évitant une augmentation trop importante de sa température pour assurer un refroidissement identique de toute la pièce. Le débit minimum de fluide D_F peut donc être estimé en fonction de la quantité de chaleur Q_F, de l'augmentation de température autorisée ΔT_F, de la masse volumique ρ_F, de la capacité calorifique massique du fluide C_F et du temps de refroidissement t_{ref} [18, 59] :

$$D_F = \frac{Q_F}{\rho_F C_F \Delta T_F t_{ref}} \tag{1.10}$$

1.4.2.3 Géométrie du système de refroidissement

Diamètre des canaux de refroidissement Le diamètre maximal des canaux doit être choisi de manière à assurer un écoulement turbulent pour le débit volumique D_F. Pour cela, le nombre de Reynolds $Re = \frac{4D_F}{\pi \nu_F D_C}$ doit être suffisamment élevé (typiquement $Re > Re_{min}$ avec $Re_{min} = 3000$). Le diamètre maximal des canaux pour assurer un écoulement turbulent avec le débit F est alors :

$$D_{C_{\max}} = \frac{4D_F}{\pi \nu_F Re_{min}} \tag{1.11}$$

ν_F est la viscosité cinématique du fluide que l'on peut définir à partir de la viscosité dynamique η_F : $\nu_F = \frac{\eta_F}{\rho_F}$.

Coefficient d'échange Le coefficient d'échange par convection h_F avec le fluide de refroidissement peut être calculé à partir du nombre de Nusselt qui est défini par $Nu = \frac{h_F D_C}{\lambda_F}$. De nombreuses corrélations sont disponibles pour déterminer le nombre de Nusselt selon l'état de surface des canaux, l'écoulement (nombre de Reynolds), le fluide (nombre de Prandtl).

Dans le cas d'un écoulement laminaire, on retient $Nu = 4,364$ dans le cas d'un flux à la paroi constant et $Nu = 3,66$ dans le cas d'une température de paroi constante [63].

Dans le cas d'un écoulement turbulent, on note λ_F la conductivité du fluide, Pr le nombre de Prandtl défini par $Pr = \frac{C_F \nu_F \rho_F}{\lambda_F}$. Une relation valable pour des conduites longues et lisses dans les cas vérifiant $0,7 < Pr < 160$ et $Re > 10000$ utilisée pour des applications en injection et fonderie est donnée par la corrélation de Colburn (équation 1.12) ou de Dittus-Boettler (équation 1.13) [64].

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{\frac{1}{3}} \tag{1.12}$$

$$Nu = 0,023 Re^{0,8} Pr^{n} \text{ avec } \begin{cases} n = 0,3 \text{ pour le refroidissement} \\ n = 0,4 \text{ pour le chauffage} \end{cases} \tag{1.13}$$

La comparaison des résultats obtenus par simulation numérique en utilisant le coefficient obtenu par la loi de Colburn et des mesures de températures réalisées sur des maquettes représentant un moule de fonderie dans les conditions d'utilisation industrielles ont montré une erreur de 10% environ sur les températures obtenues (mais d'autres hypothèses ont été faites en particulier pour obtenir le flux de chauffage du moule) [64]. D'autres exemples peuvent être obtenus dans les références [18, 20, 58, 59, 63].

Position des canaux On note T_F la température du fluide de refroidissement, T_C est la température à la surface des canaux de refroidissement, Γ_C est la surface des canaux de refroidissement.

La différence de température entre la surface de la cavité moulante et la surface des canaux de refroidissement est due à la conductivité limitée du matériau constitutif du moule λ_M et est fonction de la distance entre la cavité et les canaux L. La densité de flux moyenne à l'intérieur du moule ϕ_M peut donc s'écrire :

$$\phi_M = \frac{\lambda_M}{d_{sc}} (T_M - T_C) \tag{1.14}$$

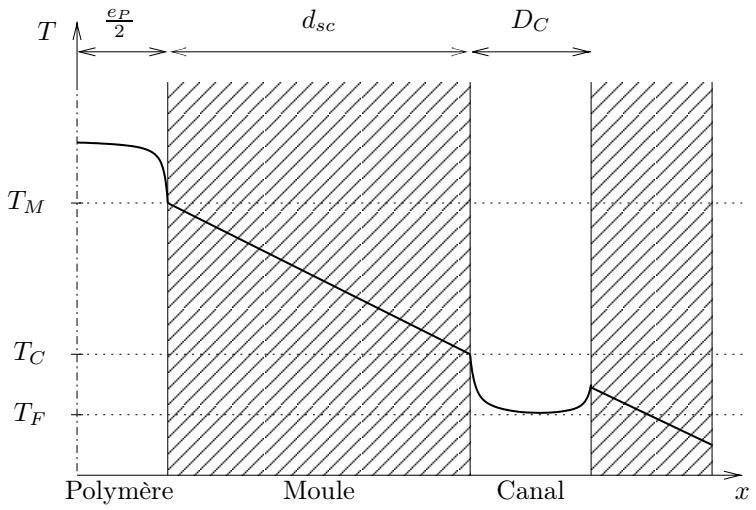


FIG. 1.25 – Représentation schématique du profil de température dans le moule

La densité de flux spécifique à un canal est fonction du rapport entre les surfaces du canal $\Gamma_C = \pi D_C$ et de la cavité moulante en vis à vis $\Gamma_M = d_{cc}$ (sur une section 2D du moule, les surfaces sont assimilées aux périmètres) :

$$\phi_C = \frac{\Gamma_M}{\Gamma_C} h_F \left(T_C - T_F\right) \tag{1.15}$$

Le rapport des surfaces Γ_M et Γ_C est fonction de l'entraxe d_{cc} et du diamètre D_C. La représentation des relations 1.14 et 1.15 sous forme de graphique permet de déterminer des couples (d_{cc}, d_{sc}) solutions. Il est alors possible de choisir la distance entre les canaux et la distance entre la cavité et les canaux pour effectuer le refroidissement.

1.4.2.4 Estimation de l'uniformité du refroidissement

Pour une géométrie donnée, l'erreur de refroidissement peut être estimée simplement. L'erreur de refroidissement peut être définie comme la différence normée entre les densités de flux extraits à la surface du moule [18] :

$$j = \frac{\phi_{\max} - \phi_{\min}}{\bar{\phi}} \tag{1.16}$$

L'erreur peut s'écrire sous la forme :

$$j = 2,4 \times 0,22 Bi \left(\frac{d_{cc}}{d_{sc}}\right)^{2,8k} \tag{1.17}$$

où Bi est le nombre de Biot défini par $Bi = \frac{h_F d_{sc}}{\lambda_M}$ et k est un facteur de forme défini par $k = \ln \frac{d_{cc}}{d_{sc}}$. Le refroidissement est considéré uniforme si $j \leq 10\%$. Dans le cas contraire, il est préférable de modifier la géométrie.

Pour des pièces complexes, la division en zones critiques de refroidissement qui sont analysées séparément (et indépendamment selon les cotés de la pièce) permet de déterminer une géométrie du système de refroidissement en 2D. Des corrections pour des pièces qui ne sont pas planes (ou planes par segments) sont proposées [18].

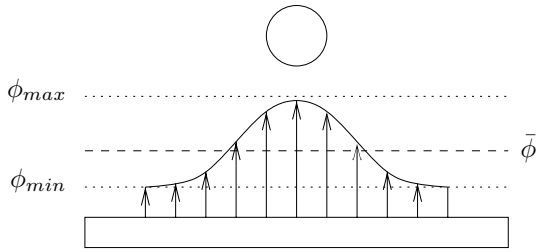


FIG. 1.26 – Représentation schématique de la répartition du flux sortant de la pièce selon la position par rapport au canal de refroidissement (d'après [18])

1.4.2.5 Difficultés de refroidissement

Certaines géométries sont particulièrement délicates à refroidir. Par exemple, les changements d'épaisseur, les angles et nervures. La prise en compte de ces difficultés lors de la conception des pièces peut permettre de réduire les défauts favorisés par ces géométries [1].

La difficulté de refroidissement des coins (figure 1.27) peut simplement s'expliquer par les différences de rapport volume de pièce/surface d'échange qui est plus important dans l'angle que dans le reste de la pièce. A l'extérieur de l'angle, l'élément de volume (1) présente deux faces en vis à vis direct des canaux de refroidissement. A l'intérieur, l'élément de volume (2) ne présente pas de surface d'échange avec le moule. Sur les cotés de la pièce, chaque élément de volume présente une face en contact avec le moule. On peut donc s'attendre à des vitesses de refroidissement différentes entre le coin et les côtés de la pièce et entre les deux faces du coin, le refroidissement le plus lent étant à l'intérieur.

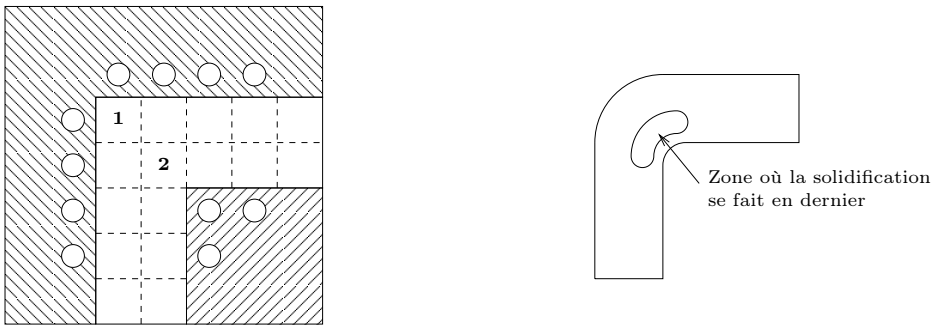


FIG. 1.27 – Problème de refroidissement des pièces angulaires (d'après [18])

Une adaptation du refroidissement dans ces zones devrait donc être envisagée pour éviter une déformation de pièce importante, mais les relations analytiques donnent peu d'indications à ce sujet. La méthode analytique est donc efficace pour des pièces planes et sans difficultés mais n'est pas optimale pour des géométries plus complexes.

1.4.3 Simulations numériques des transferts thermiques lors de l'injection

Les méthodes numériques s'avèrent nécessaires pour simuler le refroidissement de pièces complexes et permettent en particulier d'obtenir les temps de refroidissement et les distributions de températures dans la pièce.

On peut distinguer deux stratégies principales pour les simulations numériques des transferts thermiques dans le refroidissement, selon que l'on s'intéresse ou non à l'effet de la géométrie du moule.

1.4.3.1 Simulation de l'évolution de température dans le polymère par un calcul thermo-mécanique

Les calculs peuvent être réalisés avec précision dans le polymère de manière à prendre en compte les phénomènes mécaniques (écoulement, variations de pression). Dans ce cas, des hypothèses très simplificatrices sont utilisées pour écrire les conditions aux limites sur la surface de la pièce en contact avec le moule.

Température de surface de pièce constante et uniforme La solution la plus simple consiste à utiliser une température de moule uniforme et constante et de considérer que la surface du polymère passe instantanément à cette température lorsque le polymère entre en contact avec le moule. Dans ce cas, la géométrie du système de refroidissement et les paramètres de la régulation (autres que la température) n'ont pas d'influence.

Le module de calcul de remplissage MPI/Flow de Moldflow® utilise cette hypothèse. Le calcul d'écoulement thermo-mécanique permet de déterminer l'évolution de température dans l'épaisseur de la pièce en supposant une température à la surface égale à la température du liquide de refroidissement. Le calcul du remplissage est réalisé par la méthode des éléments finis. Seule la conduction thermique dans l'épaisseur de la pièce est considéré, ce qui permet de réaliser le calcul par différences finies 1D.

Chiang [65, 66] et Chiu [67] utilisent cette même méthode pour prendre en compte des variations de propriétés avec la température et la chaleur apportée par la cristallisation des polymères cristallins par l'intermédiaire d'une capacité calorifique massique variable. Le calcul par éléments finis permet également de gérer la pression dans le polymère par l'intermédiaire des informations du diagramme PVT pendant les phases de remplissage, compactage et refroidissement. Ces calculs permettent donc d'obtenir par exemple la répartition de température dans la pièce à la fin du remplissage selon le plan moyen et dans l'épaisseur, la proportion de pièce solidifiée (à la fin du remplissage, pendant le refroidissement). Dubay [68] utilise lui une résolution thermo-mécanique par différences finies 2D dans le polymère en coordonnées cylindriques.

Température de surface de pièce constante mais non uniforme Une deuxième solution, un peu plus précise, consiste à déterminer numériquement la distribution de température moyenne (stationnaire) au cours d'un cycle dans le moule en fonction de la géométrie et d'utiliser cette température comme condition limite pour le calcul dans la pièce. La montée de température du moule au cours des premiers cycles de production et les variations de température lors d'un cycle sont négligées.

Le module de calcul du refroidissement MPI/Cool des logiciels Moldflow® et C-Mold® utilisent par exemple cette hypothèse. Un calcul thermique analytique dans l'épaisseur de la pièce est couplé à un calcul thermique dans le moule et à un calcul d'écoulement dans les canaux de refroidissement. La résolution de ce problème thermique dans le moule est réalisée par la méthode des éléments frontières, ce qui permet de ne mailler que la surface des canaux de refroidissement, en plus du maillage de la pièce nécessaire pour le calcul du remplissage. Le calcul d'écoulement dans les canaux permet de déterminer l'élévation de température entre l'entrée et la sortie du circuit. L'influence de la géométrie et des matériaux constitutifs du moule est donc visible et ces logiciels sont aujourd'hui principalement utilisés pour valider une conception et comparer des possibilités technologiques. L'avantage du logiciel est de pouvoir disposer des répartitions de température à la fin du remplissage pour simuler le refroidissement.

Sridhar [69, 70] par exemple utilise C-Mold® pour intégrer l'effet de la nature du contact entre le moule et le polymère (création d'une lame d'air entre le moule et le polymère lors du refroidissement) et des propriétés thermiques du polymère variables sur l'évolution de températures dans la pièce.

La simulation du refroidissement peut être utilisée pour comparer différentes géométries comme le fait Park [71]. Engelmann [72] compare différents matériaux de moules et d'inserts pour retrouver des tendances expérimentales comme la baisse de la température avec l'augmentation de la conductivité. Les logiciels aujourd'hui ne proposent aucune aide à l'amélioration du refroidissement et les éventuelles modifications de géométrie doivent être décidées par le concepteur du moule selon son expérience.

Pour finir, il est possible de compléter cette analyse thermique du refroidissement par une étude thermo-mécanique de la pièce afin de déterminer les retraits et les contraintes résiduelles apparaissant dans la pièce. Bikas [73], par exemple, utilise C-Mold® pour calculer les différences de température dans le polymère par rapport à la température moyenne et déterminer les facteurs influençant le retrait, les déformations et contraintes résiduelles.

De la même manière, le logiciel Rem3D® permet de calculer les échanges thermiques entre le moule et le polymère pendant tout le cycle. La méthode des éléments finis est utilisée pour résoudre l'équation de la chaleur dans le moule et la pièce. La méthode permet ainsi de simuler les évolutions de température dans le moule et la pièce au cours du temps et d'introduire des relations de contact entre les différents domaines. L'inconvénient de la méthode est la nécessité de réaliser une résolution volumique, ce qui implique le maillage complet du moule et de la pièce (voir par exemple [74]). Toute modification de la géométrie du moule implique donc un gros travail de maillage lors de la mise en données.

1.4.3.2 Simulation des transferts thermiques dans le moule

Dans ce cas, on cherche surtout à représenter les échanges thermiques dans le moule par conduction. La condition limite sur la surface de la cavité moulante (en contact avec le polymère) peut être très simplifiée pour faciliter les calculs. Les modèles de calcul sont thermiques uniquement et sont résolus principalement par deux méthodes : la méthode des éléments finis ou la méthode des éléments frontières.

1.4.3.3 Calculs dans le moule uniquement

La distribution de température moyenne au cours d'un cycle peut facilement être obtenue par un calcul stationnaire. Le polymère n'intervient pas directement dans le calcul mais seulement par l'intermédiaire de la condition aux limites imposée à la surface de la cavité du moule.

Ce calcul est plus facilement réalisé par la méthode des éléments frontières qui présente l'avantage du gain d'une dimension pour le maillage et le calcul, ce qui se traduit par une mise en données facilitée par rapport à la méthode des éléments finis.

Opolski [5], Turng [75] et Matsumoto [76] utilisent cette méthode en 2D pour calculer les répartitions de température dans une section du moule. Zhou [77] utilise cette même méthode pour obtenir les répartitions en 3D de la température du moule. Park [78, 79] propose de plus une modification du calcul pour prendre en compte les canaux de refroidissement par des éléments 1D positionnés sur l'axe au lieu de mailler les cylindres.

Les simples calculs stationnaires 2D et 3D permettent de faire apparaître des différences de refroidissement entre noyau et cavité. La géométrie peut alors être modifiée par l'utilisateur pour tenter d'améliorer le refroidissement [5]. Cette approche ne permet toutefois pas de gérer facilement les effets de géométries de pièces complexes.

1.4.3.4 Calcul couplé avec le polymère

Dans ce cas, la condition aux limites appliquée à la surface de la cavité du moule est obtenue par couplage avec un calcul analytique ou numérique de l'évolution de température dans la pièce pour déterminer la quantité de chaleur à retirer du polymère. Le calcul dans le polymère est alors réalisé de manière simplifiée en négligeant tous les phénomènes thermo-mécaniques. Cette stratégie peut être utilisée pour déterminer la distribution moyenne

de température dans le moule (problème stationnaire) ou les variations de température du moule au cours d'un cycle (problème transitoire).

Calcul stationnaire Dans le cas d'un calcul stationnaire, la méthode des éléments frontières est facile à mettre en place. Chiang [66], Himasekhar [80], Chen [81] et Lu [6] couplent ce calcul avec un calcul par différences finies 1D dans l'épaisseur de la pièce afin de déterminer le flux total extrait du polymère qui pourra être utilisé pour le calcul stationnaire dans le moule.

Pandelidis [82] préfère la méthode des éléments finis dans le moule pour résoudre le problème stationnaire et utiliser les résultats comme condition limite d'un calcul analytique transitoire 1D dans la pièce. Cette stratégie évite un calcul transitoire multidomaine dans le moule et le polymère.

Calcul transitoire Le calcul transitoire complet du refroidissement de la pièce polymère dans le moule n'est jamais réalisé uniquement par la méthode des éléments frontières. Comme pour le calcul stationnaire, la méthode est couplée à un calcul analytique ou par différences finies dans le polymère. Lu et Hu [6, 83] calculent les évolutions transitoires du moule par la méthode de la réciprocité duale. Les évolutions de température dans la pièce sont toutefois approchées en 1D par différences finies.

Au contraire, la méthode des éléments finis peut être utilisée pour déterminer des évolutions transitoires de température dans le moule et les pièces. Tang [84, 85] et Huang [86] réalisent un calcul transitoire thermique 2D par éléments finis dans le moule et le polymère en contact parfait. Manceau [87, 88] réalise le même calcul mais avec un contact réel entre le moule et le polymère. Boillat [89] utilise la méthode des éléments finis pour calculer directement les évolutions de température lors d'un cycle quasi-stationnaire dans le moule en imposant une condition finale (la température du moule doit être égale à la température initiale). Les variations des propriétés et le retrait du polymère sont négligés.

Les concepteurs de moules disposent aujourd'hui de nombreuses méthodes numériques pour simuler les transferts thermiques lors de l'injection et évaluer la qualité du refroidissement. Pour notre étude, nous nous intéresserons principalement au problème de conduction dans le moule afin de déterminer l'effet de la géométrie du système de régulation thermique. Les deux méthodes principalement utilisées dans ce cas sont la méthode des éléments finis et la méthode des éléments frontières. Toutefois, dans une optique d'optimisation du refroidissement (qui peut nécessiter plusieurs calculs avec des géométries différentes), la méthode des éléments frontières semble la plus attrayante par rapport aux autres méthodes puisque la mise en données est facilitée. La méthode est d'ailleurs utilisée couramment pour déterminer des distributions de température stationnaire dans les moules d'injection. Toutefois, la méthode seule ne semble pas avoir été adaptée au calcul transitoire couplé des évolutions de températures dans le moule et la pièce polymère au cours du temps.

Conclusion

Les aspects thermiques représentent des enjeux importants pour la production par injection puis qu'ils ont des conséquences sur la qualité des pièces et la productivité du procédé. La conception de la régulation thermique est pourtant souvent basée sur l'expérience des moulistes ou sur l'utilisation de calculs approchés. L'utilisation des simulations numériques des transferts thermiques lors de l'injection reste une pratique rare chez les industriels.

D'autre part, les évolutions récentes des techniques de fabrication des moules ont des conséquences importantes sur les performances thermiques des moules. En effet, les possibilités géométriques pour réaliser les canaux de refroidissement sont fortement améliorées mais il est parfois nécessaire de prendre en compte des matériaux de conductivité thermique différente de celle rencontrée habituellement. Les règles de conception difficilement applicables à des géométries complexes et des matériaux non conventionnels ne sont donc pas suffisantes si

l'on souhaite concevoir avec précision le système de régulation et tirer avantage des possibilités offertes par les procédés d'outillage rapide.

Les méthodes de simulation numérique utilisées pour estimer l'effet de la géométrie du moule sont la méthode des éléments finis et la méthode des éléments frontières. La méthode des éléments frontières semble la plus adaptée pour réaliser facilement des modifications de la géométrie avec un maillage simplifié. Le calcul couplé des évolutions de températures dans le moule et la pièce n'est toutefois jamais réalisé par la méthode des éléments frontières mais en utilisant une autre méthode pour le polymère (calcul analytique, méthode des différences finies). Dans un premier temps, nous utiliserons donc la méthode des éléments frontières en régime stationnaire pour réaliser l'optimisation. Puis nous tenterons l'adaptation de la méthode par éléments frontières à la résolution de problèmes transitoires couplés dans le moule et le polymère, toujours en vue de l'optimisation du système de refroidissement.

Chapitre 2

Modélisation des transferts thermiques lors de l'injection des thermoplastiques

L'objectif de ce chapitre est d'établir les modèles qui permettront de représenter les phénomènes thermiques intervenant pendant l'injection. Les hypothèses retenues vont être développées pour aboutir aux modèles que nous utiliserons lors de nos calculs. L'objectif n'est pas forcément de modéliser avec précision les phénomènes thermiques ayant lieu mais de pouvoir déterminer les effets des paramètres de la régulation (géométrie des canaux, nature du fluide, température...) sur le refroidissement afin de déterminer une configuration idéale du système de refroidissement.

2.1 Évolutions de la température dans le moule

L'évolution de la température d'un moule d'injection (figure 2.1) en production fait apparaître deux niveaux d'observation :

- un régime transitoire lors de chaque cycle d'injection : on observe une augmentation brutale de la température lorsque le polymère remplit la cavité. La température diminue ensuite jusqu'au cycle suivant alors que la chaleur est évacuée par conduction dans le métal et convection à la surface des canaux de refroidissement (principalement). L'amplitude des variations va dépendre de la diffusivité thermique du métal et de la distance par rapport à la cavité moulante. Plus on s'éloigne de la surface et plus on peut considérer que la température du moule évolue peu pendant le cycle.

- un régime quasi-stationnaire après quelques cycles : la température moyenne du moule au cours d'un cycle se stabilise (à la fin du cycle la température retrouve sa valeur de début du cycle). Un calcul en régime stationnaire permet de déterminer la distribution de température pendant le regime quasi-stationnaire en négligeant les oscillations transitoires de la température.

Pour représenter ces deux régimes, deux modèles ont été utilisés dans ce travail :

- un modèle stationnaire pour déterminer la distribution moyenne de température dans le moule au cours d'un cycle quasi-stationnaire ;

- un modèle transitoire pour déterminer les variations de température dans le moule au cours d'un cycle, la montée en température du moule lors des premiers cycles d'injection et l'évolution de température dans la pièce.

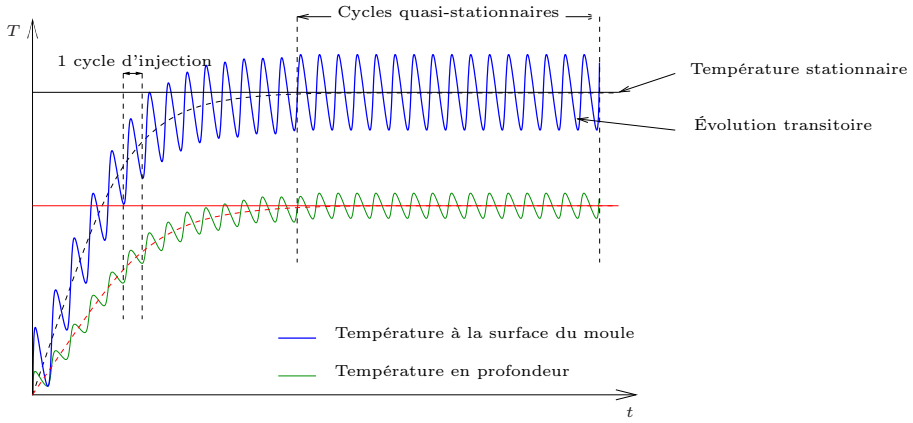


FIG. 2.1 – Évolution schématique de la température d'un moule d'injection au cours de plusieurs cycles (d'après [75, 90])

2.2 Modèle stationnaire

2.2.1 Équation de la chaleur

Le modèle stationnaire permet de déterminer la distribution de température moyenne dans le moule au cours d'un cycle quasi-stationnaire. On ne considère pas dans ce cas les fluctuations de la température au cours du cycle qui sont faibles à partir d'une certaine distance de la surface de la cavité moulante [80].

Les domaines de calcul et leurs frontières sont définis sur la figure 2.2. On note Ω_M le domaine représentant le moule (empreinte), Γ_M la surface de l'empreinte, Γ_C la surface des canaux de refroidissement, Γ_E la surface extérieure de l'empreinte et Σ_{M_1/M_2} l'interface située sur le plan de joint.

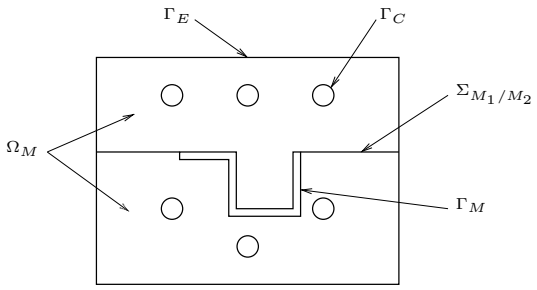


FIG. 2.2 – Définition des domaines et des frontières dans le cas d'un calcul stationnaire

L'équation de la chaleur en régime stationnaire dans le cas où l'on ne considère que la conduction s'écrit [63] :

$$\forall M \in \Omega_M, \quad \vec{\nabla}.\Big(\lambda_M(M,T)\vec{\nabla}T(M)\Big) = 0 \tag{2.1}$$

Dans le cas de moules métalliques, la conductivité thermique λ_M peut être considérée uniforme et constante sur la plage de température d'utilisation (entre 0 et 200°C) : $\lambda(M,T) = \lambda_M$. L'équation de la chaleur s'écrit

donc plus simplement :

$$\forall M \in \Omega_M, \quad \lambda_M \vec{\nabla}^2 T(M) = 0 \tag{2.2}$$

La prise en compte d'une conductivité thermique variable avec la température est toutefois possible pour une résolution par la méthode des éléments frontières. On introduit pour cela la transformée de Kirchoff (équation 2.3) de la température comme le font Caruso [91] et Le Niliot [92]. Le problème se ramène alors à un problème linéaire.

$$\theta = \int_{T_0}^{T} \lambda(T) dT \tag{2.3}$$

2.2.2 Conditions aux limites

Les conditions limites sur les frontières du domaine Ω_M doivent être précisées pour définir de façon unique la solution de l'équation de la chaleur (2.2).

2.2.2.1 Échanges thermiques avec le liquide de refroidissement

La température du fluide de refroidissement vérifie l'équation de diffusion-convection que l'on considère en régime stationnaire. En négligeant les pertes par dissipations visqueuses dans le fluide (la faible viscosité du fluide entraîne un échauffement négligeable), l'équation s'écrit sous la forme (2.4) où $\vec{v}$ est le champ de vitesse du fluide, ρ_F sa masse volumique, C_{PF} sa capacité calorifique massique et λ_F sa conductivité [63].

$$\forall M \in \Omega_F, \quad \rho_F C_{PF} \vec{v}.\vec{\nabla} T(M) = \vec{\nabla}\left(\lambda_F \vec{\nabla} T(M)\right) \tag{2.4}$$

Pour simplifier, on considère que le liquide de refroidissement est un fluide parfait non visqueux. Le champ de vitesse $\vec{v}$ est alors tel que son module v est constant et sa direction perpendiculaire en tout point à la section du canal. Le problème thermique représenté par l'équation (2.4) peut alors être couplé au problème thermique de conduction dans le moule en utilisant les relations de continuité des flux et températures entre le moule et le fluide à la surface des canaux de refroidissement pour obtenir la température du fluide et son évolution le long du canal de refroidissement.

Toutefois, si la vitesse d'écoulement est suffisante et la longueur des canaux faibles, on peut considérer que l'élévation de température le long du canal est négligeable. La température du fluide reste alors constante entre l'entrée et la sortie du circuit de refroidissement. C'est l'hypothèse, utilisée par Himasekhar [80] et Boillat [89] par exemple, que nous allons retenir et qui sera vérifiée expérimentalement. La prise en compte du refroidissement par le fluide peut être alors être réalisée en introduisant une condition de convection à la surface des canaux :

$$\forall M \in \Gamma_C, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h_F \left(T(M) - T_F\right) \tag{2.5}$$

Les corrélations utilisables pour estimer la coefficient d'échange h_F ont été rappelées dans le paragraphe 1.4.2.3. Nous utiliserons la corrélation de Colburn qui donne des résultats satisfaisants.

Enfin, si le coefficient d'échange thermique est suffisant, on peut considérer que la température de surface du canal est égale à la température du fluide (equation 2.6) [89]. Cette hypothèse n'a pas été retenue car elle risque de conduire à une surestimation du flux évacué à la surface des canaux.

$$\forall M \in \Gamma_C, \quad T(M) = T_\infty \tag{2.6}$$

2.2.2.2 Surface de la cavité moulante

Pour représenter la chaleur provenant du polymère, une densité de flux est imposée à la surface de la cavité moulante [80] :

$$\forall M \in \Gamma_M, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = \phi_P \tag{2.7}$$

La valeur de cette densité de flux est calculée à partir du rapport de la quantité de chaleur produite sur le temps de cycle et la surface d'échange entre le moule et la pièce. Ces données peuvent être estimées par un calcul unidimensionnel dans l'épaisseur de la pièce, comme indiqué ci-dessous.

La quantité de chaleur traversant la surface de la cavité pendant un cycle est la somme de la chaleur arrivant pendant le remplissage (obtenue éventuellement par une simulation du remplissage), pendant le refroidissement et pendant que le moule est ouvert. Le temps de cycle est la somme de la durée de ces différentes étapes. Si on ne considère que le refroidissement (les autres étapes étant beaucoup moins longues), la quantité de chaleur sera apportée uniquement par le polymère et le temps de cycle correspondra uniquement à la durée du refroidissement (compactage compris).

Les expressions analytiques du temps de refroidissement t_{ref} et de la quantité de chaleur apportée par le polymère Q_P ont été développées analytiquement dans le paragraphe 1.4.2 et sont rappelées ci-dessous.

$$t_{ref} = \frac{e_P^2}{a_P \pi^2} \ln\left(\frac{8}{\pi^2}\left(\frac{T_{inj} - T_M}{T_{ej} - T_M}\right)\right) \tag{2.8}$$

$$Q_P = ((T_{inj} - T_{ej})C_P + Q_{solid})\rho_P V_P \tag{2.9}$$

La densité de flux appliquée à la surface de la cavité moulante peut donc s'écrire selon l'expression suivante où Γ_M est la surface de la cavité moulante.

$$\phi_P = \frac{Q_P}{t_{ref}\Gamma_M} \tag{2.10}$$

Le flux de chaleur imposé étant fonction de la température du moule, plusieurs itérations peuvent être nécessaires jusqu'à stabilisation de la température de moule obtenue, de la quantité de chaleur extraite et du temps de refroidissement selon le principe indiqué sur la figure 2.3.

Matsumoto [76] propose de prendre en compte la chaleur apportée par le polymère en introduisant un coefficient d'échange et une température de contact (formulation (2.11) équivalente à de la convection). Cette formulation permet d'obtenir un flux variable à la surface de la cavité moulante : celui-ci est plus important dans les zones froides du moule.

$$\forall M \in \Gamma_M, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h_P\left(T(M) - T_P\right) \tag{2.11}$$

Toutefois, des difficultés apparaissent pour déterminer les paramètres h_P et T_P : h_P peut être choisi comme l'inverse de la résistance de contact entre le moule et le polymère (paragraphe 2.3.2) mais T_P reste inconnue. L'hypothèse d'une densité de flux imposée uniformément est donc retenue comme condition aux limites à la surface de la cavité moulante.

2.2.2.3 Interface au plan de joint

Concept de résistance thermique de contact Le profil de température à l'interface entre deux solides en contact présente en pratique une zone hétérogène (due aux aspérités et au milieu interstitiel) dans laquelle la température subit de fortes variations.

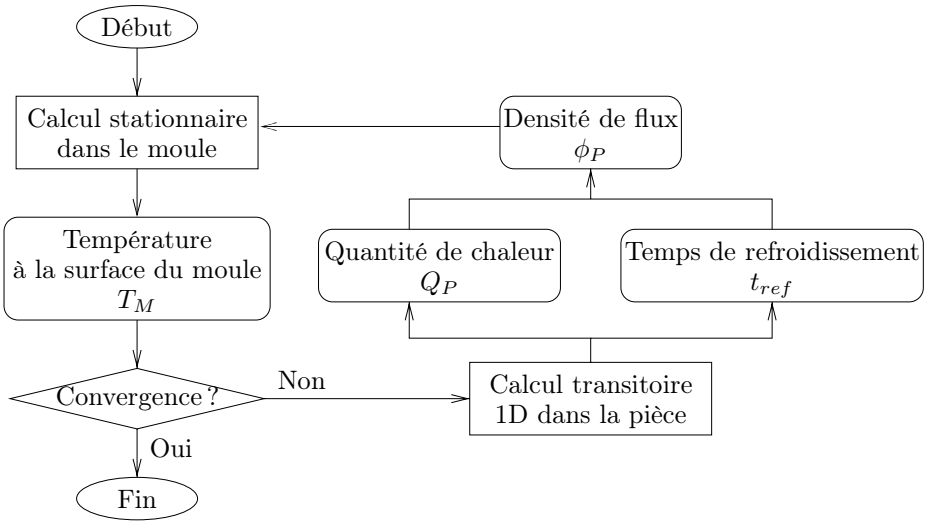


FIG. 2.3 – Principe du couplage entre le calcul stationnaire dans le moule et le calcul transitoire dans la pièce

Pour modéliser ce phénomène, le principe de résistance thermique de contact est utilisé [63]. On suppose que les champs thermiques se prolongent dans les milieux jusqu'à l'interface $\Sigma_{1/2}$ sans être perturbés et on introduit une discontinuité des températures ΔT au niveau du plan de contact pour représenter la variation de température (figure 2.4). Les flux thermiques sont bien sûr conservés de part et d'autre de l'interface.

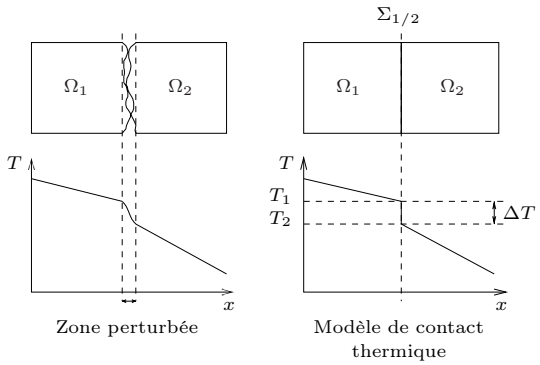


FIG. 2.4 – Modélisation du contact thermique entre deux domaines

En notant $\mathcal{R}$ la résistance thermique à l'interface, les conditions de contact à l'interface s'écrivent :

$$\forall M \in \Sigma_{1/2}, \quad \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1 . \vec{n_1} = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2 . \vec{n_2} \\ T_1 - T_2 = -\lambda_1 \mathcal{R} \vec{\nabla} T_1 . \vec{n_1} \end{cases} \tag{2.12}$$

Une résistance thermique de contact nulle correspond à un contact parfait. Dans ce cas, on a égalité des températures à l'interface :

$$\forall M \in \Sigma_{1/2}, \quad \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1 . \vec{n_1} = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2 . \vec{n_2} \\ T_1 = T_2 \end{cases} \tag{2.13}$$

Contact moule/moule sur le plan de joint Au niveau du plan de joint, on introduit les relations de continuité données par l'équation (2.12). Manceau [87] suggère des valeurs de résistance thermique de contact entre deux éléments de moule de l'ordre de 10^{-5}m^2.K.W^{-1} lorsque le moule est fermé et verrouillé et de 10^{-4}m^2.K.W^{-1} au moment de l'ouverture. Ces valeurs sont en accord avec les valeurs trouvées dans la littérature pour le contact de solides en acier [63].

2.2.2.4 Surface extérieure du moule

La surface extérieure du moule est soumise à des échanges par convection et rayonnement avec l'air ambiant et contact avec les autres éléments de la presse (en particulier la carcasse du moule). La condition de convection avec l'air s'écrit :

$$\forall M \in \Gamma_E, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h_{air}\left(T(M) - T_{air}\right) \tag{2.14}$$

Le coefficient d'échange h_{air} est connu pour quelques géométries simples mais reste très faible dans le cas d'une convection naturelle avec l'air (de l'ordre de 5 à 30W.m^{-2}.K^{-1} [63]).

La condition de rayonnement s'écrit selon l'équation (2.15) où ϵ_M est l'émissivité du moule (de l'ordre de 0,2 pour un acier) et σ_B la constante de Boltzmann.

$$\forall M \in \Gamma_E, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = \epsilon_M \sigma_B \left(T(M)^4 - T_{air}^4\right) \tag{2.15}$$

Pour les températures atteintes par la surface extérieure d'un moule d'injection (100°C maximum lors des moulages effectués), les densités de flux obtenues sont très faibles. Les flux correspondants seront donc inférieurs aux flux convectifs à la surface des canaux de refroidissement, même pour une surface extérieure plus grande que la surface totale des canaux. Dans la pratique, la majorité de la chaleur pénétrant dans le moule peut être évacuée par le système de refroidissement.

Dans ce travail, on va donc choisir de négliger les échanges du moule avec l'air ambiant et considérer que la surface extérieure est isolée (équation 2.16). Cette hypothèse est souvent utilisée dans la littérature (par exemple par Boillat [89]), et permet en particulier dans le cas d'une résolution par la méthode des éléments frontières de considérer cette surface adiabatique infinie et de ne pas la modéliser [80].

$$\forall M \in \Gamma_E, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = 0 \tag{2.16}$$

2.2.2.5 Moule stratifié

Dans le cas d'un moule stratifié, une couche supplémentaire de brasure ou de colle est ajoutée entre les strates métalliques. Pour prendre en compte l'effet de cette nouvelle couche, on a le choix entre les deux possibilités représentées sur la figure 2.5 :

- introduire un domaine supplémentaire représentant la couche intermédiaire ;
- utiliser une résistance thermique de contact pour prendre en compte les effets de la conduction dans ce milieu.

La première solution présente l'avantage de permettre une conduction dans la couche de brasure ou de colle qui n'est pas forcément perpendiculaire à l'interface. Le désavantage est la nécessité d'introduire un nouveau domaine d'épaisseur très limitée (de l'ordre de la dizaine de microns dans le cas de la brasure et du dixième de millimètres pour la colle).

L'équation de la chaleur (2.17) doit être vérifiée dans ce nouveau domaine et on introduit des relations de continuité pour chaque interface strate/brasure ou strate/colle (2.18). Comme pour le moule, on considère que la conductivité est uniforme et constante avec la température.

$$\forall M \in \Omega_B, \quad \vec{\nabla}^2 T(M) = 0 \tag{2.17}$$

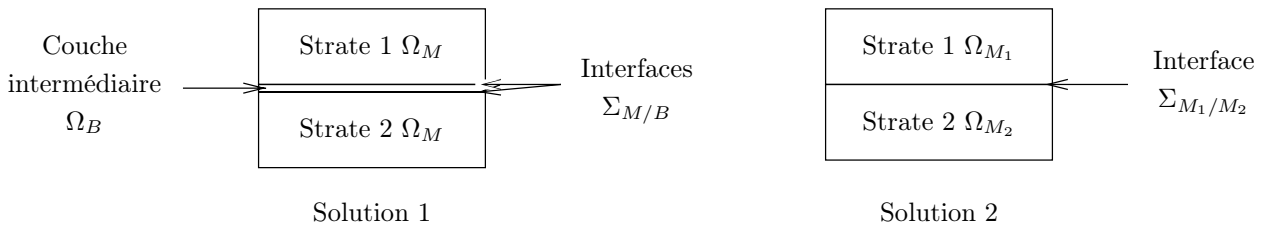


FIG. 2.5 – Possibilités de prise en compte de la stratification dans le modèle thermique

$$\forall M \in \Sigma_{M/B}, \quad \begin{cases} -\lambda_M \vec{\nabla} T_M . \vec{n_M} = \lambda_B \vec{\nabla} T_B . \vec{n_B} \\ T_M = T_B \end{cases} \tag{2.18}$$

La deuxième solution néglige toute conduction dans les plans parallèles à l'interface mais ne nécessite pas de prendre en compte un nouveau domaine. On utilise les relations de continuité à l'interface en introduisant une résistance de l'assemblage $\mathcal{R}_{M_1/M_2}$:

$$\forall M \in \Sigma_{M_1/M_2}, \quad \begin{cases} -\lambda_{M_1} \vec{\nabla} T_1 . \vec{n_1} = \lambda_{M_2} \vec{\nabla} T_2 . \vec{n_2} \\ T_1 - T_2 = -\lambda_{M_1} \mathcal{R}_{M_1/M_2} \vec{\nabla} T_1 . \vec{n_1} \end{cases} \tag{2.19}$$

La résistance thermique peut être estimée à partir des propriétés thermiques de la couche intermédiaire. Pour un élément constituant (par exemple la colle), la résistance pourra être choisie comme le rapport de l'épaisseur de la couche e sur la conductivité thermique λ.

$$\mathcal{R}_{M_1/M_2} = \frac{e}{\lambda} \tag{2.20}$$

Ainsi pour une conductivité de 0,6W.m^{-1}.K^{-1} et une épaisseur de 0,3mm, la résistance sera environ 5.10^{-4}m^2.K.W^{-1}. Pour une conductivité de 1,8W.m^{-1}.K^{-1} et une épaisseur de 0,1mm, la résistance sera environ 5,5.10^{-5}m^2.K.W^{-1}.

Dans le cas d'un mélange de plusieurs composants (pour un alliage de brasage par exemple) dont on ne connaît pas la conductivité globale, un encadrement de la conductivité peut être obtenu en considérant les deux configurations extrêmes : assemblage parallèle ou série. On note γ la fraction volumique et λ la conductivité thermique de chaque constituant.

$$\mathcal{R}^{série}_{M_1/M_2} = e\left(\frac{\gamma_1}{\lambda_1} + \frac{\gamma_2}{\lambda_2}\right) \text{ et } \frac{1}{\mathcal{R}^{parallèle}_{M_1/M_2}} = \frac{1}{e}\left(\gamma_1\lambda_1 + \gamma_2\lambda_2\right) \tag{2.21}$$

La résistance obtenue dans le cas d'un alliage argent-cuivre dont les propriétés sont rappelées dans le tableau 2.1 est de l'ordre de 2,4.10^{-8}m^2.K.W^{-1} pour une épaisseur de 0,1μm et 7,1.10^{-8}m^2.K.W^{-1} pour une épaisseur de 0,3μm.

Nous utiliserons la deuxième solution, beaucoup plus facile à mettre en œuvre et qui permet d'éviter d'avoir des domaines de très faible épaisseur.

2.3 Modèle transitoire

2.3.1 Équation de la chaleur

Pour le calcul des évolutions de température en régime transitoire sur plusieurs cycles, on peut considérer que les étapes d'injection et d'éjection sont très rapides et n'ont pas beaucoup d'influence sur le refroidisse-

	Fraction massique m [-]	**Masse volumique** ρ [kg.m^{-3}]	**Fraction volumique** γ [-]	**Conductivité thermique** λ [W.m^{-1}.K^{-1}]	**Capacité calorifique massique** C_P [J.kg^{-1}.K^{-1}]
Argent	0,72	10 500	0,687	429	235
Cuivre	0,28	8 960	0,313	401	385

TAB. 2.1 – Propriétés des constituants d'un alliage argent-cuivre utilisé pour le brasage

ment du moule. De plus, on cherche à comparer les capacités du système de refroidissement. On ne va donc simuler que la phase de compactage/refroidissement, les autres étapes étant considérées comme instantanées [89].

Les domaines et frontières sont définis sur la figure 2.6. On considère deux domaines distincts : le moule Ω_M et le polymère Ω_P et on introduit une interface entre eux $\Sigma_{M/P}$. On note λ la conductivité thermique, ρ la masse volumique et C_P la capacité calorifique massique. Les indices M et P se rapportent respectivement au moule et au polymère. Pour chaque cycle n, on désigne respectivement par t_i^n et t_f^n les instants initiaux et finaux du cycle.

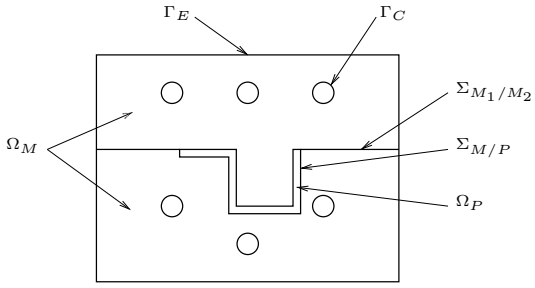


FIG. 2.6 – Définition des domaines et des frontières dans le cas d'un calcul transitoire

Moule L'équation de conduction en régime transitoire s'écrit pour le moule :

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Omega_M,$$
$$\rho_M(M,T) C_{PM}(M,T) \frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \left(\lambda_M(M,T) \vec{\nabla} T(M,t) \right) \quad (2.22)$$

Dans la plage de température dans laquelle les moules d'injection sont utilisés, les propriétés thermiques sont considérées constantes et uniformes, comme proposé par Kenig [93] :

$$\begin{aligned} \lambda_M(M,T) &= \lambda_M \\ \rho_M(M,T) &= \rho_M \\ C_{PM}(M,T) &= C_{PM} \end{aligned} \quad (2.23)$$

L'équation de la chaleur s'écrit donc plus simplement :

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Omega_M, \quad \rho_M C_{PM} \frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \lambda_M \vec{\nabla}^2 T(M,t) \quad (2.24)$$

Polymère Pour le polymère, en se plaçant à la fin du remplissage et en ne considérant que les étapes de maintien et de refroidissement, on peut négliger tous les phénomènes de transport par convection et de dissipation visqueuse. En notant α_P le coefficient de dilatation isobare, P la pression et Q_{solid} la quantité de chaleur due au changement d'état, l'équation de la chaleur pour le polymère s'écrit [94] :

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Omega_P, \quad \rho_P(M,P,T) C_{PP}(M,P,T) \frac{\partial T(M,P,t)}{\partial t} - \alpha_P(M,P,t) T(M,P,t) \frac{\partial P(M,T,t)}{\partial t} = \vec{\nabla}(\lambda_P(M,P,T)\vec{\nabla} T(M,P,t)) + Q_{solid} \quad (2.25)$$

Effet de la pression La prise en compte de l'effet de la pression et des évolutions du volume avec la température et la pression (comme indiquées sur un diagramme PVT) nécessite la réalisation d'un calcul thermo-mécanique. Négliger ces effets fait perdre une précision importante lors du calcul du refroidissement des polymères mais permet de réaliser un calcul uniquement thermique. Nous considérerons donc une évolution isobare du polymère. L'équation transitoire obtenue est donc la suivante :

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Omega_P, \quad \rho_P(M,T) C_{PP}(M,T) \frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \vec{\nabla}\left(\lambda_P(M,T)\vec{\nabla} T(M,t)\right) + Q_{solid} \quad (2.26)$$

Effet de la solidification La distinction entre polymères amorphes et semi-cristallins est importante pour le calcul du refroidissement car la cristallisation est une réaction exothermique et les polymères présentent une enthalpie de fusion. De plus, les polymères semi-cristallins présentent un retrait plus important (la compacité dans l'état cristallin ordonné est supérieure à celle de l'état amorphe).

Sombatsompop [95] a montré par des mesures expérimentales du temps de refroidissement que la réaction exothermique de cristallisation entraîne un refroidissement plus lent de la pièce que si elle n'est pas présente (même si le polymère amorphe possède une conductivité thermique plus faible). La quantité de chaleur apportée lors de la cristallisation des polymères semi-cristallins peut même représenter jusqu'à 40% de la chaleur à évacuer du polymère (PE cristallin à 60%) [93].

La prise en compte de la solidification introduit un terme source dans l'équation de la chaleur ou une capacité calorifique massique variable prenant en compte la chaleur produite (le problème est alors fortement non linéaire à une température voisine de la température de cristallisation). Même si la méthode de la réciprocité duale que nous utiliserons pour la résolution transitoire permet de prendre en compte des sources de chaleur ponctuelles et volumiques, la chaleur produite lors de la solidification ne sera pas considérée dans cette étude pour simplifier la résolution.

Effet de la variation des propriétés thermiques avec la température Les propriétés des polymères présentent des variations qui peuvent être importantes avec la température sur une plage comprise entre la température d'injection (supérieure à la température de transition vitreuse ou de fusion) et la température d'éjection (de l'ordre de la température ambiante) [93]. Les figures 2.7 à 2.10 présentent des résultats de mesures de conductivité et capacité calorifique massique sur un polymère amorphe (ABS) et un polymère semi-cristallin (PP).

Dubay [68] et Sridhar [69] ont montré que la prise en compte des variations des propriétés thermiques avec la température permet d'obtenir une évolution plus réaliste des températures dans le polymère et donc une meilleure estimation du temps de refroidissement calculé. Toutefois, les différences entre les résultats obtenus avec des propriétés constantes et ceux obtenus avec des propriétés variables peuvent être très faibles (figure 2.11). De plus, la prise en compte des propriétés variables rend le problème thermique non linéaire et la résolution généralement beaucoup plus longue et difficile. Pour ces raisons, la dépendance des propriétés thermiques

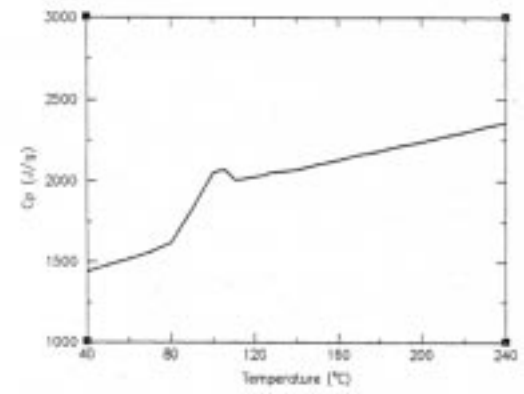


FIG. 2.7 – Évolution de la capacité calorifique massique d'un ABS avec la température [94]

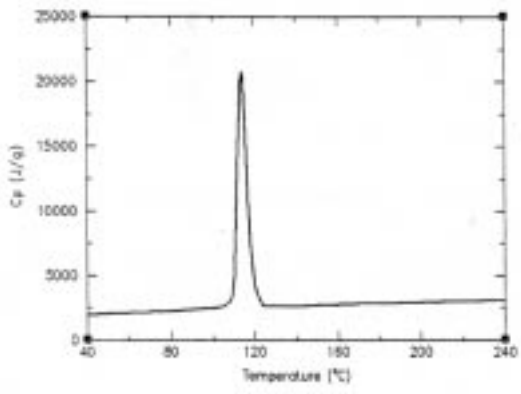


FIG. 2.8 – Évolution de la capacité calorifique massique d'un PP avec la température [94]

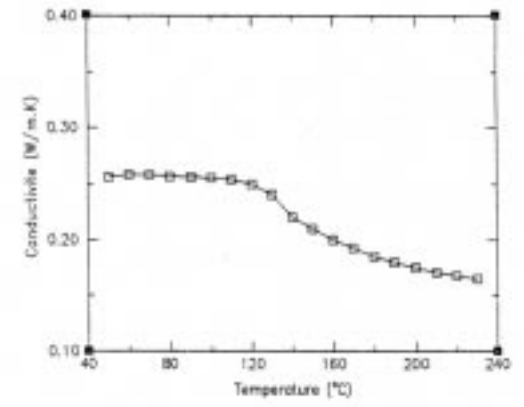


FIG. 2.9 – Évolution de la conductivité thermique d'un ABS avec la température [94]

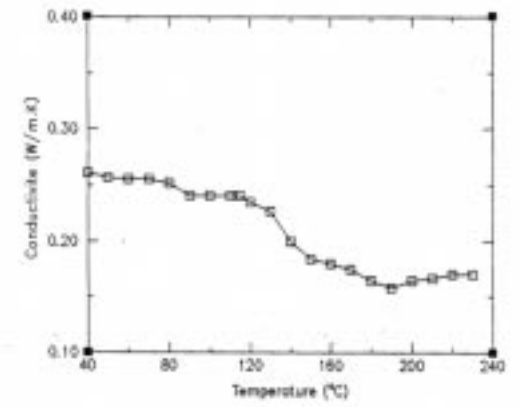


FIG. 2.10 – Évolution de la conductivité thermique d'un PP avec la température [94]

du polymère avec la température est souvent négligée (voir par exemple [89]). La précision obtenue avec des propriétés constantes dépendra du choix de la valeur par rapport à l'instant que l'on cherche à reproduire.

Dans la suite de ce travail, nous considérerons que les propriétés des polymères sont uniformes et constantes avec la température.

$$\begin{aligned} &\lambda_P(M,T) = \lambda_P \\ &\rho_P(M,T) = \rho_P \\ &C_{PP}(M,T) = C_{PP} \end{aligned} \tag{2.27}$$

En considérant toutes ces hypothèses, l'équation de la chaleur dans le polymère se met finalement sous la forme suivante :

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Omega_P, \quad \rho_P C_{PP} \frac{\partial T(M,t)}{\partial t} = \lambda_P \vec{\nabla}^2 T(M,t) \tag{2.28}$$

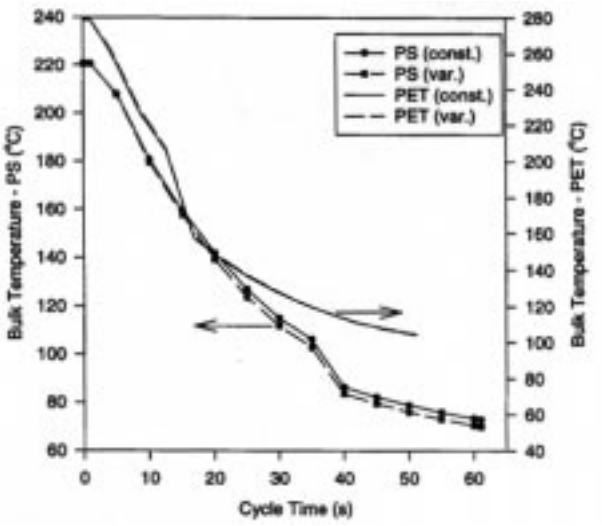


FIG. 2.11 – Effet de la prise en compte de propriétés thermiques variables pour le polymère sur l'évolution de température simulée avec C-MOLD [69]

2.3.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites sur la surface extérieure, la surface des canaux de refroidissement, l'interface au niveau du plan de joint restent identiques au cas stationnaire. Les équations correspondantes sont rappelées ci-dessous.

$$\begin{aligned}
&\forall n = 1,2\cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Gamma_E, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M,t) = 0 \\
&\forall n = 1,2\cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Gamma_C, \quad -\lambda_M \vec{\nabla} T(M,t) = h_F(T(M,t) - T_F) \\
&\forall n = 1,2\cdots N, \quad \forall t \in [t_i^n, t_f^n], \quad \forall M \in \Sigma_{M_1/M_2}, \quad \begin{cases} -\lambda_{M_1} \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} = \lambda_{M_2} \vec{\nabla} T_2.\vec{n_2} \\ \mathcal{R}_{M_1/M_2}\,(T_1 - T_2) = -\lambda_{M_1} \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Il reste à définir la condition à appliquer sur l'interface entre le moule et le polymère. On introduit donc une condition de contact entre le moule et le polymère sous la forme de l'équation (2.30). La difficulté est de déterminer la valeur de la résistance thermique utilisée.

$$\forall M \in \Sigma_{M/P}, \begin{cases} -\lambda_M \vec{\nabla} T_M.\vec{n_M} = \lambda_P \vec{\nabla} T_P.\vec{n_P} \\ T_M - T_P = -\lambda_M \mathcal{R}_{M/P} \vec{\nabla} T_M.\vec{n_M} \end{cases} \tag{2.30}$$

Intérêt de considérer un contact non parfait La prise en compte des conditions de contact entre le moule et le polymère dans les modèles de transfert thermique a une grande influence sur les résultats obtenus, en particulier sur l'évolution de température dans la pièce (en surface bien sûr mais aussi dans l'épaisseur de la pièce). Cette influence a été montrée par simulation numérique par Sridhar [96] (figures 2.12 et 2.13) : pour une valeur de résistance passant de 4.10^{-5} à 10^{-3}m^2.K.W^{-1}, le temps de refroidissement d'une pièce de 2mm augmente de 15%. D'autres simulations numériques réalisées par Yu [97] ont montré que la résistance thermique de contact entre le moule et le polymère a un effet quasiment linéaire sur le temps de refroidissement.

Mesures et calculs des valeurs de résistance thermique La résistance thermique de contact entre le moule et le polymère peut être calculée à partir de résultats expérimentaux (évolution de la température en surface de la pièce et mesures de flux) et d'un modèle transitoire inverse [97, 98, 99]. Les résultats montrent

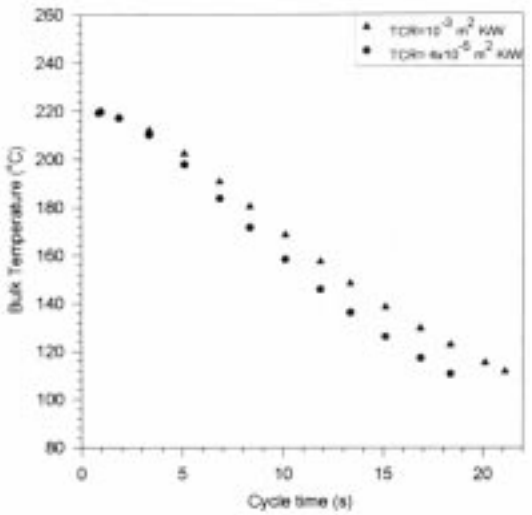


FIG. 2.12 – Effet de la résistance thermique de contact à l'interface moule/polymère sur la température simulée au centre de la piece [96]

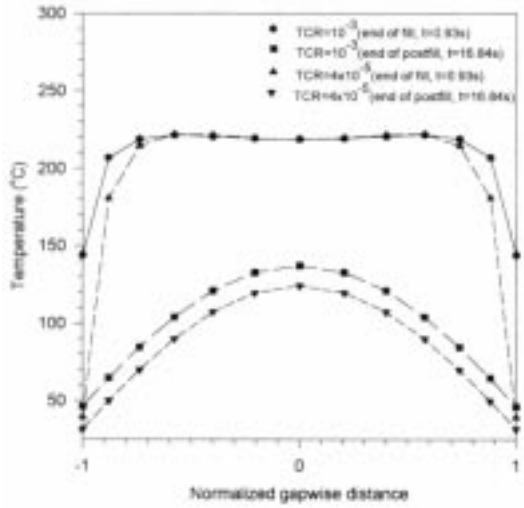


FIG. 2.13 – Effet de la résistance thermique de contact à l'interface moule/polymère sur le profil de température simulé dans l'épaisseur de la piece [96]

que la valeur de la résistance n'est pas constante au cours du cycle d'injection. On distingue typiquement deux phases :

- pendant le maintien, le moule et le polymère sont en contact physique ;
- pendant le refroidissement, le polymère se décolle de la cavité moulante sous l'effet du retrait thermique.

Outre les propriétés des matériaux en contact, le facteur influençant la valeur de la résistance thermique de contact lors du maintien est principalement la pression de contact. Tant que le contact est maintenu, la pression diminue mais reste non nulle, on constate une augmentation progressive de la résistance (figure 2.14). Cette évolution est aussi gouvernée par la rugosité du moule qui définit la surface apparente de contact (figure 2.15). Avant décollement du polymère, la résistance thermique entre un moule en acier et le polymère est de l'ordre de 10^{-4}m^2.K.W^{-1} [99].

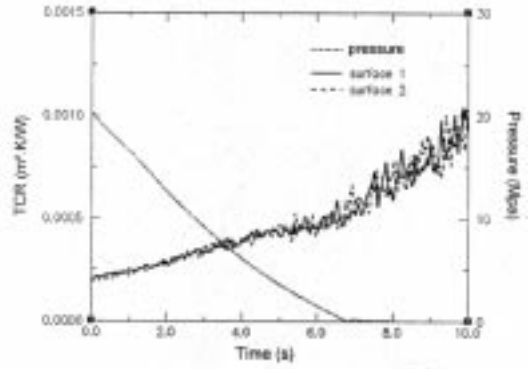


FIG. 2.14 – Évolution de la pression et de la résistance thermique de contact sur les deux faces de la pièce pendant le refroidissement [99]

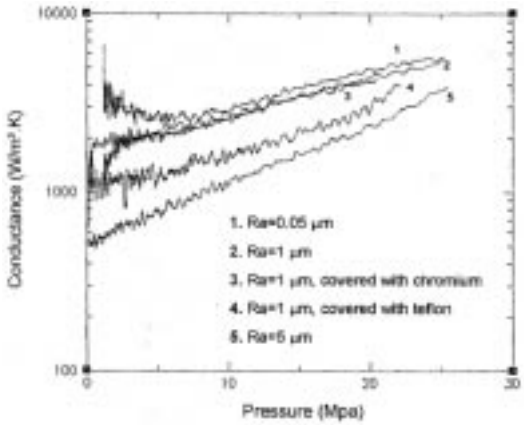


FIG. 2.15 – Effet de la rugosité du moule sur la conductance à l'interface moule/polymère [99]

Le retrait du polymère lors du refroidissement entraîne la création d'une lame d'air entre le moule et le polymère. Le transfert thermique est alors fortement perturbé à la surface du polymère. Pour prendre en compte ce phénomène, on introduit une résistance correspondant à la conduction thermique dans le milieu intermédiaire. Une estimation de cette résistance est obtenue par le rapport de la conductivité thermique de l'air λ_{air} sur l'épaisseur de la lame d'air e_{air} [94, 100]. L'épaisseur de la pièce va bien sûr jouer un rôle important puisque la pression diminue plus rapidement et le retrait est plus grand. Cet effet est visible sur la figure 2.16 qui représente la résistance thermique de contact (TCR) et la pression à l'intérieur de la cavité (ICP) pour trois épaisseurs de pièces (cas E 2mm, cas F 3mm et cas G 4mm). Les valeurs communément retenues [97, 87, 100] de la résistance thermique due à la lame d'air après le décollement du polymère sont de l'ordre de 10^{-3}m^2.K.W^{-1}.

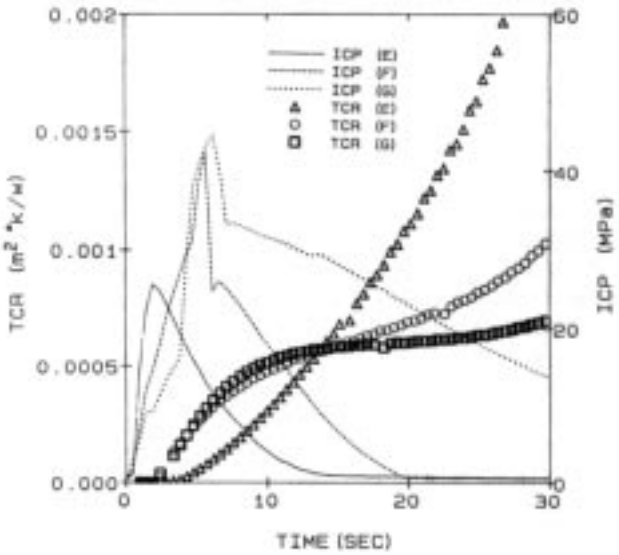


FIG. 2.16 – Évolution de la pression dans le polymère et de la résistance thermique de contact à l'interface moule/polymère [97]

Finalement, la résistance totale peut s'écrire comme la somme d'une résistance variable avec la pression $\mathcal{R}(P)$ et d'une résistance due à la création d'une lame d'air entre les deux surfaces en contact $\frac{e_{air}}{\lambda_{air}}$.

L'utilisation du modèle de résistance thermique précédent oblige à déterminer le retrait du polymère, la pression dans le polymère et à l'interface. Un modèle thermo-mécanique intégrant l'équation d'état $f(P, V, T) = 0$ est donc nécessaire pour obtenir l'évolution de ces paramètres. Pour des raisons de simplicité et toujours dans l'optique d'une comparaison des géométries de moule, nous choisirons de négliger les évolutions de la résistance thermique entre le moule et le polymère au cours du cycle d'injection.

Un encadrement des résultats pourra être obtenu en réalisant deux calculs avec une résistance correspondant au maintien et une résistance correspondant au refroidissement [87]. La résistance faible permet d'obtenir des températures simulées proches des températures expérimentales au début du cycle alors que le résistance élevée conduit à des températures proches des résultats expérimentaux en fin de cycle.

2.3.3 Conditions initiales

Polymère On considère le remplissage suffisamment rapide pour négliger le refroidissement du polymère pendant le remplissage. Cette hypothèse est assez forte car, en pratique, on constate une diminution très rapide

de la température en surface de la pièce. Toutefois, la diffusivité du polymère étant très faible, l'épaisseur de la partie froide reste très faible pendant la durée du remplissage et celui-ci étant de courte durée, la quantité totale de chaleur perdue pendant le remplissage est souvent faible.

On choisit également de négliger l'auto-échauffement du polymère pendant le remplissage qui ne cause souvent qu'une faible élévation de la température (voir par exemple [67] qui simule l'évolution de température lors du remplissage d'un disque en polypropylène).

Ces deux hypothèses permettent de supposer que la température initiale de la pièce est uniforme égale à la température d'injection (équation 2.31) et de ne pas considérer la phase de remplissage. C'est l'hypothèse utilisée dans la plupart des calculs destinés à une conception de canaux de refroidissement [68].

$$\forall n = 1, 2 \cdots N, \quad \forall M \in \Omega_P, \quad T(M, t_i^n) = T_{inj} \tag{2.31}$$

Si l'on souhaite obtenir une évolution plus précise de la température dans l'épaisseur de la pièce, on pourra utiliser comme condition initiale la température obtenue par un calcul thermo-mécanique du remplissage [80].

Moule Avant de mouler la première pièce, on considère que le système de régulation thermique a tourné suffisamment longtemps pour que le moule soit entièrement à la température du liquide de refroidissement ou chauffage.

Pour les cycles suivants, la température initiale est égale à la température obtenue en fin du cycle précédent :

$$\forall M \in \Omega_M, \quad \left\{ \begin{array}{c} T(M, t_i^1) = T_F \\ \forall n = 2, 3 \cdots N, \quad T(M, t_i^n) = T(M, t_f^{n-1}) \end{array} \right. \tag{2.32}$$

Conclusion

Ce chapitre a permis de déterminer les modèles utilisables pour la simulation des transferts thermiques dans le moule et le polymère à partir de la bibliographie et de détailler les hypothèses retenues. Le récapitulatif des modèles utilisés est en annexe A. Les hypothèses sont réalisées de manière à se ramener à des problèmes thermiques linéaires et à permettre la résolution par le solveur thermique par la méthode des éléments frontières présenté dans le chapitre suivant.

Même si ces modèles simplifiés ne pourront peut-être pas représenter avec précision les distributions et évolutions de température, ils devraient permettre d'identifier les zones chaudes du moule, d'avoir une bonne estimation du temps de refroidissement, y compris pour des pièces non planes et de comparer des systèmes de refroidissement.

Chapitre 3

Calculs thermiques par la méthode des éléments frontières

Plusieurs méthodes numériques sont disponibles dans la littérature pour résoudre les modèles de refroidissement présentés dans le chapitre 2 et ont été appliquées à la résolution des problèmes thermiques dans les moules d'injection (voir chapitre 1) :

- la méthode des différences finies,
- la méthode des éléments finis,
- la méthode des volumes finis,
- la méthode des éléments frontières.

Nous avons retenu la méthode des éléments frontières car elle présente un certain nombre d'avantages en vue d'un couplage avec une méthode d'optimisation :

- la mise en données et la prise en compte de modifications de la géométrie sont plus simples qu'une méthode par éléments finis. Par exemple, le gain d'une dimension pour le calcul permet un remaillage plus aisé [101] ;
- dans certaines conditions, la résolution est plus rapide qu'une méthode par éléments finis :
  - pour les calculs stationnaires, la méthode des éléments frontières peut être plus rapide pour des petits modèles mais l'assemblage des matrices pleines devient très long lorsqu'un grand nombre de nœuds est considéré [102] ;
  - les temps de calcul pour les calculs transitoires sont comparables pour des petits modèles [101] ;
- la résolution sur les frontières uniquement est avantageuse lorsque les résultats sont nécessaires sur la frontière uniquement et pas à l'intérieur des domaines (en particulier pour le calcul de la fonction objectif) ;
- le calcul de sensibilité est possible par différentiation directe de l'équation intégrale ou par la méthode de l'état adjoint (voir chapitre 4).

Cette méthode de résolution a été programmée dans l'environnement Matlab® pour résoudre les problèmes stationnaires linéaires en 2D. La méthode de la réciprocité duale a elle aussi été développée en 2D de manière à résoudre les problèmes transitoires linéaires. Les méthodes de base ont été complétées de manière à résoudre les modèles présentés dans le chapitre précédent, en particulier pour prendre en compte les conditions aux limites en convection et le contact entre plusieurs domaines.

L'objectif de ce chapitre est donc dans un premier temps de détailler les formulations utilisées pour la résolution des problèmes thermiques stationnaires et transitoires. La prise en compte des conditions de contact et des conditions de convection sera alors présentée. Enfin, la méthode de résolution sera validée par comparaison des résultats numériques à des solutions analytiques.

3.1 Méthode des éléments frontières appliquée à la résolution de l'équation de Laplace (problème de potentiel stationnaire)

On cherche à résoudre le problème stationnaire présenté dans le chapitre précédent et qui s'écrit :

$$\begin{cases} \forall M \in \Omega_M,\ \vec{\nabla}^2 T(M) = 0 \\ \forall M \in \Gamma_C,\ \lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h_F\left(T(M) - T_F\right) \\ \forall M \in \Gamma_E,\ \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = 0 \\ \forall M \in \Sigma_{M_1/M_2},\ \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2.\vec{n_2} \\ T_1 - T_2 = \lambda_1 \mathcal{R}_{M_1/M_2} \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} \end{cases} \\ \forall M \in \Gamma_M,\ \lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = \phi_P \end{cases} \tag{3.1}$$

La méthode des éléments frontières ou *boundary element method* (BEM) popularisée par Brebbia [103] permet de résoudre facilement ce type de problèmes. La méthode repose sur :

- l'écriture de l'équation de la chaleur comme une équation intégrale sur les frontières pour tout point du domaine et de sa frontière,
- la discrétisation de la frontière et de l'équation intégrale frontière,
- la résolution de l'équation intégrale frontière discrétisée sur la frontière,
- la résolution de l'équation intégrale frontière à l'intérieur du domaine.

Les détails de la méthode appliquée à des problèmes thermiques ou mécaniques peuvent être obtenus dans les ouvrages de Brebbia [103] ou París [104]. Nous allons ici rappeler les bases de la méthode appliquée à un problème de potentiel stationnaire. Dans un premier temps, on ne considère que les conditions aux limites en température et flux. Les autres types de conditions aux limites sont des combinaisons de ces deux types et seront évoquées par la suite (paragraphe 3.3). On considère d'autre part que le problème est bien posé : $\Gamma_T \cup \Gamma_\phi = \Gamma$ et $\Gamma_T \cap \Gamma_\phi = \emptyset$ (figure 3.1).

Le problème s'écrit donc de manière générale selon l'équation suivante :

$$\forall M \in \Omega, \quad \vec{\nabla}^2 T(M) = 0 \tag{3.2}$$

avec les conditions aux limites :

$$\forall M \in \Gamma_T, \quad T(M) = T_0 \tag{3.3}$$

$$\forall M \in \Gamma_\phi, \quad -\lambda \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = \phi_0 = -\lambda q_0 \tag{3.4}$$

On notera $q = \vec{\nabla} T.\vec{n}$ le gradient de la température selon la normale sortante (et $q^* = \vec{\nabla} T^*.\vec{n}$).

3.1.1 Équation intégrale frontière

Équation intégrale En multipliant l'équation (3.2) par un champ de température virtuel T^* (fonction continue deux fois dérivable et aux dérivées premières et secondes continues) et en intégrant sur le domaine Ω, on a :

$$\int_\Omega \vec{\nabla}^2 T\, T^*\, d\Omega = 0 \tag{3.5}$$

En intégrant par parties et en appliquant le théorème de la divergence, l'équation devient :

$$\int_\Gamma \left(\vec{\nabla} T.\vec{n}\right) T^*\, d\Gamma - \int_\Omega \vec{\nabla} T.\vec{\nabla} T^*\, d\Omega = 0 \tag{3.6}$$

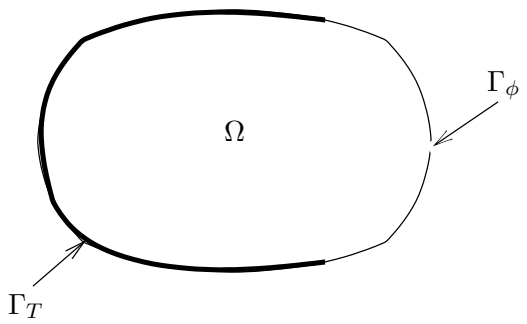


FIG. 3.1 – Définition du domaine Ω et de ses frontières Γ

En intégrant une deuxième fois par parties et en utilisant le théorème de la divergence sur le deuxième terme, on obtient :

$$\int_\Gamma \left(\vec{\nabla} T.\vec{n}\right) T^* \, d\Gamma - \int_\Gamma T \left(\vec{\nabla} T^*.\vec{n}\right) \, d\Gamma + \int_\Omega T \, \vec{\nabla}^2 T^* \, d\Omega = 0 \tag{3.7}$$

Solution fondamentale T^* On choisit T^* comme la solution de l'équation (3.8) où δ_P est la distribution de Dirac au point P situé dans le domaine Ω ou sur sa frontière Γ.

$$\vec{\nabla}^2 T^* + \delta_P = 0 \tag{3.8}$$

La distribution de Dirac au point P vérifie :

$$\int_\Omega T \delta_P \, d\Omega = cT(P) \text{ où } \begin{cases} c = 1 \text{ si } P \in \Omega \\ c = \frac{1}{2} \text{ si } P \in \Gamma \text{ et } \Gamma \text{ est régulière en } P \\ c \text{ est l'angle solide sous lequel } P \text{ voit } \Omega \text{ sinon} \end{cases} \tag{3.9}$$

Pour un milieu isotrope 2D, T^* et q^* sont les fonctions de Green (3.10) où r est la distance du point de collocation P au point M de la frontière considéré ($r = \|\vec{r}\|$ et $\vec{r} = \vec{PM}$). La distance d est l'opposée de la projection de r sur la normale sortante en M ($d = -\vec{r}.\vec{n}$). Les distances r et d sont représentées sur la figure 3.2.

$$T^* = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r} \text{ et } q^* = \vec{\nabla} T^*.\vec{n} = \frac{d}{2\pi r^2} \tag{3.10}$$

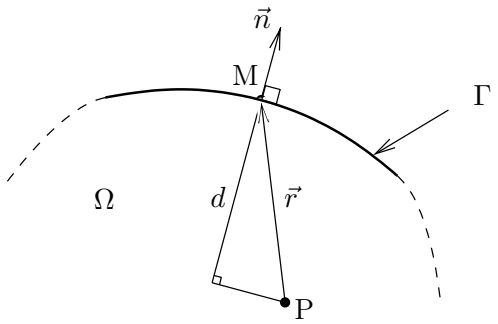


FIG. 3.2 – Définition des distances r et d

Équation intégrale frontière Finalement, en utilisant la définition de la fonction de Dirac δ_P dans l'équation 3.7, on obtient la formulation intégrale sur les frontières :

$$cT(P) + \int_\Gamma T\left(\vec{\nabla}T^*.\vec{n}\right)\, d\Gamma = \int_\Gamma T^*\left(\vec{\nabla}T.\vec{n}\right)\, d\Gamma \tag{3.11}$$

En appliquant l'équation précédente à un point de collocation i (de la frontière ou du domaine), on a :

$$c_iT_i + \int_\Gamma Tq^*\, d\Gamma = \int_\Gamma qT^*\, d\Gamma \tag{3.12}$$

La méthode a donc permis d'exprimer la température en tout point du domaine ou de sa frontière (T_i) en fonction des températures T et des gradients de température q sur la frontière du domaine Γ.

3.1.2 Discrétisation de la frontière

Pour un problème 2D, le calcul des intégrales sur Γ de l'équation (3.12) revient à un calcul d'intégrales 1D sur la frontière. Celle-ci est divisée en éléments qui peuvent être choisis de plusieurs types selon le degré d'interpolation et la continuité entre les éléments :

- éléments constants ;
- éléments linéaires continus ;
- éléments linéaires discontinus ;
- éléments quadratiques.

Dans ce travail, seuls les éléments constants et les deux types d'éléments linéaires ont été utilisés (voir figure 3.3).

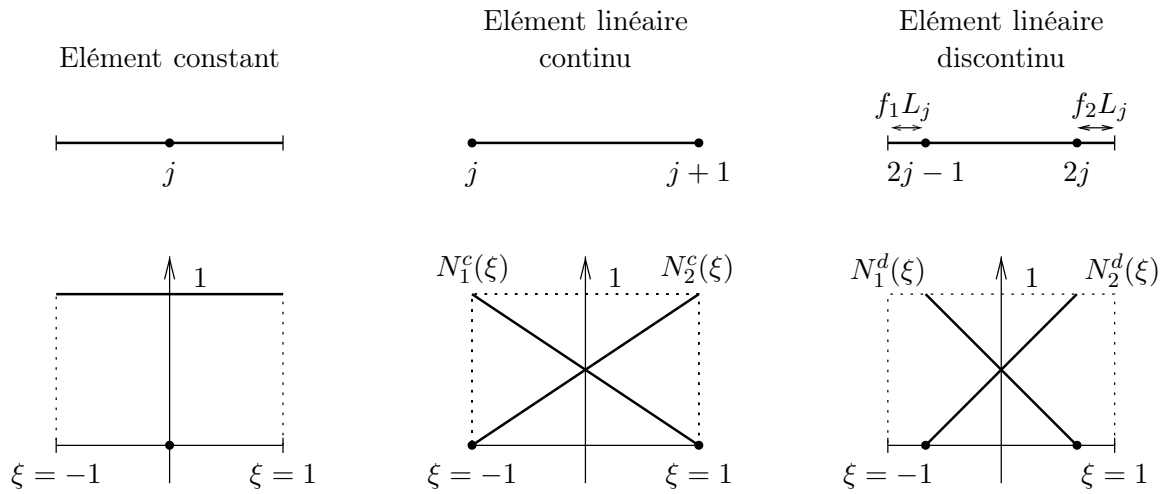


FIG. 3.3 – Position des points de collocation de l'élément j et fonctions d'interpolation selon le degré d'interpolation

L'équation intégrale est dans un premier temps appliquée aux noeuds de la frontière, ce qui permet d'obtenir les solutions en ces points. Dans un second temps, l'équation peut être appliquée à des points situés à l'intérieur du domaine appelés points internes (voir figure 3.4).

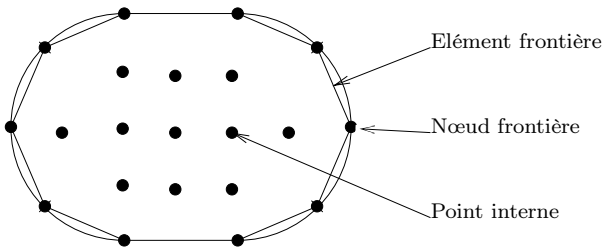


FIG. 3.4 – Exemple de maillage utilisé pour la résolution par la méthode des éléments frontières

Éléments constants Dans le cas des éléments constants, la température T et le gradient de température q sont considérés constants le long de l'élément et égaux à la valeur au point d'intégration situé au centre de l'élément (figure 3.3).

$$\begin{aligned} T(\xi) &= T_j \\ q(\xi) &= q_j \end{aligned} \tag{3.13}$$

Éléments linéaires Pour les éléments linéaires, on utilise une interpolation linéaire entre deux points de l'élément j (figure 3.3) :

- points j et $j+1$ aux extrémités d'un élément linéaire continu :

$$\begin{aligned} T(\xi) &= N_1^c(\xi)T_j + N_2^c(\xi)T_{j+1} \\ q(\xi) &= N_1^c(\xi)q_j + N_2^c(\xi)q_{j+1} \end{aligned} \tag{3.14}$$

- points $2j-1$ et $2j$ à des distances f_1L_j et f_2L_j des extrémités d'un élément linéaire discontinu de longueur L_j :

$$\begin{aligned} T(\xi) &= N_1^d(\xi)T_{2j-1} + N_2^d(\xi)T_{2j} \\ q(\xi) &= N_1^d(\xi)q_{2j-1} + N_2^d(\xi)q_{2j} \end{aligned} \tag{3.15}$$

Les fonctions d'interpolation linéaires sont :

- pour des éléments continus :

$$N_1^c(\xi) = \frac{1}{2}(1-\xi) \text{ et } N_2^c(\xi) = \frac{1}{2}(1+\xi) \tag{3.16}$$

- pour des éléments discontinus :

$$N_1^d(\xi) = \frac{1-2f_2-\xi}{2(1-f_1-f_2)} \text{ et } N_2^d(\xi) = \frac{1-2f_1+\xi}{2(1-f_1-f_2)} \tag{3.17}$$

3.1.3 Calcul des solutions sur la frontière du domaine

On divise donc la frontière en N_e éléments Γ_j constants ou linéaires. L'équation intégrale frontière peut alors se mettre sous la forme discrétisée :

$$c_iT_i + \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} Tq^* d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} qT^* d\Gamma \tag{3.18}$$

En appliquant cette équation à tous les points de collocation i de la frontière, on obtient un système que l'on peut mettre sous la forme :

$$[H]\{T\} = [G]\{q\} \tag{3.19}$$

Les termes des matrices H et G sont obtenus par intégration sur la frontière des solutions fondamentales T^* et q^*. Pour plus de détails sur le passage à la forme matricielle, on pourra se reporter à l'annexe B.

Selon le degré d'interpolation et le type d'éléments choisis, la taille du système linéaire est variable (tableau 3.1) . Il faut noter que contrairement aux matrices obtenues par la méthode des éléments finis, les matrices G et H sont pleines et non symétriques, ce qui rend l'assemblage très long. Ce système d'équations linéaires est résolu par décomposition LU en utilisant la fonction de Matlab® basée sur la librairie LAPACK [105].

	H	**T**	**G**	**q**
Éléments constants	$N_e \times N_e$	N_e	$N_e \times N_e$	N_e
Éléments linéaires continus	$N_e \times N_e$ [a]	N_e	$N_e \times 2N_e$	$2N_e$
Éléments linéaires discontinus	$2N_e \times 2N_e$	$2N_e$	$2N_e \times 2N_e$	$2N_e$

[a] Dans le cas des éléments linéaires continus, la matrice H finale est de taille $N_e \times N_e$ mais nécessite en fait le calcul de $N_e \times 2N_e$ intégrales sur la frontière.

TAB. 3.1 – Tailles des matrices et vecteurs selon le type d'éléments

La figure 3.5 représente l'évolution de la part du temps de résolution sur les frontières qui est utilisée pour l'assemblage des matrices en fonction du nombre de nœuds pour un calcul avec des éléments constants. L'assemblage des matrices pleines est bien l'étape la plus longue et prend entre 65 et 85% du temps de calcul.

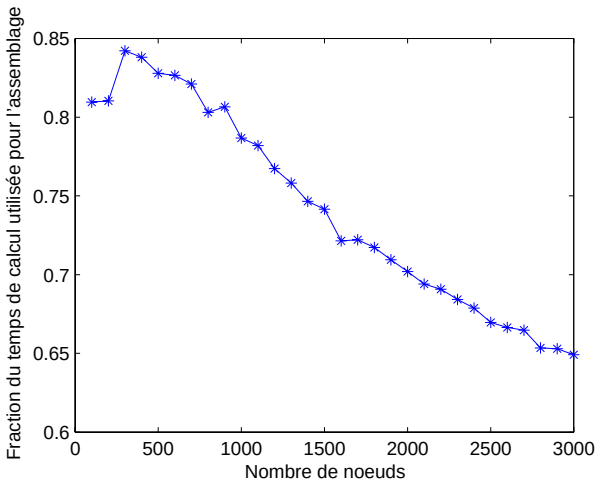


FIG. 3.5 – Évolution de la part du temps de calcul utilisée pour l'assemblage des matrices G et H en fonction du nombre de nœuds

Nous avons vu dans le tableau 3.1 que le nombre d'opérations à effectuer pour l'assemblage des matrices évolue en N_n^2. La résolution du système d'équation à N_n inconnues nécessite de l'ordre de N_n^3 opérations. Le rapport de ces deux ordres de grandeur correspond bien à la courbe de la figure 3.5.

3.1.4 Calcul des solutions à l'intérieur du domaine

Si on applique l'équation intégrale frontière à un point de collocation i situé à l'intérieur du domaine, le facteur de forme c_i prend la valeur 1. On a alors :

$$T_i = \int_\Gamma qT^* \, d\Gamma - \int_\Gamma Tq^* \, d\Gamma \tag{3.20}$$

Après résolution du problème sur les frontières, le calcul des intégrales nécessaires est facilement réalisable en utilisant la même discrétisation de la frontière. Les gradients de température à l'intérieur du domaine sont obtenus par dérivation selon les directions du plan :

$$\begin{aligned} q_{xi} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\int_\Gamma qT^* \, d\Gamma - \int_\Gamma Tq^* \, d\Gamma\right) \\ q_{yi} &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\int_\Gamma qT^* \, d\Gamma - \int_\Gamma Tq^* \, d\Gamma\right) \end{aligned} \tag{3.21}$$

Le détail des formulations pour chaque type d'élément est donné en annexe C. Pour chaque point interne, le calcul de la température ou d'un gradient de température nécessite le calcul de $2N_e$ intégrales pour les éléments constants et $4N_e$ intégrales pour les éléments linéaires.

3.2 Méthodes des éléments frontières et de la réciprocité duale appliquées à la résolution de l'équation de Poisson (problème de potentiel transitoire)

On cherche désormais à résoudre le problème transitoire présenté dans le chapitre précédent. Comme pour le cas stationnaire, on ne considère dans un premier temps que les conditions aux limites en température et flux imposés.

En notant $a = \frac{\lambda}{\rho C_P}$ la diffusivité du matériau, considérée constante, le problème que l'on cherche à résoudre se met sous la forme :

$$\forall M \in \Omega, \quad \vec{\nabla}^2 T(M,t) = \frac{1}{a}\dot{T}(M,t) \tag{3.22}$$

avec les conditions limites

$$\forall M \in \Gamma_T, \quad T(M,t) = T_0 \tag{3.23}$$

$$\forall M \in \Gamma_\phi, \quad -\lambda\vec{\nabla}T(M,t).\vec{n} = \phi_0 = -\lambda q_0 \tag{3.24}$$

et la condition initiale

$$\forall M \in \Omega, \quad T(M, t=0) = T^0(M) \tag{3.25}$$

3.2.1 Différentes méthodes de résolution possible basées sur la méthode des éléments frontières

Plusieurs stratégies sont possibles pour résoudre ce type de problèmes avec la méthode des éléments frontières :

- l'utilisation d'une solution fondamentale fonction du temps et de l'espace,
- la transformée de Laplace ou Fourier pour s'affranchir des évolutions temporelles,
- l'utilisation d'une solution fondamentale fonction de l'espace seulement, les variations temporelles étant approchées séparément.

Les principes, avantages et désavantages des différentes méthodes sont rappelés ci-dessous.

3.2.1.1 Utilisation d'une fonction de Green de l'espace et du temps

Cette méthode est utilisée par exemple par Matzig [106] et Pasquetti [107]. Elle a été appliquée à la résolution de l'équation de la chaleur en régime transitoire dans un moule de fonderie sous pression [108] et de l'équation transitoire de convection-diffusion [109].

En intégrant deux fois par parties et en utilisant le théorème de la divergence, l'équation (3.22) s'écrit :

$$\int_0^\tau \int_\Omega \left(T\vec{\nabla}^2 T^* - \frac{1}{a} T^* \dot{T} \right) d\Omega dt = \int_0^\tau \int_\Gamma \left(Tq^* - qT^* \right) d\Gamma dt \tag{3.26}$$

Avec une intégration par parties sur le temps dans le premier terme, l'équation s'écrit :

$$\int_0^\tau \int_\Omega T \left(\vec{\nabla}^2 T^* + \frac{1}{a} \dot{T}^* \right) d\Omega dt - \left[\int_\Omega \frac{1}{a} T T^* \, d\Omega \right]_0^\tau = \int_0^\tau \int_\Gamma \left(Tq^* - qT^* \right) d\Gamma dt \tag{3.27}$$

La solution fondamentale est choisie comme la fonction de Green solution de l'équation :

$$a\vec{\nabla}^2 T^* + \dot{T}^* = -\delta_P \delta_\tau \text{ avec } \lim_{t \to \tau} T^* = \delta_P \tag{3.28}$$

Les solutions fondamentales en 2D s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} T^* &= \frac{1}{4\pi a \left(\tau - t\right)} \exp\left(\frac{-r^2}{4a\left(\tau - t\right)} \right) \\ q^* &= \frac{d}{8\pi a^2 \left(\tau - t\right)^2} \exp\left(\frac{-r^2}{4a\left(\tau - t\right)} \right) \end{aligned} \tag{3.29}$$

En intégrant la définition de T^*, l'équation intégrale se met sous la forme suivante, où T^0 et T^{*0} représentent les champs de température initiaux.

$$c_i T_i - a \int_\Gamma \int_0^\tau Tq^* \, dt d\Gamma = -a \int_\Gamma \int_0^\tau qT^* \, dt d\Gamma + \int_\Omega T^0 T^{*0} d\Omega \tag{3.30}$$

L'intégration temporelle peut alors être réalisée de deux manières différentes [110, 91] :

- intégration depuis l'état initial jusqu'à l'instant final t_f :

$$c_i T_i - a \int_\Gamma \int_0^{t_f} Tq^* \, dt d\Gamma = -a \int_\Gamma \int_0^{t_f} qT^* \, dt d\Gamma + \int_\Omega T^0 T^{*0} d\Omega \tag{3.31}$$

  Cette stratégie est très coûteuse en temps de calcul (pour chaque instant où la solution est recherchée, il faut intégrer depuis $t = 0$) mais ne nécessite une intégration volumique de la température à l'état initial que si celle ci n'est pas uniforme ou solution du problème homogène correspondant ;
- division de l'échelle de temps et intégration depuis le pas de temps précédent.

$$c_i T_i - a \int_\Gamma \int_{t^n}^{t^{n+1}} Tq^* \, dt d\Gamma = -a \int_\Gamma \int_{t^n}^{t^{n+1}} qT^* \, dt d\Gamma + \int_\Omega T^n T^{*n} d\Omega \tag{3.32}$$

  Cette stratégie est beaucoup moins coûteuse en temps de calcul mais nécessite l'évaluation d'une intégrale volumique à chaque pas de temps, si le champ de température T^n n'est pas uniforme.

Une intégrale volumique est donc à évaluer si le champ de température initial (ou au pas de temps précédent) n'est pas uniforme ou ne correspond pas à un régime stationnaire [91, 111]. Cette intégrale peut être obtenue par intégration sur des éléments du domaine mais la méthode perd alors l'avantage du gain d'une dimension pour le maillage. Une autre méthode consiste à ramener cette intégrale volumique sur la frontière en utilisant par exemple la méthode de la réciprocité multiple [112] ou une interpolation par fonctions radiales semblable à celles utilisées pour la méthode de la réciprocité duale [113].

3.2.1.2 Transformée de Laplace ou de Fourier

Une autre catégorie de méthodes utilise une transformation de Laplace [114, 115, 116] ou de Fourier [117] pour s'affranchir des évolutions temporelles et utiliser une résolution similaire à celle utilisée pour les problèmes stationnaires. Ces méthodes nécessitent toutefois de réaliser numériquement une transformée inverse pour tout instant où la solution est recherchée. Elles sont donc très désavantageuses pour le suivi de l'évolution des températures.

3.2.1.3 Utilisation d'une fonction de Green de l'espace et approximation dans le temps

Si la méthode des éléments frontières est appliquée à l'équation transitoire en utilisant la solution fondamentale de $\vec{\nabla}^2 T^* + \delta_P = 0$, l'équation intégrale obtenue est :

$$c_i T_i + \int_\Gamma T q^* \, d\Gamma + \int_\Omega \frac{1}{a} \dot{T} T^* \, d\Omega = \int_\Gamma q T^* \, d\Gamma \tag{3.33}$$

La méthode des éléments frontières appliquée ainsi ne permet pas de réduire toutes les intégrales à des intégrales surfaciques. Plusieurs solutions sont possibles pour éliminer l'intégrale volumique restante.

Intégration numérique sur le domaine discrétisé Il est possible de calculer les intégrales de volumes en divisant le domaine en sous domaines sur lesquels on effectue une intégration numérique (par exemple par un méthode de Gauss). Là encore, la méthode perd alors l'avantage du gain d'une dimension pour le maillage [118, 119].

La méthode de Monte-Carlo Les points d'intégration peuvent être répartis de façon aléatoire dans le domaine à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo. Bien que simple à mettre en place, la méthode nécessite le calcul en un nombre important de points et serait donc coûteuse en temps de calcul [120].

La méthode de la réciprocité multiple La méthode de la réciprocité multiple proposée par Nowak [121], consiste à transformer l'intégrale volumique en une suite infinie d'intégrales surfaciques en utilisant des intégrations par parties successives. Pour $k = 0, 1, 2 \cdots$, on note : $T^{*(k)} = \vec{\nabla}^2 T^{*(k+1)}$ et $q^{*(k+1)} = \frac{\partial T^{*(k+1)}}{\partial n}$.

L'intégrale sur le volume s'écrit alors comme une suite infinie d'intégrales sur la surface :

$$\int_\Omega \frac{1}{a} \dot{T} T^* d\Omega = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda a^k} \int_\Gamma \left(q^{*(k)} \frac{\partial^k T}{\partial t^k} - T^{*(k)} \frac{\partial^k q}{\partial t^k} \right) d\Gamma \tag{3.34}$$

La méthode nécessite donc un grand nombre d'intégrales sur les frontières pour obtenir les matrices d'influence d'ordre élevé et un calcul analytique préalable des dérivées temporelles et des gradients du terme source $\frac{-1}{a}\dot{T}$. Toutefois, la méthode présente l'avantage de ne pas nécessiter de maillage ou de points à l'intérieur du domaine pour calculer la solution sur les frontières.

La méthode de la réciprocité duale La méthode de la réciprocité duale qui a été associée à la méthode des éléments frontières par Partridge et Brebbia [120] permet entre autre de résoudre les problèmes non linéaires et/ou transitoires de la forme suivante :

$$\forall M \in \Omega, \quad \vec{\nabla}^2 u = b(M, u, t) \tag{3.35}$$

La méthode est basée sur l'utilisation de solutions particulières de l'équation de Poisson. On considère la solution de l'équation (3.22) comme la somme d'une solution générale (de l'équation homogène $\vec{\nabla}^2 T = 0$) et d'une solution particulière $\hat{T}$ telle que $\vec{\nabla}^2 \hat{T} = \frac{1}{a}\dot{T}$.

En utilisant cette définition de $\hat{T}$, il est possible de réduire l'intégrale volumique en intégrales surfaciques par deux intégrations par parties et applications du théorème de la divergence successives :

$$\int_\Omega \frac{1}{a}\dot{T}T^* \, d\Omega = -c_i\hat{T}_i + \int_\Gamma T^*\hat{q} \, d\Gamma - \int_\Gamma q^*\hat{T} \, d\Gamma \tag{3.36}$$

L'équation de la chaleur intégrale s'écrit donc finalement uniquement à l'aide d'intégrales surfaciques :

$$c_iT_i + \int_\Gamma Tq^* \, d\Gamma - \int_\Gamma qT^* \, d\Gamma = c_i\hat{T}_i + \int_\Gamma q^*\hat{T} \, d\Gamma - \int_\Gamma T^*\hat{q} \, d\Gamma \tag{3.37}$$

La difficulté de cette approche est de trouver une solution particulière. La méthode de la réciprocité duale permet de la rechercher sous la forme d'une somme de solutions particulières localisées sur la surface et à l'intérieur du domaine (voir les détails dans le paragraphe suivant).

La méthode a été utilisée pour la résolution de problèmes de potentiel stationnaires non linéaires [122, 123], de l'équation de la chaleur en régime transitoire [124, 125], de problèmes de potentiel transitoires non linéaires [126], de problèmes d'écoulements non linéaires [127]. Plus particulièrement en mise en forme des polymères, cette méthode a déjà été appliquée à la résolution de l'équation de la chaleur dans le moule dans le cas de l'injection [83] ou du RTM [128]. Les transferts thermiques dans le moule sont alors couplés avec une résolution par différences finies dans l'épaisseur de la pièce. Elle a été également appliquée à la résolution couplée de problèmes thermiques et mécaniques (écoulement visqueux dans un mélangeur) [129].

Parmi ces méthodes, la méthode de la réciprocité duale a été retenue pour la résolution des équations présentées dans le chapitre 2. Elle présente l'avantage de permettre la réutilisation des matrices $[H]$ et $[G]$ utilisées pour le calcul stationnaire tout en évitant le maillage complet du domaine. De plus, elle a déjà été utilisée au sein du laboratoire par I. Busuladzic pour la résolution de problèmes d'écoulement non linéaires [130].

3.2.2 Méthode de la réciprocité duale

Dans ce paragraphe, nous présentons les équations de la méthode de la réciprocité duale ou *dual reciprocity method* (DRM) appliquée à un problème thermique transitoire, telles que proposées par Partridge [120] et implantées dans le solveur.

La solution est recherchée sous la forme d'une série de solutions particulières $\hat{T}_k$ localisées sur les N_n nœuds de la frontière et les N_i points internes :

$$\vec{\nabla}^2 T = \sum_{k=1}^{N_n+N_i} \alpha_k \vec{\nabla}^2 \hat{T}_k \tag{3.38}$$

On applique à cette équation la méthode des éléments frontières (double intégration par parties et double application du théorème de la divergence) pour obtenir une équation ne comportant que des intégrales surfaciques :

$$c_iT_i + \int_\Gamma Tq^* \, d\Gamma - \int_\Gamma qT^* \, d\Gamma = \sum_{k=1}^{Nn+Ni} \alpha_k \left(c_i\hat{T}_{ik} + \int_\Gamma \hat{T}_k q^* \, d\Gamma - \int_\Gamma \hat{q}_k T^* \, d\Gamma \right) \tag{3.39}$$

3.2.2.1 Discrétisation spatiale de l'équation intégrale

En discrétisant la frontière en N_e éléments, l'équation intégrale devient :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} T q^* \, d\Gamma - \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} q T^* \, d\Gamma = \sum_{k=1}^{Nn+Ni} \alpha_k \left(c_i \hat{T}_{ik} + \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} \hat{T}_k q^* \, d\Gamma - \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} \hat{q}_k T^* \, d\Gamma \right) \quad (3.40)$$

Cette équation est appliquée à tous les nœuds de la frontière et à tous les points internes pour obtenir un système qui se met sous la forme (3.41). L'obtention de ce système est détaillée en annexe D.

$$[H]\{T\} - [G]\{q\} = \left([H] \left[\hat{T}\right] - [G] \left[\hat{Q}\right] \right) \{\alpha\} \quad (3.41)$$

Toutes les matrices de ce système ne sont pas pleines. La taille des matrices et le nombre de termes à calculer va dépendre du type d'éléments utilisés pour la discrétisation. Les matrices H et G sont calculées par intégration des solutions fondamentales sur les frontières alors que les autres matrices sont calculées sans intégrales. Le nombre de termes à calculer selon le type d'éléments est résumé dans le tableau 3.2.

	Éléments	**H et G**	**T et α**	**q**	**$\hat{\mathbf{T}}$**	**$\hat{\mathbf{Q}}$**
Taille totale	**Constants**	$(N_e+N_i)^2$	N_e+N_i	N_e+N_i	$(N_e+N_i)^2$	$(N_e+N_i)^2$
	Linéaires	$(2N_e+N_i)^2$	$2N_e+N_i$	$2N_e+N_i$	$(2N_e+N_i)^2$	$(2N_e+N_i)^2$
Intégrales frontières	**Constants**	$(N_e+N_i)\times N_e$	-	-	-	-
	Linéaires	$(2N_e+N_i)\times 2N_e$	-	-	-	-
Autres termes	**Constants**	-	N_e+N_i	N_e	$(N_e+N_i)^2$	$N_e\times(N_e+N_i)$
	Linéaires	-	$2N_e+N_i$	$2N_e$	$(2N_e+N_i)^2$	$2N_e\times(2N_e+N_i)$

TAB. 3.2 – Taille des matrices et nombre de termes à calculer selon le type d'éléments utilisés

3.2.2.2 Discrétisation temporelle de l'équation intégrale

Comme $\hat{T}$ représente les solutions particulières de l'équation de la chaleur, le vecteur α peut être calculé par interpolation du second membre de l'équation de la chaleur en utilisant les équations (3.22) et (3.38) :

$$\{\alpha\} = \frac{1}{a} [F]^{-1} \left\{ \dot{T} \right\} \quad (3.42)$$

La matrice F est assemblée par calcul de la valeur d'une fonction d'interpolation f pour tous les points du problème (F est de la même taille que G et H). Le choix de la fonction f déterminera également la forme des solutions particulières $\hat{T}$ et $\hat{Q}$ (voir les détails dans le paragraphe 3.2.3.1).

Le système sous forme matricielle de l'équation (3.41) peut donc s'écrire :

$$[H]\{T\} - [G]\{q\} = \frac{1}{a} \left([H] \left[\hat{T}\right] - [G] \left[\hat{Q}\right] \right) [F]^{-1} \left\{ \dot{T} \right\} \quad (3.43)$$

Le temps est divisé en pas de temps Δt. Les variations temporelles de T et q sont approchées linéairement :

$$\begin{aligned} T &= (1-\theta_T)\, T^n + \theta_T T^{n+1} \\ q &= (1-\theta_q)\, q^n + \theta_q q^{n+1} \end{aligned} \quad (3.44)$$

où T^n et q^n sont les valeurs de t et q au pas de temps n.

La dérivée $\dot{T}$ s'écrit donc :

$$\dot{T} = \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} \tag{3.45}$$

En notant $[C] = \frac{-1}{a}\left([H]\left[\hat{T}\right] - [G]\left[\hat{Q}\right]\right)[F]^{-1}$, le système peut finalement s'écrire :

$$\left(\theta_T\,[H] + \frac{1}{\Delta t}\,[C]\right)\left\{T^{n+1}\right\} - \theta_q\,[G]\left\{q^{n+1}\right\} = -\left((1-\theta_T)\,[H] - \frac{1}{\Delta t}\,[C]\right)\{T^n\} + (1-\theta_q)\,[G]\,\{q^n\} \tag{3.46}$$

D'autres méthodes sont envisageables pour réaliser l'intégration temporelle : formulation des moindres carrés, expansion hermitienne cubique, θ-méthode généralisée avec utilisation de plusieurs pas de temps futurs pour la résolution de problèmes inverses [131, 132, 133].

3.2.2.3 Calcul des gradients de température à l'intérieur du domaine

Les gradients de température aux points internes ne sont pas directement obtenus par résolution du système (3.41). Ces valeurs peuvent facilement être calculées à partir des fonctions d'interpolation et des températures du domaine [134, 135]. La température en tout point peut en effet s'écrire sous la forme $[T] = [F]\{\beta\}$. En dérivant cette équation, on a $\left\{\frac{\partial T}{\partial x}\right\} = \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right]\{\beta\}$.

En regroupant ces deux équations, on a finalement :

$$\left\{\frac{\partial T}{\partial x}\right\} = \left[\frac{\partial F}{\partial x}\right][F]^{-1}\{T\} \quad \text{et de la même manière} \quad \left\{\frac{\partial T}{\partial y}\right\} = \left[\frac{\partial F}{\partial y}\right][F]^{-1}\{T\} \tag{3.47}$$

3.2.3 Choix des paramètres de la méthode

3.2.3.1 Choix de la fonction d'interpolation f

Le choix de la fonction d'interpolation f est en théorie illimité mais f doit être telle que la matrice F soit non-singulière. Les fonctions d'interpolation sont généralement choisies sous la forme de fonctions radiales (fonctions de la distance r). Les plus souvent retenues sont les fonctions linéaires et splines dont le détail est donné ci-dessous et que nous avons intégré dans notre solveur.

Fonction linéaire Cette fonction radiale proposée notamment par Partridge [120] s'écrit simplement :

$$f(r) = 1 + r \tag{3.48}$$

Les solutions particulières correspondantes (vérifiant $\vec{\nabla}^2\hat{T} = f$) sont :

$$\begin{cases} \hat{T}(r) = \dfrac{r^2}{4} + \dfrac{r^3}{9} \\ \hat{q}(r) = \left(r_x\dfrac{\partial x}{\partial n} + r_y\dfrac{\partial y}{\partial n}\right)\left(\dfrac{1}{2} + \dfrac{r}{3}\right) \end{cases} \tag{3.49}$$

Fonction spline de type plaque mince Cette fonction utilisée par exemple par Popov [134] s'écrit :

$$f(r) = r^2 \ln r \tag{3.50}$$

Les solutions particulières correspondant à cette forme sont :

$$\begin{cases} \hat{T}(r) = r^4 \ln\dfrac{r}{16} - \dfrac{r^4}{32} \\ \hat{q}(r) = \left(r_x\dfrac{\partial x}{\partial n} + r_y\dfrac{\partial y}{\partial n}\right)\left(\dfrac{r^2\ln r}{4} - \dfrac{r^2}{16}\right) \end{cases} \tag{3.51}$$

Le choix de la fonction à utiliser va dépendre du type de problème à résoudre et du champ de température que l'on cherche à approcher. Partridge [135] propose des critères de choix de la fonction à utiliser mais montre sur quelques exemples que globalement les résultats sont équivalents pour les fonctions radiales linéaires, cubiques et splines de type plaque mince. L'efficacité des différentes fonctions variera bien sûr en fonction du nombre de points internes et des variations de la température [136].

3.2.3.2 Choix des schémas temporels

Différentes stratégies sont possibles pour le choix des schémas temporels mais pour assurer une stabilité des schémas, θ_T et θ_q sont en général toujours choisis supérieurs à $\frac{1}{2}$.

Partridge [120] recommande d'utiliser les valeurs $\theta_T = \frac{1}{2}$ et $\theta_q = 1$ qui semble donner des résultats satisfaisants [137]. Wrobel [126] suggère lui d'utiliser la même interpolation pour les flux et les températures ($\theta_T = \theta_q$). La combinaison $\theta_T = 1$ et $\theta_q = 1$ permet également d'obtenir des résultats précis [124].

3.2.3.3 Maillage

La méthode de la réciprocité duale permet de s'affranchir du maillage du domaine mais nécessite le calcul des solutions sur un certain nombre de points à l'intérieur du domaine. En plus de l'erreur due à la discrétisation de la frontière, le nombre et la position des points internes ont une influence sur la solution.

Augmenter seulement le nombre de points internes ou le nombre d'éléments n'est généralement pas suffisant. Pour améliorer la précision des solutions, il est nécessaire d'augmenter à la fois le nombre d'éléments et de points internes. Il est recommandé d'avoir une distance entre les éléments et les points internes les plus proches de la frontière de l'ordre de grandeur de la longueur d'un élément [138].

Des méthodes d'analyse d'erreur et de remaillage ont été proposées par Rodriguez [138] pour adapter le maillage des frontières et la répartition (en nombre et position) des points internes. Les répartitions obtenues permettent de ne pas avoir à utiliser des répartitions uniformes très fines des points internes et conduisent toujours à des résultats plus précis que des répartitions aléatoires pour le même nombre de points.

Le choix de tous les paramètres de la méthode dépend fortement du problème à résoudre. Les calculs de validation par rapport à des solutions analytiques (paragraphe 3.5) nous aideront à choisir ces paramètres et à valider nos choix avec la résolution de problèmes proches du refroidissement des polymères lors de l'injection.

3.3 Prise en compte d'autres types de conditions aux limites

Nous avons présenté dans les deux paragraphes précédents la résolution de problèmes ayant des conditions aux limites de type température imposée et flux imposé. Les deux autres types de conditions aux limites (condition de Robin et condition de contact) sont des combinaisons de ces deux cas. La résolution des problèmes présentant des conditions aux limites de ce type demande quelques manipulations. Les formulations utilisées pour la résolution de ces deux nouveaux problèmes sont présentées dans ce paragraphe.

3.3.1 Convection

La condition limite en convection (ou condition de Robin) s'écrit : $\forall M \in \Gamma_h, -\lambda \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h\,(T(M) - T_\infty)$. Le gradient de température selon la normale s'écrit donc :

$$q = -\frac{h}{\lambda}\,(T - T_\infty) \tag{3.52}$$

Application au cas stationnaire En introduisant cette condition limite dans l'équation intégrale (3.12), on obtient l'équation intégrale modifiée suivante :

$$c_i T_i + \int_{\Gamma-\Gamma_h} T q^* d\Gamma + \int_{\Gamma_h} T q^* d\Gamma + \int_{\Gamma_h} \frac{h}{\lambda} T T^* d\Gamma = \int_{\Gamma-\Gamma_h} q T^* d\Gamma + \int_{\Gamma_h} \frac{h}{\lambda} T_\infty T^* d\Gamma \tag{3.53}$$

Après discrétisation, on obtient donc le système modifié (3.54) pour lequel $q = 0$ si l'élément est soumis à la convection ($\Gamma_j \in \Gamma_h$) et $h = 0$ sinon ($\Gamma_j \notin \Gamma_h$).

$$\left[H + \frac{h}{\lambda} G\right] \{T\} = [G] \left\{q + \frac{h}{\lambda} T_\infty\right\} \tag{3.54}$$

La résolution du système permet d'obtenir les températures aux nœuds, qui sont alors utilisées pour déterminer les gradients de température sur les éléments soumis à la convection.

Application au cas transitoire L'application dans le cas d'un calcul transitoire se fait de la même manière. Après discrétisation dans le temps et l'espace, le système s'écrit :

$$\left(\theta_T [H] + \frac{1}{\Delta t} [C]\right) \left\{T^{n+1}\right\} - \theta_q [G] \left\{q^{n+1}\right\} = -\left((1-\theta_T)[H] - \frac{1}{\Delta t}[C]\right) \{T^n\} + (1-\theta_q)[G]\{q^n\} \tag{3.55}$$

Pour les éléments soumis à la convection, on a au pas de temps $n+1$: $q^{n+1} = -\frac{h}{\lambda}(T^{n+1} - T_\infty)$ (tous les T et q sont connus au temps n, y compris pour les éléments soumis à la convection). Pour trouver les solutions au pas de temps $n+1$, on doit donc résoudre le système :

$$\begin{aligned}\left(\theta_T [H] + \frac{1}{\Delta t} [C] + \theta_q \frac{h}{\lambda} [G]\right) \left\{T^{n+1}\right\} - \theta_q [G] \left\{q^{n+1} + \frac{h}{\lambda} T_\infty\right\} = \\ -\left((1-\theta_T)[H] - \frac{1}{\Delta t}[C]\right) \{T^n\} + (1-\theta_q)[G]\{q^n\}\end{aligned} \tag{3.56}$$

Comme dans le cas stationnaire, les températures sont calculées au pas de temps $n+1$ par résolution de ce système, puis sont utilisées pour le calcul des flux convectifs.

3.3.2 Calculs multidomaines et condition de contact thermique

Intérêt Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, la résolution des modèles thermiques du refroidissement lors de l'injection nécessite la prise en compte de plusieurs domaines en contact au niveau d'interfaces (moule/polymère ou moule/moule). Ces interfaces sont caractérisées par des résistances thermiques de contact que nous considérons constantes.

D'autre part, la division d'un domaine en plusieurs sous-domaines en contact parfait (résistance thermique de contact nulle) peut apporter plusieurs avantages :
- séparation en zones de propriétés différentes [139] en particulier pour des problèmes non linéaires [122, 134],
- meilleur rapport de forme des zones [139],
- temps de calcul réduit grâce à un nombre d'opérations réduit (figure 3.6) [140],
- une meilleure qualité de l'interpolation avec les fonctions radiales pour la réciprocité duale [140].

De plus, comme les matrices H, G, $\hat{T}$, $\hat{Q}$ et F ne dépendent que de la géométrie du sous domaine, diviser un domaine en sous-domaines de mêmes forme et taille permet de réutiliser les mêmes matrices [140].

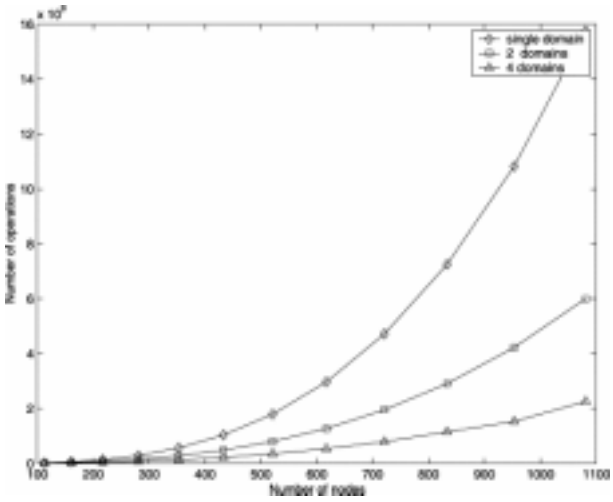


FIG. 3.6 – Effet du nombre de sous-domaines sur le nombre d'opérations nécessaires à l'assemblage et à la résolution par une méthode directe [140]

Modèles de contact thermique Nous avons vu dans le paragraphe 2.2.2.3 que le contact entre deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 peut se modéliser en introduisant les relations de continuité à l'interface $\Sigma_{1/2}$:

$$\forall M \in \Sigma_{1/2}, \quad \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1.\vec{n}_1 = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2.\vec{n}_2 \\ T_1 - T_2 = -\lambda_1 \mathcal{R} \vec{\nabla} T_1.\vec{n}_1 \end{cases} \tag{3.57}$$

On note Σ_1 et Σ_2 les côtés de l'interface appartenant respectivement au domaine Ω_1 et au domaine Ω_2 (voir figure 3.7).

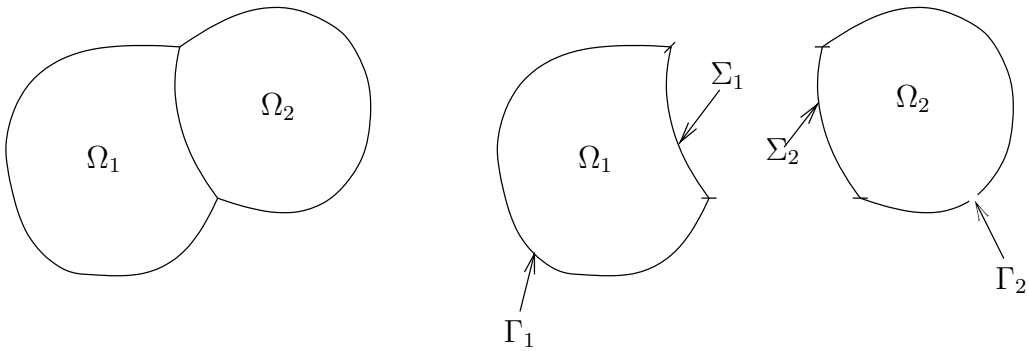


FIG. 3.7 – Définition des frontières des domaines en contact

Application aux calculs stationnaires Pour les domaines Ω_1 et Ω_2, la méthode des éléments frontières appliquée séparément à chacun des domaines permet d'obtenir les deux systèmes d'équations suivants :

$$[H_{\Gamma_1}]\{T_{\Gamma_1}\} + [H_{\Sigma_1}]\{T_{\Sigma_1}\} = [G_{\Gamma_1}]\{q_{\Gamma_1}\} + [G_{\Sigma_1}]\{q_{\Sigma_1}\} \tag{3.58}$$

$$[H_{\Gamma_2}]\{T_{\Gamma_2}\} + [H_{\Sigma_2}]\{T_{\Sigma_2}\} = [G_{\Gamma_2}]\{q_{\Gamma_2}\} + [G_{\Sigma_2}]\{q_{\Sigma_2}\} \tag{3.59}$$

soit sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} H_{\Gamma_1} & H_{\Sigma_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{\Sigma_2} & H_{\Gamma_2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_{\Gamma_1} \\ T_{\Sigma_1} \\ T_{\Sigma_2} \\ T_{\Gamma_2} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{\Gamma_1} & G_{\Sigma_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & G_{\Sigma_2} & G_{\Gamma_2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_{\Gamma_1} \\ q_{\Sigma_1} \\ q_{\Sigma_2} \\ q_{\Gamma_2} \end{Bmatrix} \tag{3.60}$$

On dispose de plus des deux relations à l'interface, que l'on peut mettre sous la forme :

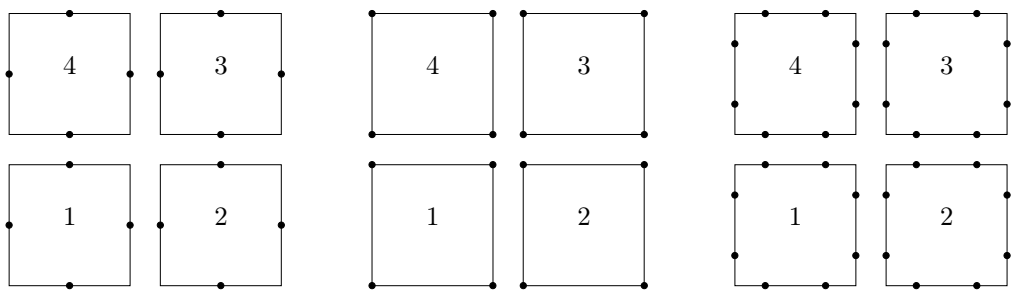
$$\forall M \in \Sigma_{1/2}, \quad \begin{cases} T_{\Sigma_2} = T_{\Sigma_1} + \lambda_1 \mathcal{R} q_{\Sigma_1} \\ q_{\Sigma_2} = \dfrac{-\lambda_1}{\lambda_2} q_{\Sigma_1} \end{cases} \tag{3.61}$$

En introduisant les relations précédentes, on peut donc mettre le système sous la forme :

$$\begin{bmatrix} H_{\Gamma_1} & H_{\Sigma_1} & -G_{\Sigma_1} & 0 \\ 0 & H_{\Sigma_2} & \frac{\lambda_1}{\lambda_2} G_{\Sigma_2} + \lambda_1 \mathcal{R} H_{\Sigma_2} & H_{\Gamma_2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_{\Gamma_1} \\ T_{\Sigma_1} \\ q_{\Sigma_1} \\ T_{\Gamma_2} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{\Gamma_1} & 0 \\ 0 & G_{\Gamma_2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_{\Gamma_1} \\ q_{\Gamma_2} \end{Bmatrix} \tag{3.62}$$

Après introduction des conditions aux limites (T ou q sur les frontières Γ_1 et Γ_2), la résolution du système permet de déterminer les inconnues sur les frontières Γ_1 et Γ_2 et les inconnues du côté 1 de l'interface (Σ_1). Les inconnues du domaine Ω_2 de l'interface peuvent ensuite être calculées grâce aux relations de contact.

Discrétisation des frontières On considère quatre domaines (carrés avec un élément sur le côté) en contact comme indiqué sur la figure (3.8). Pour chaque type d'éléments, le tableau 3.3 récapitule le nombre d'inconnues et d'équations du problème.



(a) Eléments constants (b) Eléments linéaires (c) Eléments linéaires discontinus

Fig. 3.8 – Discrétisations possibles de domaines en contact

Dans le cas d'un maillage avec des éléments continus, le nœud central du maillage fait partie des quatre interfaces. On se trouve alors dans une situation où le nombre d'inconnues est inférieur au nombre d'équations, ce qui obligerait à résoudre le système par une méthode adaptée.

L'utilisation d'éléments discontinus (constants ou linéaires) permet d'éviter d'obtenir un système surdéterminé. La gestion des interfaces (lors du maillage et de la réorganisation des matrices G et H) se trouve également simplifiée puisqu'un nœud ne peut faire partie que d'une seule interface [134].

Dans la suite des calculs, seuls des éléments discontinus (constants ou linéaires) seront utilisés lorsque plusieurs domaines en contact sont considérés.

	Éléments constants	**Éléments linéaires continus**	**Éléments linéaires discontinus**
Degrés de liberté	32	32	64
Conditions limites	8	12	16
Inconnnues	**24**	**20**	**48**
Équations du système	16	16	32
Équations de continuité	8	16	16
Équations	**24**	**32**	**48**

TAB. 3.3 – Comparaison du nombre d'inconnues et d'équations selon le type d'éléments

Application aux calculs transitoires Pour les domaines Ω_1 et Ω_2, l'application de la méthode de la réciprocité duale permet d'obtenir les deux systèmes suivants :

$$\left(\theta_T\left[H_{\Gamma_1}\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_{\Gamma_1}\right]\right)\left\{T_{\Gamma_1}^{n+1}\right\}+\left(\theta_T\left[H_{\Sigma_1}\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_{\Sigma_1}\right]\right)\left\{T_{\Sigma_1}^{n+1}\right\}-\theta_q\left[G_{\Gamma_1}\right]\left\{q_{\Gamma_1}^{n+1}\right\}-\theta_q\left[G_{\Sigma_1}\right]\left\{q_{\Sigma_1}^{n+1}\right\}=$$
$$\left(-(1-\theta_T)\left[H\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C\right]\right)\left\{T_1^n\right\}+(1-\theta_q)\left[G\right]\left\{q^n\right\} \quad (3.63)$$

$$\left(\theta_T\left[H_{\Gamma_2}\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_{\Gamma_2}\right]\right)\left\{T_{\Gamma_2}^{n+1}\right\}+\left(\theta_T\left[H_{\Sigma_2}\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_{\Sigma_2}\right]\right)\left\{T_{\Sigma_2}^{n+1}\right\}-\theta_q\left[G_{\Gamma_2}\right]\left\{q_{\Gamma_2}^{n+1}\right\}-\theta_q\left[G_{\Sigma_2}\right]\left\{q_{\Sigma_2}^{n+1}\right\}=$$
$$\left(-(1-\theta_T)\left[H\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C\right]\right)\left\{T_2^n\right\}+(1-\theta_q)\left[G\right]\left\{q^n\right\} \quad (3.64)$$

On note $[A]=\left(\theta_T\left[H\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C\right]\right)$ et $[B]=\theta_q\left[G\right]$. Les deux systèmes peuvent alors se mettre sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} A_{\Gamma_1} & A_{\Sigma_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{\Sigma_2} & A_{\Gamma_2} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} T_{\Gamma_1}^{n+1} \\ T_{\Sigma_1}^{n+1} \\ T_{\Sigma_2}^{n+1} \\ T_{\Gamma_2}^{n+1} \end{Bmatrix}-\begin{bmatrix} B_{\Gamma_1} & B_{\Sigma_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_{\Sigma_2} & B_{\Gamma_2} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} q_{\Gamma_1}^{n+1} \\ q_{\Sigma_1}^{n+1} \\ q_{\Sigma_2}^{n+1} \\ q_{\Gamma_2}^{n+1} \end{Bmatrix}=$$
$$\begin{bmatrix} -(1-\theta_T)\left[H_1\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_1\right] & 0 \\ 0 & -(1-\theta_T)\left[H_2\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_2\right] \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} T_1^n \\ T_2^n \end{Bmatrix}+(1-\theta_q)\begin{bmatrix} G_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} q_1^n \\ q_2^n \end{Bmatrix} \quad (3.65)$$

La prise en compte des conditions de continuité laisse le second membre inchangé (les solutions au pas de temps n connues). Les matrices A et B subissent les mêmes modifications que les matrices H et G lors de la résolution en régime stationnaire :

$$\begin{bmatrix} A_{\Gamma_1} & A_{\Sigma_1} & -B_{\Sigma_1} & 0 \\ 0 & A_{\Sigma_2} & \frac{\lambda_1}{\lambda_2}B_{\Sigma_2}+\lambda_1\mathcal{R}A_{\Sigma_2} & A_{\Gamma_2} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} T_{\Gamma_1}^{n+1} \\ T_{\Sigma_1}^{n+1} \\ q_{\Sigma_1}^{n+1} \\ T_{\Gamma_2}^{n+1} \end{Bmatrix}-\begin{bmatrix} B_{\Gamma_1} & 0 \\ 0 & B_{\Gamma_2} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} q_{\Gamma_1}^{n+1} \\ q_{\Gamma_2}^{n+1} \end{Bmatrix}=$$
$$\begin{bmatrix} -(1-\theta_T)\left[H_1\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_1\right] & 0 \\ 0 & -(1-\theta_T)\left[H_2\right]+\frac{1}{\Delta t}\left[C_2\right] \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} T_1^n \\ T_2^n \end{Bmatrix}+(1-\theta_q)\begin{bmatrix} G_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} q_1^n \\ q_2^n \end{Bmatrix} \quad (3.66)$$

Effets sur le temps de calcul : exemple du problème stationnaire L'étape de la résolution la plus coûteuse en temps de calcul est l'assemblage des matrices G et H (pour le calcul sur la frontière puis éventuellement pour le calcul aux points internes). Contrairement aux éléments finis, ces matrices sont pleines pour un domaine donné. Le nombre de termes à évaluer par intégration numérique est rappelé dans le tableau (3.4) où N_n est le nombre de nœuds, N_i le nombre de points internes et l'exposant désigne le domaine.

	Matrice G	**Matrice H**	**T aux points internes**	**q_x et q_y aux points internes**
Calcul sur 1 domaine	N_n^2	N_n^2	$2 \times N_i \times N_n$	$4 \times N_i \times N_n$
Calcul sur d domaines	$\sum_{i=1}^{d} N_n^{i2}$	$\sum_{i=1}^{d} N_n^{i2}$	$2 \sum_{i=1}^{d} N_i^i \times N_n^i$	$4 \sum_{i=1}^{d} N_i^i \times N_n^i$

Tab. 3.4 – Nombre de termes à calculer pour un calcul stationnaire

Pour comparer l'effet du nombre de sous-domaines, on considère un exemple simple de résolution d'un problème stationnaire sur un domaine carré représenté sur la figure 3.9. Dans un premier cas, on ne considère qu'un seul domaine et dans un deuxième cas, on découpe le domaine en 25 sous-domaines en contact (figure 3.10). Les éléments utilisés pour cet exemple sont linéaires discontinus. Le nombre d'éléments, de nœuds et de points internes sont résumés dans le tableau 3.5.

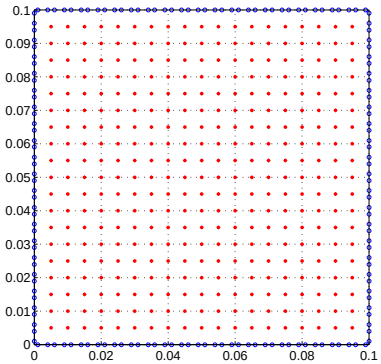


Fig. 3.9 – Maillage pour le calcul sur un domaine

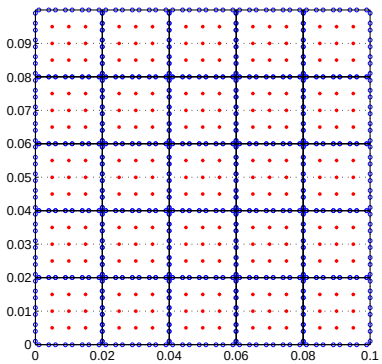


Fig. 3.10 – Maillage pour le calcul sur 25 sous-domaines

	Nombre d'éléments	**Nombre de nœuds**	**Nombre de points internes**
Calcul sur 1 domaine	80	160	361
Calcul sur 25 domaines	$25 \times 16 = 400$ (dont 320 "intérieurs")	$25 \times 32 = 800$ (dont 640 "intérieurs")	$25 \times 9 = 225$

Tab. 3.5 – Taille des maillages utilisés

On peut constater dans le tableau 3.6 que le nombre de termes à évaluer par intégration pour compléter les matrices G et H sur les frontières est le même bien qu'on ait plus de points sur les frontières dans le cas du multi-domaines. Les temps de calcul sur la frontière sont donc équivalents. Par contre, pour la résolution à l'intérieur du domaine, la division du domaine permet de diminuer considérablement le nombre de termes à calculer et donc d'accélérer le calcul. Au final, le calcul sur plusieurs domaines permet de calculer plus rapidement la solution en un nombre plus grand de points.

	Calcul sur les frontières (matrices G et H)		Calcul aux points internes (T, q_x et q_y)	
	Nbre de termes	**Tps de calcul**	**Nbre de termes**	**Tps de calcul**
Calcul sur un domaine	51200	2,94s	346560	12,16s
Calcul sur 25 domaines	51200	3,62s	43200	1,67s

TAB. 3.6 – Comparaison des nombre de termes à calculer et des temps de calcul selon le nombre de sous-domaines

Il faut toutefois noter que même si les matrices H et G sont diagonales par blocs lors de l'assemblage, la prise en compte des conditions de continuité leur fait perdre cet avantage comme on peut le voir sur la figure 3.11.

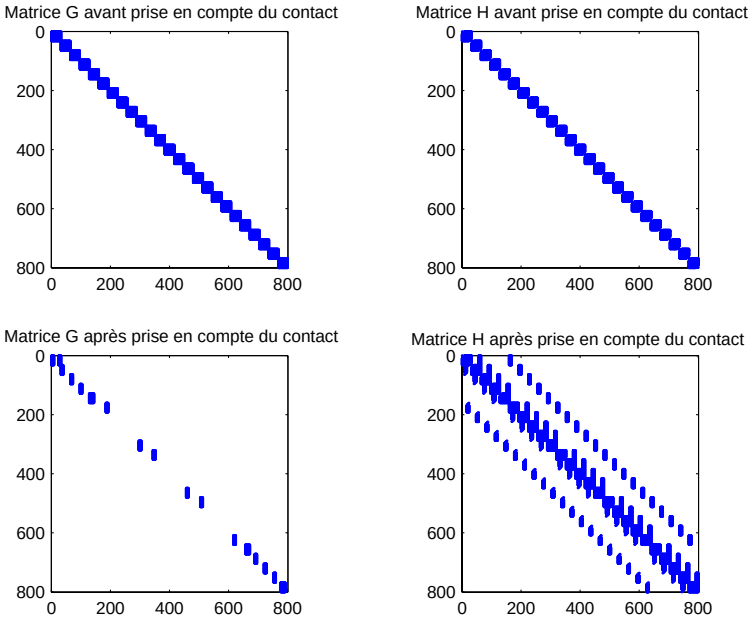


FIG. 3.11 – Termes non nuls des matrices G et H avant et après prise en compte des conditions de continuité

Diviser un domaine en plusieurs sous domaines permet donc d'accélérer le calcul pour plusieurs raisons :

- la taille des matrices évoluant en N_n^2 pour chaque domaine, moins de termes sont à calculer lors de l'assemblage des matrices (dans l'exemple, le nombre de termes à calculer est identique mais pour un nombre d'éléments plus élevé) ;
- pour chaque point interne, il ne faut calculer les termes H_{ij} et G_{ij} que sur la frontière du sous-domaine contenant ce point interne.

Les mêmes conclusions s'appliquent aux calculs transitoires. On peut également signaler que la matrice F est composée de blocs correspondant à chaque domaine. L'inversion de F lors d'un calcul sur plusieurs domaines se ramène à l'inversion de plusieurs matrices de plus petites tailles.

3.4 Implantation dans Matlab®

La figure 3.12 représente l'architecture du programme développé dans l'environnement Matlab®. Les noms des principales fonctions sont indiquées entre parenthèses. Après la lecture des données, les fonctions de mise en données et de résolution sont adaptées à chaque type d'éléments. Selon le type de calcul (stationnaire ou transitoire), la résolution après la mise en données sera différente.

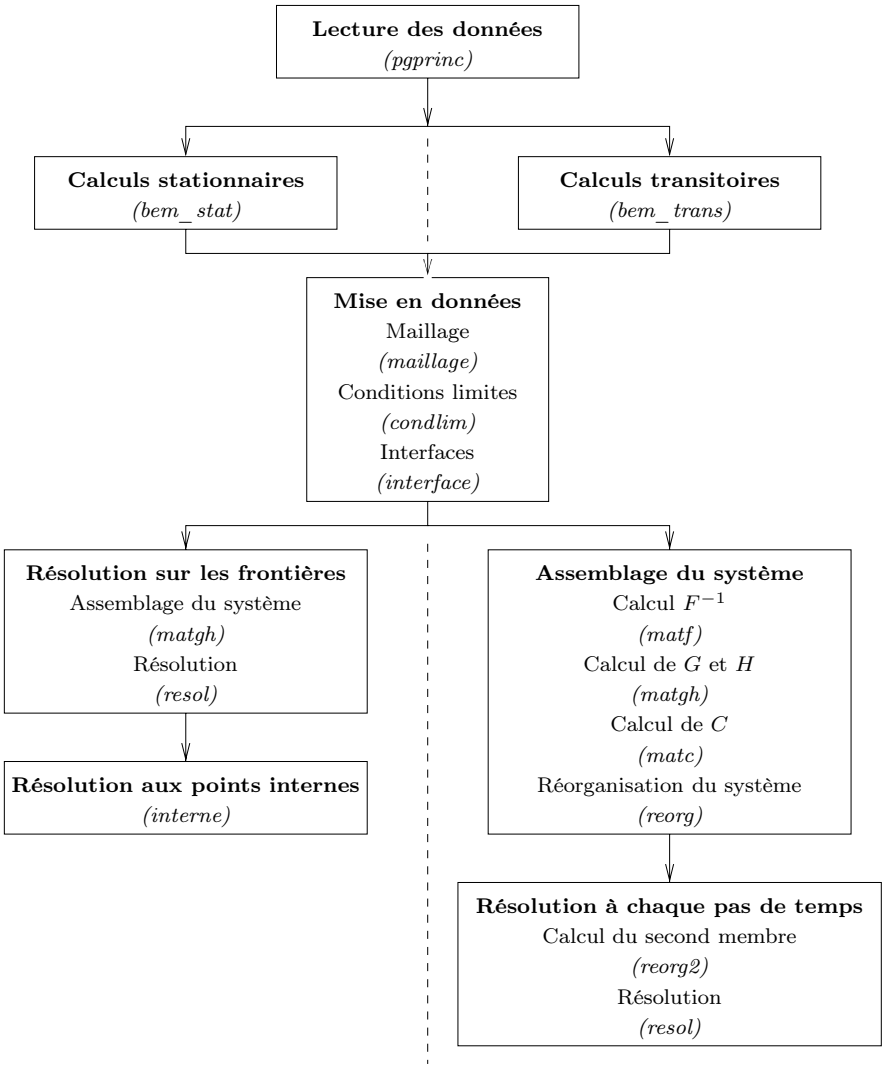


FIG. 3.12 – Fonctions programmées dans Matlab pour la résolution des problèmes thermiques

Le maillage est réalisé automatiquement à partir des données de géométries et des paramètres contenus dans le fichier de données (en particulier le type d'éléments et leur nombre). Deux autres fonctions sont utilisées lors de la mise en données : une pour créer le vecteur des conditions limites (T_0, q_0 ou $h \times T_\infty$ connus) en fonction des données et l'autre pour lire les informations relatives aux interfaces et aux contacts entre plusieurs domaines.

L'ensemble des calculs présentés dans les paragraphes 3.1, 3.2 et 3.3 sont intégrés dans les fonctions d'assemblage des matrices et de réorganisation des systèmes linéaires.

Les fonctions de résolution des systèmes linéaires font appel à la fonction Matlab® "\" qui utilise la librairie LAPACK. Ces fonctions permettent également une organisation des résultats pour sauvegarde et visualisation.

3.5 Validations par comparaison à des solutions analytiques

L'objectif de ce paragraphe est de valider la méthode de calcul par comparaison à des solutions analytiques exactes pour les types de problèmes que l'on cherche à résoudre présentés dans le chapitre précédent. Ces comparaisons pourront également aider au choix des paramètres de calcul (comme le maillage, les schémas d'interpolation dans le temps, le pas de temps...).

3.5.1 Calculs stationnaires

Dans le premier cas, nous chercherons à valider la méthode de résolution des problèmes stationnaires avec tous les types de conditions aux limites. Le deuxième cas validera la prise en compte des conditions de contact.

3.5.1.1 Cas 1 : Calcul sur un seul domaine

On considère une plaque carrée de côté $L = 0,1$m et de conductivité thermique $\lambda = 10\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ (figure 3.13). La frontière $y = 0$ a une température imposée $T_0 = 200$°C. Sur la frontière $x = L$, on impose une condition de convection avec $h = 2000\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ et $T_\infty = 0$°C.

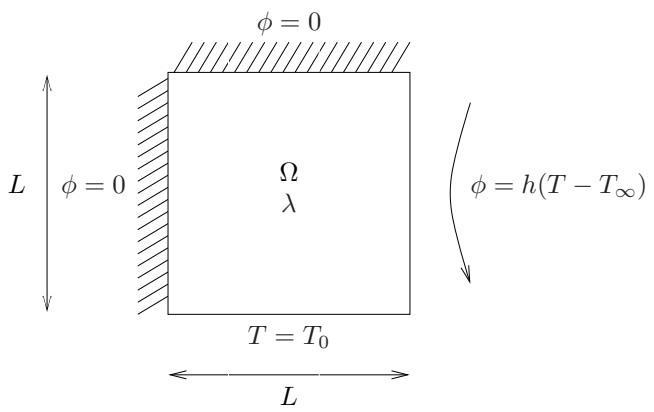


FIG. 3.13 – Problème stationnaire N°1

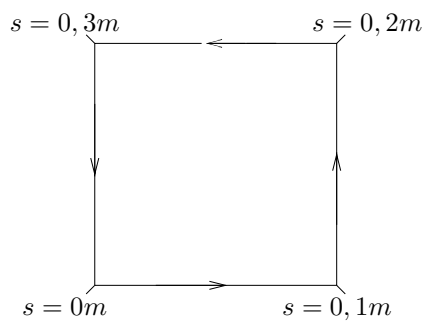


FIG. 3.14 – Sens de parcours de la frontière et de l'abcisse curviligne s

Solution analytique En notant $H = \frac{h}{\lambda}$ et α_n les racines positives de $\alpha_n \tan(\alpha_n L) = H$, la solution analytique de ce problème s'écrit [60] :

$$T(x,y) = 2T_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(H^2 + \alpha_n^2\right) \cos(\alpha_n x) \cosh(\alpha_n (L-y)) \sin(\alpha_n L)}{\alpha_n \left(\left(\alpha_n^2 + H^2\right) L + H\right) \cosh(\alpha_n L)} \tag{3.67}$$

Les flux peuvent être obtenus par dérivation de la température selon les deux directions du plan.

$$\phi_x = -\lambda \frac{\partial T(x,y)}{\partial x} = 2\lambda T_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(H^2+\alpha_n^2\right)\sin\left(\alpha_n x\right)\cosh\left(\alpha_n\left(L-y\right)\right)\sin\left(\alpha_n L\right)}{\left(\left(\alpha_n^2+H^2\right)L+H\right)\cosh\left(\alpha_n L\right)} \tag{3.68}$$

$$\phi_y = -\lambda \frac{\partial T(x,y)}{\partial y} = 2\lambda T_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(H^2+\alpha_n^2\right)\cos\left(\alpha_n x\right)\sinh\left(\alpha_n\left(L-y\right)\right)\sin\left(\alpha_n L\right)}{\left(\left(\alpha_n^2+H^2\right)L+H\right)\cosh\left(\alpha_n L\right)} \tag{3.69}$$

Solution BEM L'effet du maillage sur les solutions de la frontière et des points internes est étudié en faisant varier le nombre et le type d'éléments. On utilise entre 4 et 40 éléments constants ou linéaires discontinus pour discrétiser la frontière. Dans tous les cas, le nombre de points internes, qui, rappelons le, n'a pas d'effet sur les solutions de la frontière, est gardé constant. Un exemple de maillage et la distribution de température obtenue sont représentés sur les figures 3.15 et 3.16.

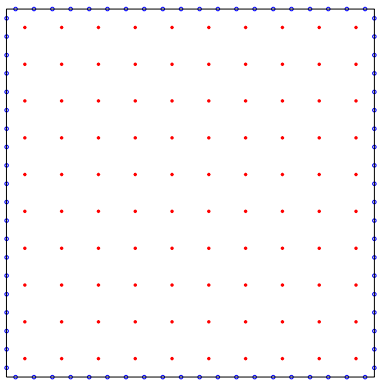


FIG. 3.15 – Position des points de collocation pour un maillage de 40 éléments linéaires discontinus et position des points internes

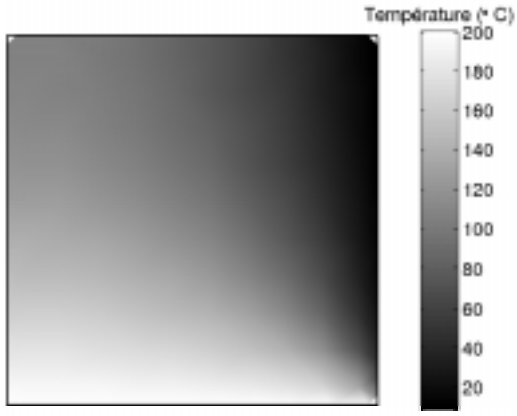


FIG. 3.16 – Distribution de température obtenue avec le maillage de la figure 3.15

Les erreurs obtenues par rapport à la solution analytique pour les températures et les flux sont présentés dans les tableaux 3.7 et 3.8.

Erreur [%]	Éléments constants				Éléments linéaires discontinus			
	40	**20**	**8**	**4**	**40**	**20**	**8**	**4**
moyenne aux nœuds	0,04	0,07	0,21	0,55	0,01	0,02	0,05	0,25
maximale aux nœuds	0,31	0,25	0,67	1,01	0,32	0,26	0,21	0,53
moyenne sur les éléments	0,65	1,16	2,47	4,47	0,10	0,22	0,63	1,51
maximale sur les éléments	25,78	31,58	37,03	39,25	14,48	21,42	30,30	35,37
moy. sur les points internes	0,02	0,13	1,24	2,98	0,01	0,05	0,95	2,84
max. sur les points internes	0,36	1,90	7,79	22,93	0,04	0,38	6,93	24,13

TAB. 3.7 – Erreurs sur les résultats en température selon le maillage

Dans tous les cas, l'erreur en température sur les nœuds de la frontière est inférieure à 1% et globalement, augmenter le nombre d'éléments fait logiquement diminuer l'erreur. Toutefois, l'utilisation d'un faible nombre

d'éléments conduit à de fortes erreurs d'interpolation sur la frontière lorsque les variations de température sont grandes (jusqu'à près de 40% pour 4 éléments constants) comme on peut le voir sur les figures 3.17 et 3.18.

Erreur [%]	Éléments constants				Éléments linéaires discontinus			
	40	**20**	**8**	**4**	**40**	**20**	**8**	**4**
moyenne aux nœuds	3,62	5,54	8,14	14,61	2,19	3,07	5,36	9,80
maximale aux nœuds	23,86	22,15	17,95	18,09	19,82	20,78	19,99	17,73
moyenne sur les éléments	9,39	15,81	30,52	48,20	3,82	6,94	18,56	33,58
maximale sur les éléments	103,43	112,58	119,51	96,51	69,01	88,48	110,42	96,83
moy. sur les points internes	1,27	19,07	189,94	265,30	0,64	18,07	188,27	230,31
max. sur les points internes	11,49	324,03	3814,7	3835,2	9,17	322,6	3819,7	2676,3

Tab. 3.8 – Erreurs sur les flux normaux selon le maillage

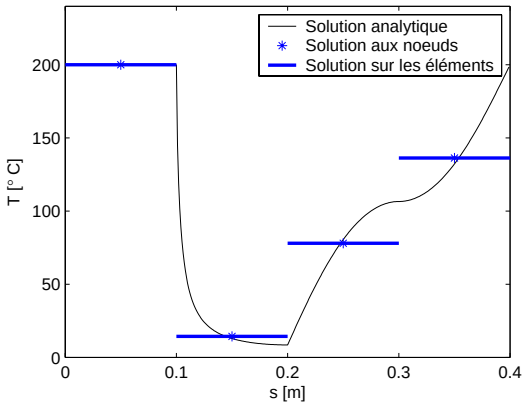


Fig. 3.17 – Comparaison des températures obtenues sur la frontière analytiquement et numériquement avec 4 éléments constants

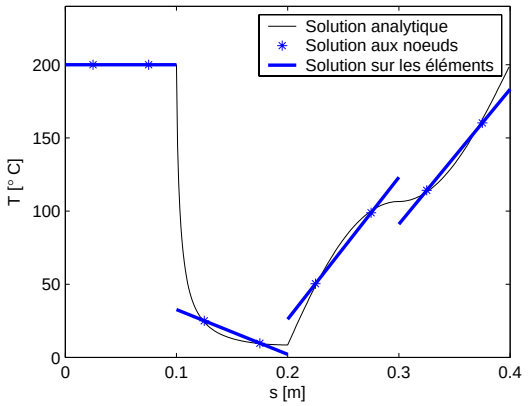


Fig. 3.18 – Comparaison des températures obtenues sur la frontière analytiquement et numériquement avec 4 éléments linéaires discontinus

Même si l'erreur en température aux nœuds est faible, un nombre d'éléments insuffisant sur la frontière conduit à une erreur importante à l'intérieur du domaine et ce d'autant plus que le point interne est proche de la frontière. La seule solution pour améliorer les résultats consiste alors à augmenter le nombre d'éléments ou le degré d'interpolation.

Les mêmes effets se retrouvent lors de la comparaison des flux simulés à la solution analytique. Ici, les erreurs sont encore plus grandes car le flux présente de fortes variations sur la frontière comme montré sur les figures 3.19 et 3.20.

En conclusion, un maillage grossier avec un faible degré d'interpolation sera suffisant si l'on souhaite obtenir l'allure des variations de température sur la frontière. Par contre, si l'on souhaite représenter avec précision ces variations et calculer avec beaucoup de précision les solutions à l'intérieur du domaine près de la frontière, un maillage très fin et des éléments linéaires seront nécessaires.

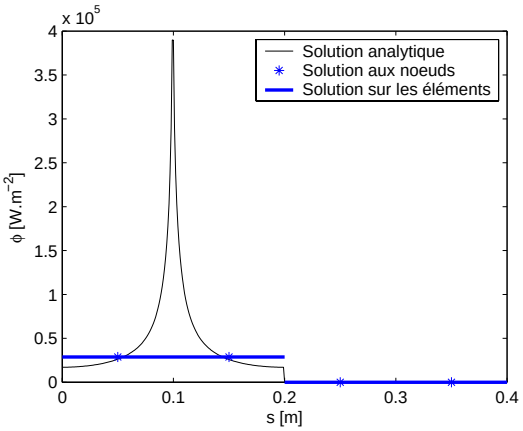


FIG. 3.19 – Comparaison des flux obtenus sur la frontière analytiquement et numériquement avec 4 éléments constants

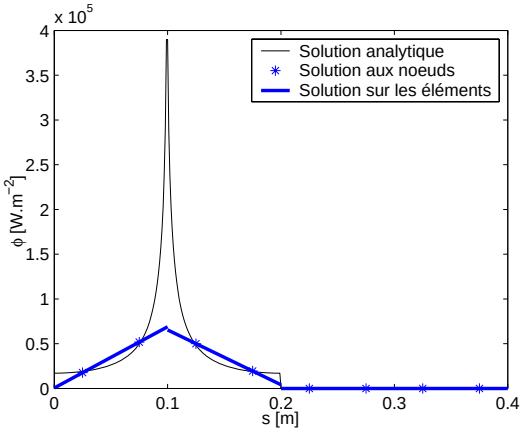


FIG. 3.20 – Comparaison des flux obtenus sur la frontière analytiquement et numériquement avec 4 éléments linéaires discontinus

3.5.1.2 Cas 2 : Calcul sur plusieurs domaines

On cherche à vérifier la prise en compte des conditions de contact parfait et imparfait dans la méthode de résolution. On considère deux domaines de forme carrée et de coté $L = 0,1$m et de conductivités thermiques $\lambda_1 = 10\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et $\lambda_2 = 20\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ (figure 3.21). Ces deux domaines sont en contact en $x = 0$. Les conditions aux limites sont :

- en $x = -L$, la température est fixée à $T_{-L} = 200$°C ;
- en $x = L$, la température est fixée à $T_L = 100$°C ;
- en $x = 0$, on introduit une interface caractérisée par une résistance thermique de contact $\mathcal{R} = 10^{-3}\text{m}^2.\text{K.W}^{-1}$.

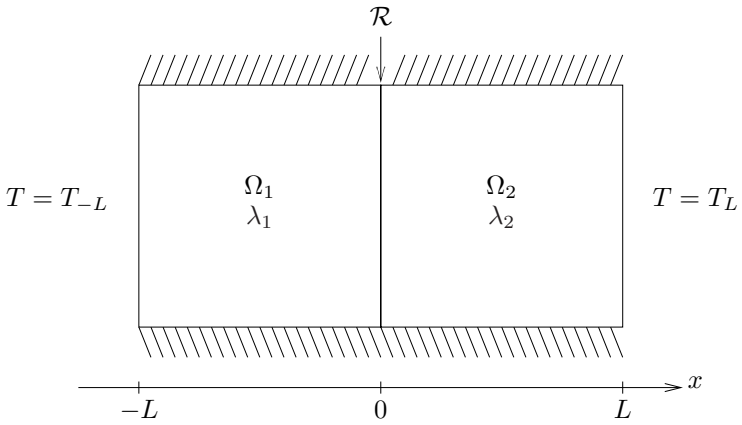


FIG. 3.21 – Problème stationnaire N°2

Solution analytique En notant $Z = \frac{T_L - T_{-L}}{\mathcal{R}\lambda_1 + L\frac{\lambda_1+\lambda_2}{\lambda_2}}$, la solution analytique de ce problème s'écrit :

$$\begin{aligned} \forall x \in [-L, 0], \quad T(x) &= Z(x + L) + T_{-L} \\ \forall x \in [0, L], \quad T(x) &= \frac{\lambda_1}{\lambda_2} Z\,(x - L) + T_L \end{aligned} \tag{3.70}$$

La densité de flux est constante sur les deux domaines et égale à $\lambda_1 Z$.

Solution BEM On valide la solution numérique pour les deux types d'éléments discontinus (constants ou linéaires discontinus) et on étudie l'effet du nombre d'éléments (8 ou 40 éléments au total). Les répartitions de températures obtenues pour ce type de problèmes sont représentées sur les figures 3.22 (pour une résistance nulle) et 3.23 (pour une résistance non nulle).

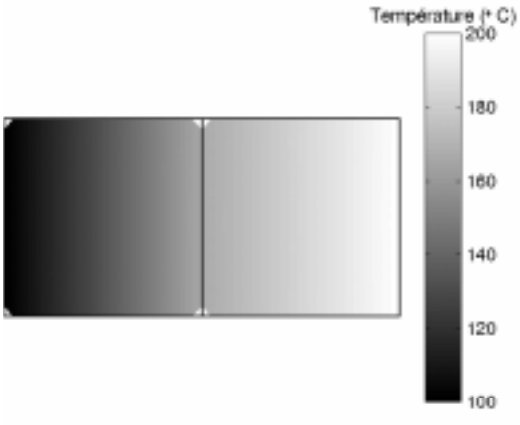


Fig. 3.22 – Répartition de température pour $\mathcal{R} = 0$ m^2.K.W^{-1}

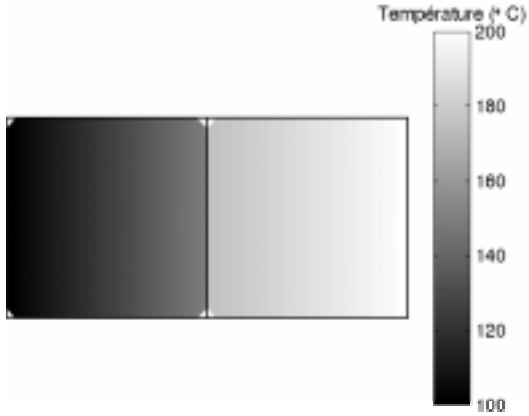


Fig. 3.23 – Répartition de température pour $\mathcal{R} = 10^{-3}$ m^2.K.W^{-1}

La comparaison à la solution analytique est réalisée sur les noeuds des frontières et aux points internes. Le récapitulatif des erreurs sur les températures et les flux est présenté dans les tableaux 3.9 et 3.10.

Erreur [%]	**Éléments constants**		**Éléments linéaires**	
	8	**40**	**8**	**40**
moy sur les nœuds	0,06	0,001	0,007	0,002
max sur les nœuds	0,16	0,004	0,014	0,004
moy sur les points internes	1,57	0,007	1,54	0,007
max sur les points internes	7,07	0,024	7,01	0,028

Tab. 3.9 – Erreur en température selon le maillage

Erreur [%]	**Éléments constants**		**Éléments linéaires**	
	8	**40**	**8**	**40**
moyenne sur les nœuds	16,21	0,48	0,21	0,12
maximale sur les nœuds	16,36	0,69	0,53	0,34
moyenne sur les points internes	223,95	3,45	221,28	3,35
maximale sur les points internes	1366,41	27,12	1371,94	26,58

Tab. 3.10 – Erreur en flux selon le maillage

Dans tous les cas, l'erreur en température sur la frontière est négligeable. Le nombre d'éléments de l'interface n'a pas d'influence sur les températures en $x = 0$ et la discontinuité de température est bien prise en compte. Par contre, on retrouve l'influence importante du nombre d'éléments de la frontière sur la précision des solutions à l'intérieur du domaine. En effet, les éléments à une distance trop faible de la frontière (par rapport à la taille des éléments) présentent une erreur importante quel que soit le degré d'interpolation des éléments (figures 3.24 et 3.25).

Les résultats des erreurs sur les flux montrent les mêmes tendances mais avec des niveaux d'erreur plus élevés (que l'on retrouve sur les figures 3.26 et 3.27).

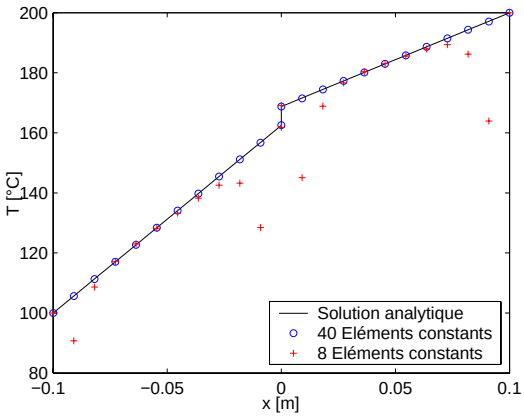


FIG. 3.24 – Comparaison des températures obtenues numériquement avec des éléments constants à la solution analytique en $y = \frac{L}{2}$

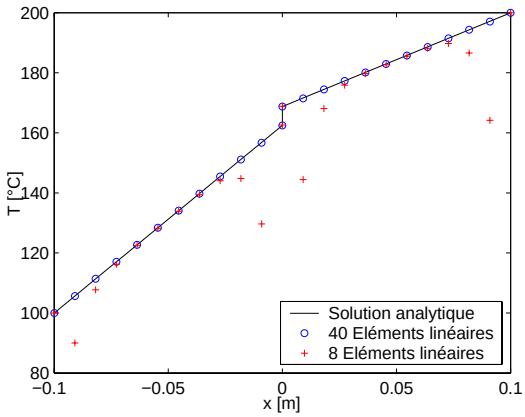


FIG. 3.25 – Comparaison des températures obtenues numériquement avec des éléments linéaires discontinus à la solution analytique en $y = \frac{L}{2}$

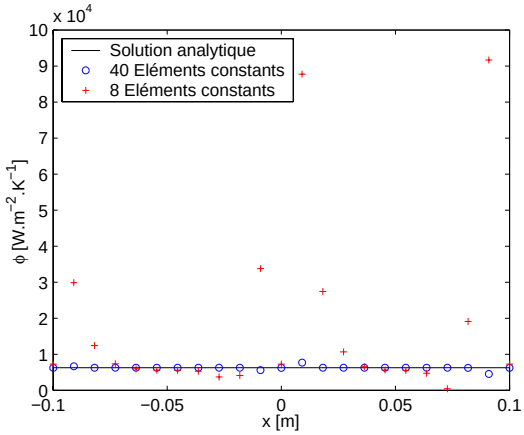


FIG. 3.26 – Comparaison des flux obtenus numériquement avec des éléments constants à la solution analytique en $y = \frac{L}{2}$

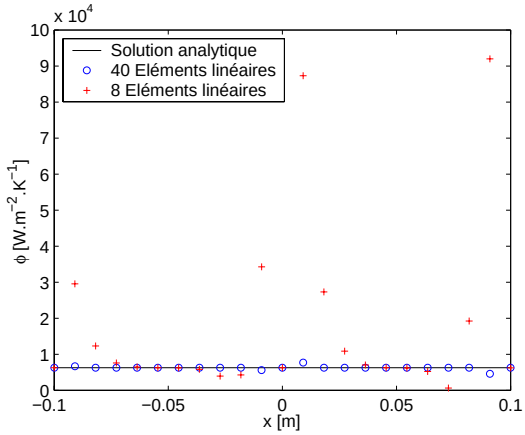


FIG. 3.27 – Comparaison des flux obtenus numériquement avec des éléments linéaires discontinus à la solution analytique en $y = \frac{L}{2}$

3.5.2 Calculs transitoires

Le premier cas transitoire concerne le problème du choc thermique et va nous permettre d'observer l'effet des différents paramètres de la méthode de la réciprocité duale. Le deuxième cas concerne le traitement des conditions de contact de deux domaines de diffusivité très différentes (problème semblable à un contact moule acier/pièce polymère).

3.5.2.1 Cas 1 : Calcul sur un seul domaine

On simule un choc thermique en appliquant sur le coté d'une plaque initialement à température nulle une température T_L. Le coté opposé est maintenu à température constante nulle et les cotés supérieurs et inférieurs sont isolés (figure 3.28). La plaque est constituée d'un matériau de conductivité thermique λ, de masse volumique ρ et de capacité calorifique C_P. On note $a = \frac{\lambda}{\rho C_P}$ la diffusivité du matériau. Les données numériques sont référencées dans le tableau 3.11.

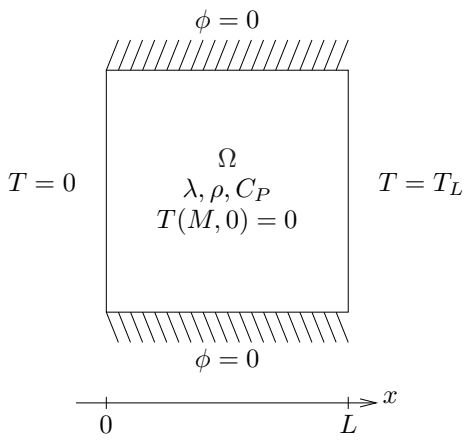


Fig. 3.28 – Problème transitoire N°1

Conductivité λ **[W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Masse volumique** ρ **[kg.m^{-3}]**	**Capacité calorifique massique** C_P **[J.kg^{-1}.K^{-1}]**	**Longueur du domaine** L **[m]**	**Température imposée** T_L **[°C]**
10	5000	200	0,1	200

Tab. 3.11 – Valeurs numériques utilisées pour le problème transitoire N°1

Solution analytique La solution du problème s'écrit [63] :

$$T(x,t) = T_L \sum_{n=0}^{\infty} \left((-1)^n \operatorname{erfc} \frac{(2n+1)L - x}{2\sqrt{at}} - (-1)^n \operatorname{erfc} \frac{(2n+1)L + x}{2\sqrt{at}} \right) \tag{3.71}$$

La densité de flux obtenue par dérivation de la température s'écrit :

$$\phi_x(x,t) = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(x,t) = \frac{-\lambda T_L}{\sqrt{\pi a t}} \sum_{n=0}^{\infty} \left((-1)^n \exp\left(-\frac{((2n+1)L - x)^2}{at} \right) + (-1)^n \exp\left(-\frac{((2n+1)L + x)^2}{at} \right) \right) \quad (3.72)$$

Solution BEM On cherche à étudier les effets de plusieurs paramètres : le maillage, le pas de temps Δt, la fonction d'interpolation f, les schémas temporels par l'intermédiaire de θ_T et θ_q. On utilise pour cela un plan d'expériences (selon la méthode de Taguchi [141]). 16 expériences permettent de déterminer l'influence de 5 paramètres à 2 niveaux et de toutes les interactions entre deux paramètres.

Les deux niveaux des différents paramètres sont indiqués dans le tableau 3.12. Il faut noter que le maillage ne concerne pas ici les points internes. Dans tous les cas, on en garde le même nombre (81) répartis uniformément dans le domaine.

Paramètre	**Niveau 1**	**Niveau 2**
Nb d'éléments	20	40
Δt	1s	0,5s
f	$1+r$	$r^2 \ln r$
θ_T	1	0,5
θ_q	1	0,5

TAB. 3.12 – Niveaux des paramètres du plan d'expériences

Pour chaque calcul, on note l'erreur maximale en température, l'erreur maximale en flux et le temps de calcul (tableau 3.13). La méthode des plans d'expériences permet de déterminer l'effet de chacun des paramètres et de leurs interactions. Une analyse de la variance permet de déterminer quels sont les paramètres significatifs. Ceux-ci sont indiqués dans les tableaux 3.14 et 3.15.

							Erreur Points Frontières (%)				Erreur Points Internes (%)			
Facteurs	**Maillage**	**f**	**Δt**	**θ_T**	**θ_q**	**CPU (s)**	**T (t=1s)**	**Φ (t=1s)**	**T (t=20s)**	**Φ (t=20s)**	**T (t=1s)**	**Φ (t=1s)**	**T (t=20s)**	**Φ (t=20s)**
1	20	1+r	1s	1	1	9,65	1,52	170,15	0,05	2,57	1,08	357,44	0,1	2,91
2	20	$r^2 \ln r$	0.5s	½	½	13,34	0,53	30,19	0,02	4,2	0,75	371,17	0,08	0,94
3	40	1+r	1s	1	½	29,07	0,62	49,27	0,05	16,91	1,04	353,16	0,1	2,39
4	40	$r^2 \ln r$	0.5s	½	1	41,37	0,39	22,31	0,04	2,61	0,62	359,14	0,07	0,96
5	40	1+r	1s	½	1	29,1	1,11	112,21	0,08	6,39	1,95	391,4	0,16	3,29
6	40	$r^2 \ln r$	0.5s	1	½	42,52	0,23	27,25	0,03	3,22	0,4	342,39	0,06	1,18
7	20	1+r	1s	½	½	9,76	2,32	58,22	0,05	18,89	2,01	398,65	0,16	3,2
8	20	$r^2 \ln r$	0.5s	1	1	13,79	0,51	27,56	0,03	2,17	0,52	354,21	0,06	1,27
9	40	1+r	0.5s	1	1	42,4	0,46	24,35	0,02	1,31	0,86	349,29	0,05	2,59
10	40	$r^2 \ln r$	1s	½	½	29,13	0,76	28,19	0,07	4,89	1,24	378,47	0,14	1,56
11	20	1+r	0.5s	1	½	13,79	1,25	54,96	0,04	18,59	0,89	352,69	0,09	3,12
12	20	$r^2 \ln r$	1s	½	1	9,78	1,36	98,36	0,05	3,26	1,43	396,38	0,15	1,53
13	20	1+r	0.5s	½	1	13,84	1,41	34,21	0,04	2,77	1,21	371,65	0,14	3,19
14	20	$r^2 \ln r$	1s	1	½	9,33	0,73	29,42	0,06	3,54	0,71	359,27	0,12	2,14
15	40	1+r	0.5s	½	½	42,25	0,62	52,4	0,06	22,39	1,17	367,58	0,09	3,07
16	40	$r^2 \ln r$	1s	1	1	29,06	0,37	116,32	0,06	2,08	0,56	345,9	0,13	2,04

TAB. 3.13 – Récapitulatif des erreurs sur le flux et la température

Erreur Points Frontières (t=1s)			Erreur Points Frontières (t=20s)			Erreur Points Internes (t=1s)			Erreur Points Internes (t=20s)		
Moyenne		0,887	**Moyenne**		0,047	**Moyenne**		1,028	**Moyenne**		0,106
Maillage	1	0,317	Δt	1	0,012	θ_T	1	-0,270	Δt	1	0,026
	2	-0,317		2	-0,012		2	0,270		2	-0,026
f	1	0,277	**Maillage/θ_T**	1	0,007	**f**	1	0,249	θ_T	1	-0,018
	2	-0,277		2	-0,007		2	-0,249		2	0,018
Δt	1	0,212	θ_T/f	1	-0,004	Δt	1	0,225	θ_T/f	1	-0,009
	2	-0,212		2	0,004		2	-0,225		2	0,009
θ_T	1	-0,176	**Maillage**	1	-0,004	$\Delta t/\theta_T$	1	-0,135	Δt/f	1	-0,008
	2	0,176		2	0,004		2	0,135		2	0,007
Maillage/f	1	0,144	θ_T	1	-0,004	**Maillage**	1	0,047	**Δt/Maillage**	1	-0,006
	2	-0,144		2	0,004		2	-0,047		2	0,006
$\Delta t/\theta_T$	1	-0,113	Δt/f	1	-0,003	θ_T/f	1	-0,039	**Maillage**	1	0,006
	2	0,113		2	0,003		2	0,039		2	-0,006
Δt/Maillage	1	0,067	f	1	0,002	**Maillage/f**	1	-0,026	**Maillage/f**	1	0,005
	2	-0,067		2	-0,002		2	0,026		2	-0,005
θ_q/f	1	-0,043	$\Delta t/\theta_q$	1	0,002	Δt/f	1	0,019	θ_T/θ_q	1	-0,005
	2	0,043		2	-0,002		2	-0,019		2	0,005
			θ_T/θ_q	1	-0,002	**Maillage/θ_q**	1	-0,016	f	1	0,005
				2	0,002		2	0,016		2	-0,005
			Δt/Maillage	1	-0,002						
				2	0,002						

TAB. 3.14 – Effets des paramètres et interactions significatifs sur l'erreur en température

Erreur Points Frontières (t=1s)			Erreur Points Frontières (t=20s)			Erreur Points Internes (t=1s)			Erreur Points Internes (t=20s)		
Moyenne		58,461	**Moyenne**		7,237	**Moyenne**		365,549	**Moyenne**		2,211
Δt	1	24,307	θ_q	1	-4,342	θ_T	1	-13,756	f	1	0,759
	2	-24,307		2	4,342		2	13,756		2	-0,759
$\Delta t/\theta_q$	1	24,269	f	1	3,991	Δt	1	7,034	θ_T/f	1	-0,211
	2	-24,269		2	-3,991		2	-7,034		2	0,211
θ_q	1	17,223	θ_q/f	1	-3,626	$\Delta t/\theta_T$	1	-4,886	Δt/f	1	-0,194
	2	-17,223		2	3,626		2	4,886		2	0,194
f	1	11,011	θ_T	1	-0,938	**Maillage**	1	4,633	Δt	1	0,171
	2	-11,011		2	0,938		2	-4,633		2	-0,171
			Maillage/θ_T	1	0,657	**Maillage/f**	1	-2,258	**Maillage/θ_T**	1	0,079
				2	-0,657		2	2,258		2	-0,079
			$\Delta t/\theta_q$	1	0,601	f	1	2,183	**Maillage**	1	0,076
				2	-0,601		2	-2,183		2	-0,076
			θ_T/f	1	-0,444				**Maillage/θ_q**	1	-0,074
				2	0,444					2	0,074
			Maillage/f	1	-0,284				**Maillage/f**	1	0,059
				2	0,284					2	-0,059
			Maillage	1	-0,238				$\Delta t/\theta_q$	1	0,049
				2	0,238					2	-0,049

TAB. 3.15 – Effets des paramètres et interactions significatifs sur l'erreur en flux

Les effets des paramètres sur les erreurs de température sont surtout significatifs aux temps courts ($t = 1$s) tant sur les points de la frontières que sur les points internes. Les erreurs sont en effet toutes très faibles à $t = 20s$ et les effets présentent peu de différences entre eux.

Par contre, les effets des paramètres (sauf θ_q) sont importants lors des premiers pas de temps (les effets des interactions sont globalement plus faibles). Si l'on souhaite diminuer les erreurs de température dans ces premiers instants, il faut utiliser :

- un maillage plus fin (maillage 2 ici),
- un pas de temps plus court (0,5s ici),

– la fonction d'interpolation $f = r^2 \ln r$,
– un schéma implicite pour la température ($\theta_T = 1$).

Les figures 3.29 à 3.32 représentent les évolutions de températures et flux obtenus dans le cas 6 en deux points du domaine : près la surface qui subit le choc thermique ($y = 0,09$m) et au centre du domaine ($y = 0,05m$). Les figures 3.33 à 3.36 présentent les mêmes résultats obtenus dans le cas 7.

On peut noter que les erreurs les plus importantes de températures interviennent dans les deux cas sur les points les plus proches de la surface. La température présente en effet des oscillations. Le pas de temps est pourtant supérieur au temps nécessaire pour que le front de chaleur atteigne cette profondeur (estimé à l'aide du nombre de Fourier). La température au centre du domaine présente également des oscillations mais d'amplitude plus faible. D'une manière générale, les paramètres du cas 6 (maillage plus fin et pas de temps plus court) permettent d'obtenir des oscillations plus faibles que le cas 7.

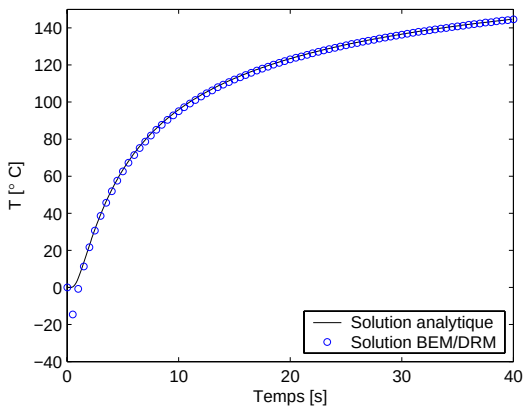


FIG. 3.29 – Comparaison des températures calculées analytiquement et numériquement (cas 6) en $x = 0,09$m

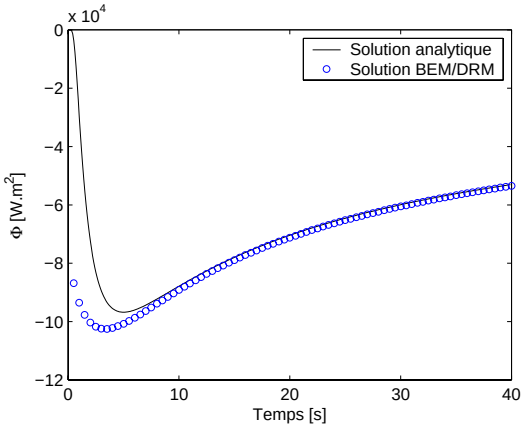


FIG. 3.30 – Comparaison des flux calculés analytiquement et numériquement (cas 6) en $x = 0,09$m

Les mêmes remarques peuvent s'appliquer au flux calculé près de la frontière et au centre du domaine. On constate cette fois une erreur importante près de la frontière dans le cas 7 même après 20s. Le paramètre θ_q joue un rôle important : le flux sur la frontière subissant le choc thermique est inconnu et subit de fortes variations durant les premières secondes du transfert. Si l'on n'utilise pas un schéma implicite ($\theta_q = 1$), les erreurs de calcul importantes lors du premier pas de temps se propagent et s'amplifient lors des pas de temps suivants.

Les effets des autres paramètres sur l'erreur en flux montrent globalement les mêmes tendances que pour les résultats en température et les conclusions restent donc valables. On voit toutefois apparaître l'effet de l'interaction entre le maillage et la fonction d'interpolation f, ce qui confirme que la qualité de la fonction d'interpolation va dépendre du nombre de points disponibles.

Enfin, il faut noter que les deux paramètres ayant le plus d'influence sur le temps de calcul sont le maillage et le pas de temps. Augmenter le nombre d'éléments et diminuer le pas de temps provoquent logiquement une augmentation de la durée de calcul. Selon l'objectif recherché (précision ou rapidité), il conviendra donc d'adapter ces deux paramètres.

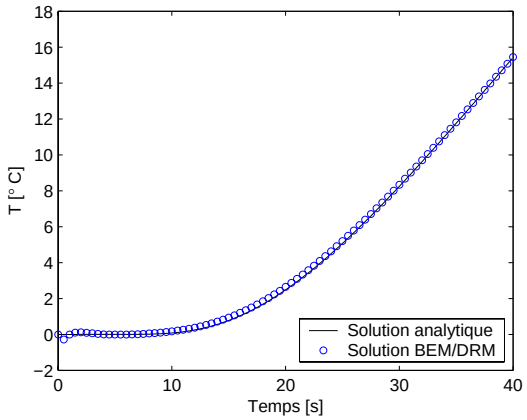


FIG. 3.31 – Comparaison des températures calculées analytiquement et numériquement (cas 6) en $x = 0,05$m

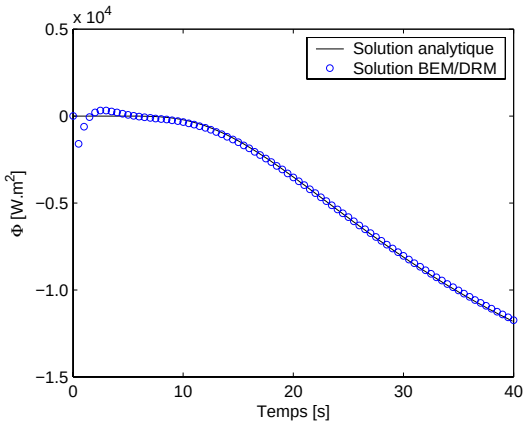


FIG. 3.32 – Comparaison des flux calculés analytiquement et numériquement (cas 6) en $x = 0,05$m

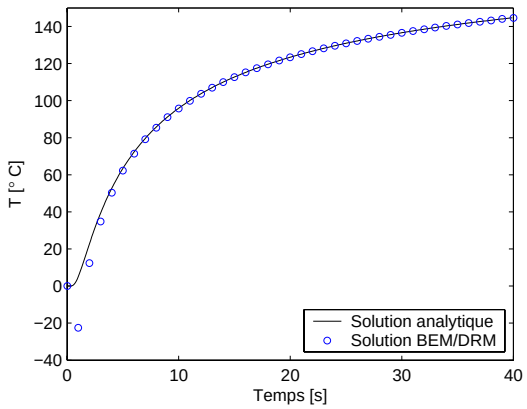


FIG. 3.33 – Comparaison des températures calculées analytiquement et numériquement (cas 7) en $x = 0,09$m

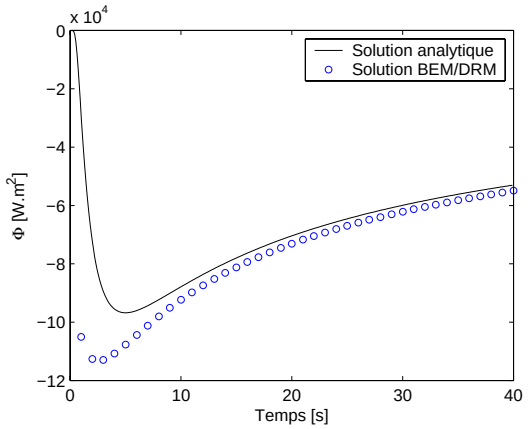


FIG. 3.34 – Comparaison des flux calculés analytiquement et numériquement (cas 7) en $x = 0,09$m

3.5.2.2 Cas 2 : Calcul sur plusieurs domaines

On se place maintenant dans une situation proche de celle rencontrée lors du refroidissement d'une pièce polymère dans un moule d'injection : un matériau de faible épaisseur et de faible diffusivité, initialement à une température T^0 est refroidi par contact avec deux matériaux identiques de taille plus grande et bons conducteurs thermiques, initialement à température nulle (figure 3.37). Toutes les frontières extérieures sont isolées et les deux interfaces sont caractérisées par des résistances thermiques de contact $\mathcal{R}$. Les données numériques du problème sont résumées dans le tableau 3.16.

Solution analytique La solution de ce problème est connue pour des solides semi-infinis en contact. Elle peut par exemple s'appliquer au calcul des solutions pour $x \in [-L_1, \frac{L_2}{2}]$ pour des temps courts (c'est-à-dire tant que les fronts de chaleur n'ont pas atteint les extrémités des domaines). La solution pour $x \in [\frac{L_2}{2}, L_1 + L_2]$ est obtenue par symétrie.

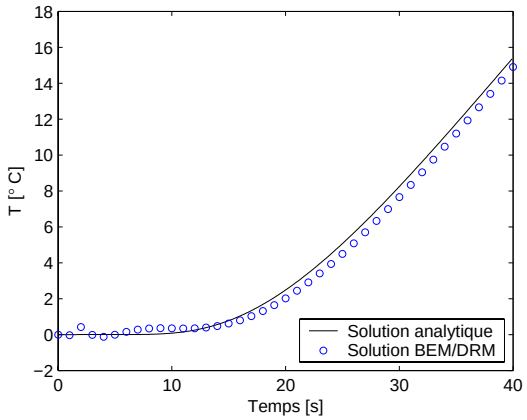


FIG. 3.35 – Comparaison des températures calculées analytiquement et numériquement (cas 7) en $x = 0,05$m

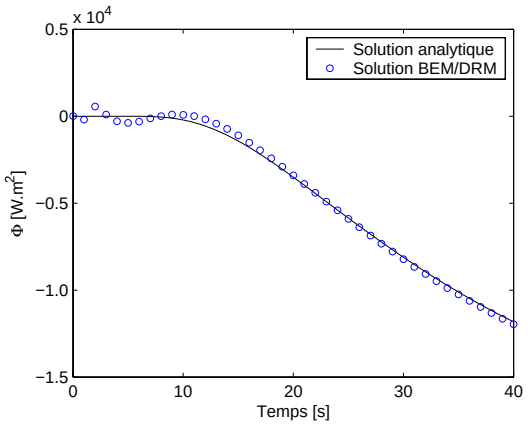


FIG. 3.36 – Comparaison des flux calculés analytiquement et numériquement (cas 7) en $x = 0,05$m

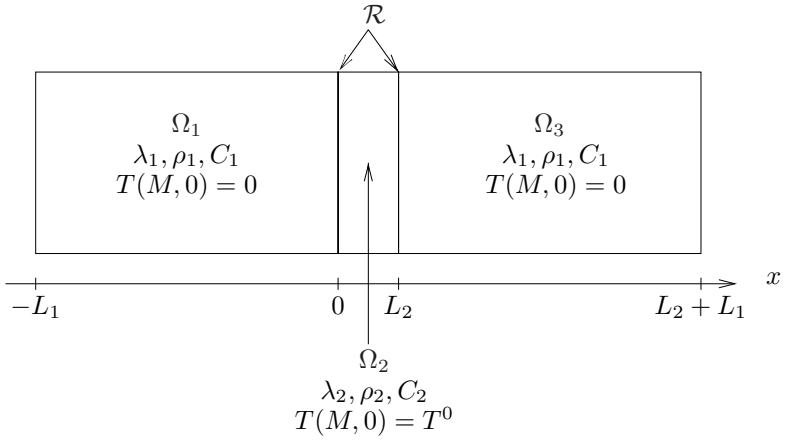


FIG. 3.37 – Problème transitoire N°2

Domaine	**Conductivité** λ **[W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Masse volumique** ρ **[kg.m^{-3}]**	**Capacité calorifique massique** C_P **[J.kg^{-1}.K^{-1}]**	**Longueur du domaine** L **[m]**	**Résistance thermique de contact** $\mathcal{R}$ **[m^2.K.W^{-1}]**
Ω_1	30	7800	500	0,1	10^{-3}
Ω_2	0,4	1000	1800	0,01	
Ω_3	30	7800	500	0,1	

TAB. 3.16 – Données numériques du problème transitoire N°2

Cette solution analytique se détermine en utilisant une transformée de Laplace puis en calculant la transformée inverse de la solution [142] :

$$\begin{aligned}
T_1(x,t) &= \frac{T^0\beta}{1+\beta}\left(\exp\left(\frac{-\alpha x}{\sqrt{a_1}}+\alpha^2 t\right)\operatorname{erfc}\left(\alpha\sqrt{t}-\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right)+\operatorname{erfc}\left(\frac{-x}{2\sqrt{a_1 t}}\right)\right) \text{ pour } -L_1 \leq x \leq 0 \\
T_2(x,t) &= T^0+\frac{T^0}{1+\beta}\left(\exp\left(\frac{\alpha x}{\sqrt{a_2}}+\alpha^2 t\right)\operatorname{erfc}\left(\alpha\sqrt{t}+\frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}\right)+\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}\right)\right) \text{ pour } 0 \leq x \leq \frac{L_2}{2} \\
&\text{où } \alpha = \frac{(1+\beta)\sqrt{a_2}}{\mathcal{R}\lambda_2},\ \beta = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}\sqrt{\frac{a_1}{a_2}} \text{ et } a_1 \text{ et } a_2 \text{ sont les diffusivités des différents domaines}
\end{aligned} \tag{3.73}$$

La dérivée dans la direction x permet d'obtenir les densités de flux dans les différents domaines :

$$\begin{aligned}
\phi_{1x}(x,t) &= -\lambda\frac{\partial T_1(x,t)}{\partial x} = -\frac{-\lambda_1 T^0\alpha\beta}{(1+\beta)\sqrt{a_1}}\left(\exp\left(-\frac{\alpha x}{\sqrt{a_1}}+\alpha^2 t\right)\operatorname{erfc}\left(\alpha\sqrt{t}-\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right)\right) \\
\phi_{2x}(x,t) &= -\lambda_2\frac{\partial T_2(x,t)}{\partial x} = -\lambda_2\frac{T^0\alpha}{(1+\beta)\sqrt{a_2}}\left(\exp\left(\frac{\alpha x}{\sqrt{a_2}}+\alpha^2 t\right)\operatorname{erfc}\left(\alpha\sqrt{t}+\frac{x}{2\sqrt{a_2 t}}\right)\right)
\end{aligned} \tag{3.74}$$

Solution BEM Pour la résolution par la méthode de la réciprocité duale, nous utiliserons un schéma implicite sur les températures et les flux. La fonction d'interpolation est choisie linéaire (la fonction spline ne semble pas donner des résultats satisfaisants pour des domaines présentant un fort rapport de forme). Le pas de temps est dans un premier temps égal à 1s.

Le maillage utilisé est constitué d'éléments linéaires discontinus. Le domaine 1 étant très conducteur et ne présentant pas de variations très fortes de la température, un maillage assez grossier est utilisé à la fois sur la frontière (taille d'élément 10^{-2}m) et à l'intérieur du domaine. Pour pouvoir placer des points internes suffisamment près de la frontière du domaine 2, un maillage très fin est utilisé sur toute la frontière (taille d'élément 4.10^{-3}m soit 5 éléments linéaires discontinus dans l'épaisseur).

Nous allons chercher à déterminer le nombre de points internes nécessaires dans l'épaisseur du domaine 2 et le pas de temps à utiliser. On réalise trois calculs avec successivement 2, 5 et 8 rangées d'éléments dans l'épaisseur. Dans tous les cas, le point interne le plus proche de la frontière est situé à une distance de la frontière environ égale à la longueur de l'élément.

Les évolutions de température dans les domaines 1 et 2 pour le maillage le plus fin sont représentées sur les figures 3.38 et 3.39. Les densités de flux sont représentées sur les figures 3.40 et 3.41.

On constate des oscillations de la température et du flux des points internes du domaine 2 dans les premiers instants du calcul. Le pas de temps étant faible, le front de chaleur n'atteint en effet pas le premier point interne lors de la première itération. L'augmentation du pas de temps à 5s permet de diminuer les oscillations des températures et des flux (figures 3.42 à 3.45) mais la précision sur les résultats est alors plus faible (tableau 3.17).

Si l'on tient absolument à utiliser un pas de temps faible (par exemple pour déterminer avec précision une durée de refroidissement), les autres solutions possibles sont l'utilisation d'un pas de temps variable ou de points internes plus près de la frontière. Dans ce cas, il serait nécessaire d'augmenter également le nombre d'éléments sur la frontière pour que le rapport de la distance du premier point interne à la frontière sur la longueur d'élément reste proche de 1.

Erreur maximale [%]	$\Delta t = 1s$	$\Delta t = 5s$
sur les températures à t=1s	9,52	-
sur les températures à t=5s	4,19	4,60
sur les températures à t=10s	2,60	3,00
sur les densités de flux à t=1s	28,70	-
sur les densités de flux à t=5s	39,07	54,22
sur les densités de flux à t=10s	20,94	31,70
sur les densités de flux à t=20s	9,57	12,14

TAB. 3.17 – Erreur des solutions numériques par rapport à la solution analytique en fonction du pas de temps

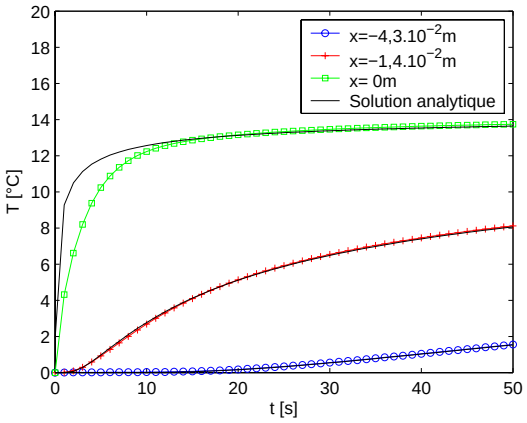


FIG. 3.38 – Comparaison des températures dans le domaine 1 aux solutions analytiques ($\Delta t = 1s$)

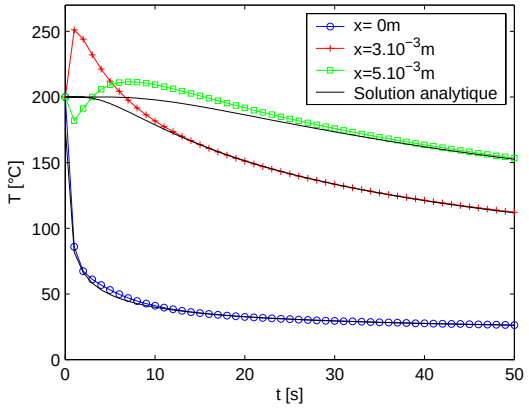


FIG. 3.39 – Comparaison des températures dans le domaine 2 aux solutions analytiques ($\Delta t = 1s$)

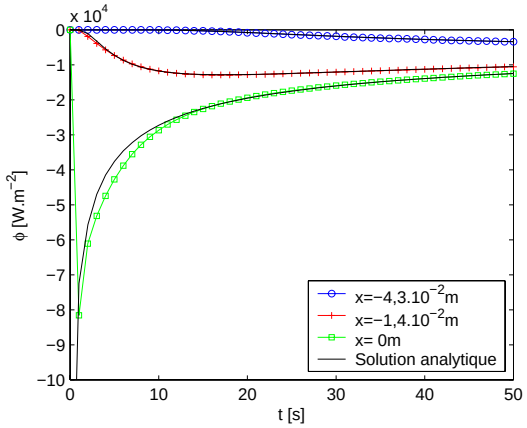


FIG. 3.40 – Comparaison des densités de flux dans le domaine 1 aux solutions analytiques ($\Delta t = 1s$)

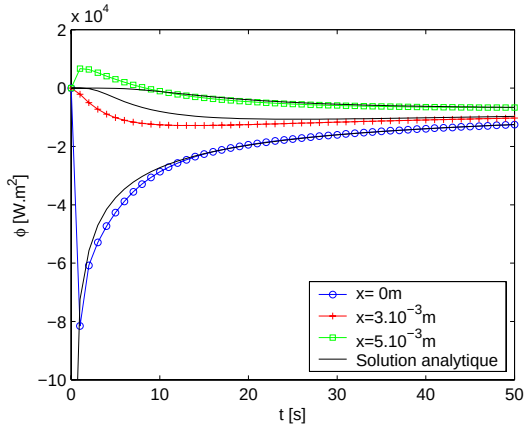


FIG. 3.41 – Comparaison des densités de flux dans le domaine 2 aux solutions analytiques ($\Delta t = 1s$)

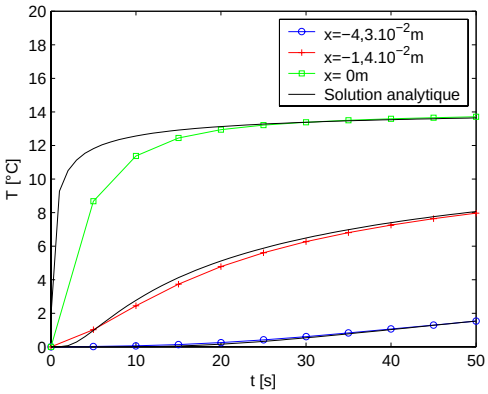


FIG. 3.42 – Comparaison des températures dans le domaine 1 aux solutions analytiques ($\Delta t = 5s$)

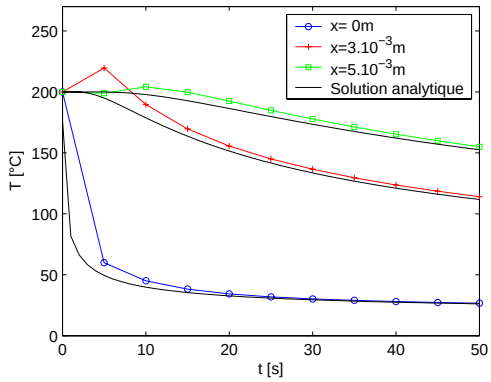


FIG. 3.43 – Comparaison des températures dans le domaine 2 aux solutions analytiques ($\Delta t = 5s$)

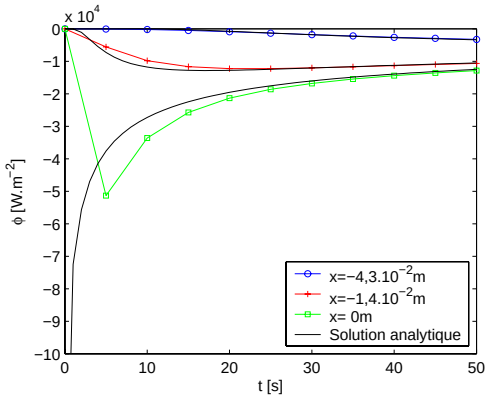


FIG. 3.44 – Comparaison des densités de flux dans le domaine 1 aux solutions analytiques ($\Delta t = 5s$)

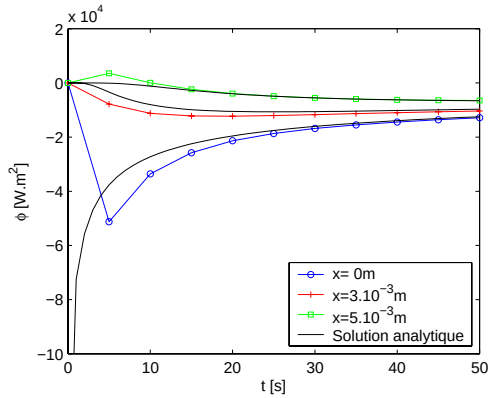


FIG. 3.45 – Comparaison des densités de flux dans le domaine 2 aux solutions analytiques ($\Delta t = 5s$)

L'utilisation d'un nombre plus grand de points internes dans l'épaisseur permet globalement de mieux représenter les forts gradients de température dans l'épaisseur (figure 3.46). Toutefois, à partir d'un certain nombre (passage de 5 à 8) l'amélioration est minime. Dans tous les cas, on constate une augmentation de la température des points internes les plus proches de la frontière lors des premiers pas de temps (figure 3.47).

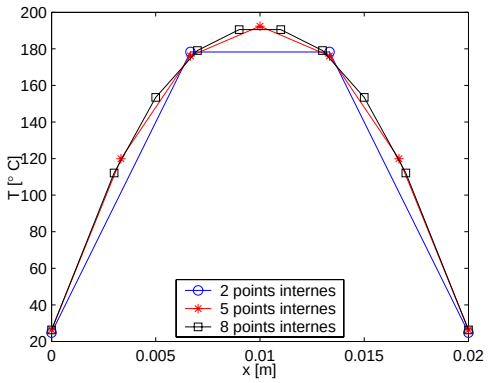


FIG. 3.46 – Répartition de la température dans l'épaisseur du domaine 2 en fonction du nombre de points internes ($t = 50s$)

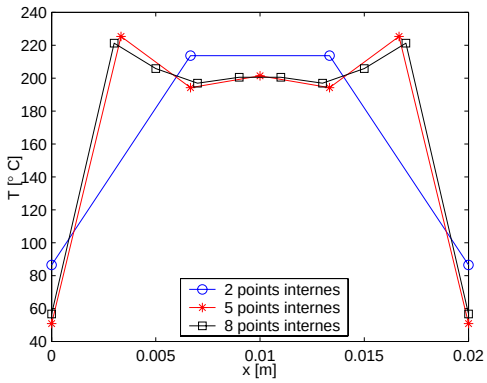


FIG. 3.47 – Répartition de la température dans l'épaisseur du domaine 2 en fonction du nombre de points internes ($t = 5s$)

En conclusion, la méthode de la réciprocité duale permet bien de représenter le refroidissement d'un matériau peu conducteur et de faible épaisseur avec un matériau très conducteur. La difficulté réside toutefois dans le choix du maillage et du pas de temps. Si l'on désire une précision importante, un maillage très fin du domaine peu conducteur sera nécessaire mais nécessitera un temps de calcul très grand. Au contraire, un maillage grossier donnera des résultats peu précis et obligera à utiliser un pas de temps très grand.

Conclusion

Dans ce chapitre, la méthode des éléments frontières utilisée pour la résolution des modèles thermiques lors de l'injection a été présentée. Dans la première partie du chapitre, la résolution des problèmes stationnaires linéaires a été effectuée par la méthode de base des éléments frontières. La résolution des problèmes transitoires linéaires est réalisée grâce à la méthode de la réciprocité duale de manière à conserver une formulation ne nécessitant pas d'intégrales volumiques. Ces deux formulations ont été adaptées à la résolution de problèmes convectifs et multidomaines.

La validation des méthodes et de leur implantation a été réalisée par comparaison des solutions analytiques pour des problèmes de géométrie simple mais correspondant aux problèmes définis dans le chapitre 2 (en particulier pour les conditions aux limites). Les calculs de validation ont montré une grande influence des paramètres de calcul, en particulier le nombre et le type d'éléments pour les calculs stationnaires. Dans les cas transitoires, on a de plus une influence du pas de temps et des schémas d'interpolation temporelle. La difficulté de la méthode de la réciprocité duale est de choisir convenablement les valeurs de ces paramètres selon le problème à résoudre. Des comparaisons à des mesures expérimentales réalisées sur un moule d'injection instrumenté seront présentées dans le chapitre 5.

Chapitre 4

Procédure d'optimisation du refroidissement des moules d'injection

L'objectif de ce chapitre est de présenter la procédure mise en place pour l'optimisation du refroidissement des moules d'injection. Le problème consiste à déterminer les valeurs optimales de la position et de la taille des canaux de refroidissement positionnés dans le moule et des autres paramètres contrôlant le refroidissement, en particulier la température du réfrigérant.

Dans un premier temps, un recensement des méthodes utilisées dans la bibliographie pour résoudre ce type de problèmes sera réalisé. D'une manière plus générale, les méthodes applicables pour l'optimisation et l'analyse de sensibilité seront étudiées et comparées.

Dans un second temps, l'algorithme mis en place pour résoudre le problème sera présenté (paragraphe 4.4). Le problème d'optimisation complet sera alors décrit en insistant sur les objectifs, paramètres et contraintes utilisés. Le choix de la méthode d'optimisation et l'algorithme utilisé seront présentés dans le paragraphe 4.6. Enfin, les méthodes d'analyse de sensibilité utilisées et leurs implantations dans la procédure de résolution et d'optimisation seront détaillées dans le paragraphe 4.7.

4.1 Méthodes d'optimisation utilisées pour des problèmes de positionnement et dimensionnement de canaux de refroidissement

Le problème d'optimisation de la taille et de la position de canaux de refroidissement dans les moules d'injection a été déjà été traité à l'aide de différentes méthodes :

- Tang [84, 85] préfère une méthode de pénalités extérieures couplée avec une méthode de directions conjuguées pour l'optimisation sous contraintes de la position et de la taille des canaux (2D) ;
- les méthodes de gradient (sans contraintes) sont utilisées par Zhou [77] pour optimiser en 3D la forme de l'axe des canaux et par Matsumoto [76] en 2D pour choisir la section et la position des canaux dans une section de moule ;
- Huang [86] utilise une méthode de programmation quadratique séquentielle pour optimiser, sous contraintes, la géométrie des canaux de refroidissement et la distribution d'un matériau plus conducteur dans le moule ;
- la méthode des directions conjuguées de Fletcher-Reeves est utilisée pour déterminer les diamètres et températures de réfrigérants optimales par Pandelidis [82] sur des sections de moule ;
- Park [78, 79] utilise la méthode des Lagrangiens augmentés pour déterminer la position des canaux par rapport à une plaque. Bigio [143] utilise cette même méthode pour uniformiser les températures et le temps de refroidissement mais note une forte influence des valeurs initiales des paramètres ;

– Lin [56] choisit une méthode de recuit simulé pour l'optimisation de la taille des canaux et de leur position relative et par rapport à la cavité moulante.

Les optimisations sont presque toujours réalisées sur des paramètres décrivant une unique section bidimensionnelle de moule, même si la résolution numérique est tridimensionnelle. Park [78, 79] montre que cette technique, qui permet de réduire le nombre de paramètres, fonctionne bien pour des géométries simples (plaques et boîtes). Elle ne permet alors pas de prendre en compte tous les détails géométriques des pièces et du moule. Tang [85] utilise l'exemple d'une plaque trouée pour montrer les erreurs de calcul du temps de refroidissement si le calcul et l'optimisation sont réalisés sur une section simplifiée.

Les objectifs d'optimisation retenus par les différents auteurs sont également variables. On peut citer par exemple :
– la différence maximale de température et l'écart à la température moyenne à l'interface moule/polymère au moment de l'éjection [84],
– la différence de température à la surface de la cavité par rapport à une température cible [76, 77],
– l'uniformité de température dans la pièce et à la surface du moule au moment de l'éjection [82],
– l'écart de température en surface du moule par rapport à la valeur moyenne et le temps de refroidissement calculé analytiquement [79],
– les distorsions des pièces (obtenues par un modèle thermomécanique) [56].

Ce problème d'optimisation n'est pas propre au procédé d'injection et se pose aussi pour la régulation thermiques des filières d'extrusion. La méthode du gradient conjugué de Fletcher et Reeves est par exemple utilisée par Fradette [144] pour optimiser la position et la taille de canaux de refroidissement de filières d'extrusion de profilés PVC. L'objectif recherché est le même que le problème d'injection : minimiser la température moyenne pour diminuer les temps de refroidissement et uniformiser les températures pour améliorer la qualité. La méthode de calcul utilisée (éléments fictifs) est intéressante car elle permet la superposition de plusieurs canaux de refroidissement et donc indirectement de faire varier leur nombre pendant l'optimisation.

Une autre application concerne le refroidissement de pales de turbines. Dulikravich [145] utilise un algorithme quasi-newtonien pour optimiser les sections de passage du réfrigérant de manière à obtenir le flux désiré sur la face externe. La résolution par la méthode des éléments frontières est particulièrement adaptée dans ce cas puisqu'elle permet d'obtenir directement les flux nécessaires au calcul de l'objectif.

Pour des problèmes semblables, les méthodes retenues selon les auteurs sont très différentes. Les informations nécessaires à une comparaison de l'efficacité en terme de rapidité de convergence ou de précision des résultats sont insuffisantes pour déterminer une méthode optimale. Une étude comparative des principales méthodes d'optimisation est donc présentée ci-dessous pour dégager les avantages des différentes méthodes et des critères de choix d'une méthode d'optimisation adaptée.

4.2 Méthodes d'optimisation non linéaires sous contraintes

On cherche à résoudre un problème de minimisation non linéaire sous contraintes non linéaires. D'une manière générale, ce type de problèmes peut se mettre sous la forme (4.1) où $\mathcal{P}$ est le vecteur des paramètres d'optimisation, Φ est la fonction objectif, g sont les contraintes inégalités et h les contraintes égalités. Les fonctions Φ, g et h sont supposées non linéaires.

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathcal{P}\in\mathbb{R}^n} \Phi(\mathcal{P}) \\ g_i(\mathcal{P}) \leq 0 \quad \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, m_g\} \\ h_j(\mathcal{P}) = 0 \quad \forall j \in J = \{1, 2, \cdots, m_h\} \end{cases} \tag{4.1}$$

Selon les propriétés des fonctions Φ, g et h, différentes méthodes sont envisageables pour résoudre ce problème :

- les méthodes déterministes de programmation mathématique qui comprennent :
  - les méthodes de programmation mathématique utilisant les dérivées des fonctions Φ, g et h,
  - les méthodes de programmation mathématique n'utilisant pas les dérivées,
- les méthodes non déterministes basées sur une exploration plus ou moins aléatoire de l'espace des solutions.

Les méthodes de base les plus connues pour résoudre les problèmes d'optimisation continue à un seul objectif sont résumées sur la figure (4.1). Le principe des méthodes par programmation mathématiques non linéaires sans et avec contraintes ainsi que des méthodes non déterministes sont rappelées en annexe E.

Les critères importants à considérer pour le choix d'une méthode d'optimisation sont (d'après [148]) :

- la fiabilité ou convergence globale, c'est-à-dire la capacité à déterminer un optimum global parmi plusieurs optimums locaux,
- la vitesse de convergence locale,
- la précision.

Le tableau 4.1 présente un comparatif des propriétés des méthodes d'optimisation selon les trois critères précédents et la facilité de mise en œuvre.

Fiabilité D'une manière générale, la fiabilité d'une méthode dépendra de la forme de la fonction objectif. Renders [148] propose ainsi une méthode de choix des méthodes d'optimisation selon le relief de la fonction à optimiser.

D'une manière générale, la convergence des méthodes d'optimisation par programmation mathématique vers un optimum global est soumise à des conditions très restrictives sur la fonction et les contraintes. Ces méthodes seront plus performantes pour une fonction objectif linéaire, quadratique, unimodale (un seul optimum) ou multimodale simple. Répéter l'optimisation en utilisant plusieurs points initiaux permet d'améliorer la fiabilité dans les autres cas.

Les méthodes aléatoires présentent dans tous les cas une très bonne fiabilité. L'algorithme de recuit simulé est particulièrement adapté pour des fonctions présentant un grand nombre d'optimums locaux (fonctions unimodales bruitées) car les solutions intermédiaires locales sont autorisées. La méthode est par exemple performante pour trouver l'optimum de la fonction de Rastrigin (4.2) dont la surface est représentée sur la figure 4.2.

$$f(x, y) = -20 - x^2 - y^2 + 10\left(\cos(2\pi x) + \cos(2\pi y)\right) \tag{4.2}$$

Les algorithmes génétiques sont particulièrement performants pour l'optimisation de fonctions présentant de nombreux optimums locaux qui ne sont pas disposés de manière aléatoire et contiennent donc une information sur la position des autres optimums. Enfin, les méthodes de recherche totalement aléatoire seront les seules fiables pour des fonctions multi-modales sans structure (position des extremums locaux totalement aléatoire).

Vitesse de convergence Les méthodes de programmation mathématique présentant la vitesse de convergence locale la plus élevée sont les méthodes du second ordre (convergence superlinéaire ou quadratique). L'utilisation de ces méthodes pourra donc permettre de réduire le nombre d'itérations, si l'on se trouve initialement suffisamment proche de l'optimum.

La convergence des méthodes aléatoires et évolutionnaires sont en général beaucoup moins bonnes et ces méthodes nécessitent un très grand nombre d'évaluations de la fonction objectif. Elles seront donc pénalisantes si le calcul de la fonction objectif est long.

- Optimisation continue mono−objectif
  - Méthodes déterministes par programmation mathématique
    - Programmation linéaire — **Algorithme du simplexe**
    - Optimisation unidimensionnelle
      - Avec dérivées — **Méthode de Newton−Raphson**, **Méthode de la sécante**, **Méthode de dichotomie**
      - Sans dérivées — **Interpolation polynomiale**, **Méthode de dichotomie**, **Méthode de la suite de Fibonacci**, **Méthode du nombre d'or**
    - Optimisation non linéaire sans contrainte
      - Fonctions différentiables
        - Méthodes de gradient — **Méthode du gradient à pas prédéterminé**, **Méthode de la plus forte pente**, **Méthode de la plus forte pente accélérée**
        - Méthode de second ordre — Directions conjuguées — **Méthode du gradient conjugué**, **Methode de Fletcher−Reeves**; **Méthode de Newton**; **Méthodes quasi−newtoniennes (Algorithmes DFP et BFGS)**
      - Fonctions non partout différentiables — **Méthodes de sous−gradient**
      - Optimisation sans dérivées — **Méthode de Powell**
    - Programmation quadratique (sous contraintes linéaires) — **Méthode par élimination généralisée**, **Méthode par activation de contraintes**
    - Optimisation non linéaires sous contraintes
      - Méthodes primales
        - Changement de variables
        - Directions réalisables — **Méthode du gradient projeté**, **Méthode du gradient réduit**, **Méthode du gradient réduit généralisé**
        - Méthodes par linéarisation
      - Résolution des conditions de Kuhn−Tucker — **Méthode de Newton**, **Méthode de Wilson**
      - Méthodes duales
        - Méthodes de pénalités — **Méthode des pénalités intérieures**, **Méthode des pénalités extérieures**
        - Méthodes Lagrangiennes — **Algorithme d'Uzawa et d'Arrow Hurwicz**, **Algorithme de Dantzig**, **Méthode des Lagrangiens augmentés**
  - Méthodes non déterministes ou stochastiques
    - Méthodes de voisinage — **Méthode de Monte−Carlo**, **Méthode du Recuit Simule**
    - Méthodes distribuées — **Algorithmes génétiques**

FIG. 4.1 – Principales méthodes applicables à l'optimisation continue mono-objectif (d'après [146], [147] et [148])

Méthode	Convergence globale	Vitesse de convergence locale	Précision	Mise en œuvre
Gradient projeté [146]	Non (oui en pratique pour des contraintes linéaires)	Linéaire, très lente pour des problèmes mal conditionnés	Bonne	Délicate à mettre en œuvre pour des cas généraux
Gradient réduit [146, 147]	Non (sous la forme de base)	Linéaire, très lente pour des problèmes mal conditionnés	Bonne	Impose des contraintes linéaires
Gradient réduit généralisé [146]	Oui, sous des conditions très restrictives	Linéaire, très lente pour des problèmes mal conditionnés	Bonne	Délicate à mettre en œuvre pour des cas généraux
Newton et Wilson [146, 147, 149]	Non si loin de l'optimum	Quadratique (superlinéaire avec des algorithmes quasi-newtoniens)	Bonne	Se ramène à une optimisation quadratique
Pénalités (extérieures et intérieures) [146, 147]	Oui, sous des conditions peu restrictives	Dépend de la méthode sans contrainte utilisée (superlinéaire pour quasi-Newton ou gradient conjugué)	Faible	Se ramène à une optimisation sans contraintes
Uzawa et Arrow-Hurwicz [146]	(?)	Linéaire	Bonne	Se ramène à une optimisation sans contraintes
Dantzig [146]	(?)	(?)	Bonne	Se ramène à une optimisation linéaire sous contraintes
Lagrangiens augmentés [146, 147]	Non (sous la forme de base)	Selon la méthode sans contraintes utilisée (linéaire à quadratique)	Bonne, améliorée par rapport aux pénalités	Se ramène à une optimisation sans contraintes
Monte-Carlo et Recuit simulé [150]	Bonne	Faible (nécessitent un grand nombre de calculs)	Faible	Ne nécessite que des calculs directs
Algorithmes génétiques [148]	Très bonne	Faible (nécessite un grand nombre de calculs)	Faible	Nécessite le choix d'options d'optimisation influentes sur la qualité de la résolution

TAB. 4.1 – Tableau comparatif des méthodes d'optimisation non linéaire sous contraintes

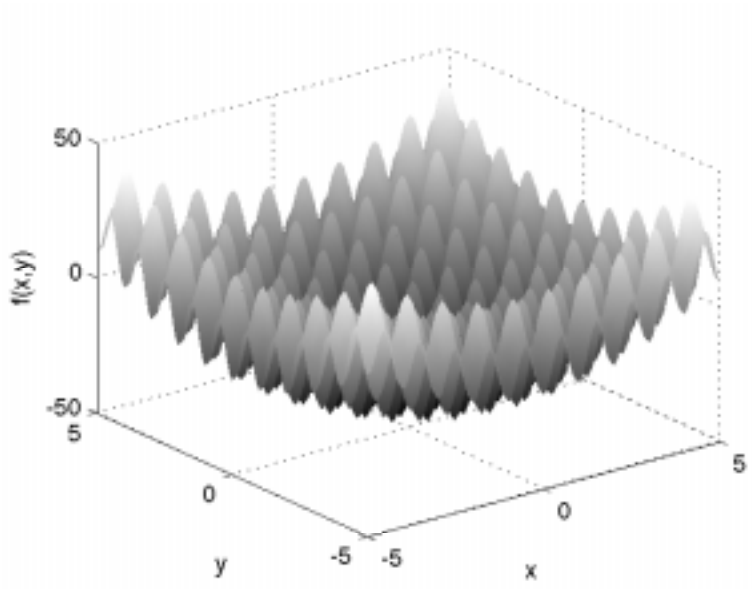


FIG. 4.2 – Tracé de la fonction de Rastrigin

Précision D'une manière générale, les méthodes aléatoires sont beaucoup moins précises que les méthodes de programmation pour un même nombre d'évaluations de la fonction. Elles seront donc à éviter si l'on souhaite une grande précision des résultats.

Mise en œuvre La mise en œuvre des méthodes aléatoires est bien entendu bien plus facile puisque l'optimisation ne nécessite alors que des calculs directs de l'objectif. L'utilisation des algorithmes génétiques demande toutefois la création de mécanismes de sélection, reproduction et mutation qui doivent parfois être spécifiques au problème pour de meilleurs résultats.

Les méthodes de programmation mathématique sont plus ou moins complexes à mettre en œuvre. Dans les cas, on devra au moins calculer les dérivées de l'objectif et des contraintes. Les méthodes de gradient sont à éviter car elles doivent être adaptées à chaque type de problème. Les autres méthodes se ramènent à des problèmes linéaires ou quadratiques avec ou sans contraintes dont les techniques de résolution sont généralement très bien connues.

Choix des méthodes en fonction des critères Le choix d'une méthode d'optimisation dépend principalement des besoins de l'utilisateur. Si l'on cherche à optimiser sans trop de précision une fonction présentant de nombreux optimums locaux et si le temps de calcul n'est pas un facteur pénalisant, les méthodes aléatoires et d'évolution sont les mieux adaptées.

Les méthodes de programmation mathématique sont au contraire beaucoup plus performantes et précises pour l'optimisation de fonctions simples (présentant peu d'optimums locaux). Leur mise en œuvre est également plus délicate.

Enfin, l'utilisation de méthodes hybrides permet de combiner les avantages des deux types de méthodes : augmenter la fiabilité et la précision tout en diminuant le temps de calcul. On pourra par exemple s'approcher de l'optimum global par une méthode aléatoire puis affiner le résultat par une méthode déterministe. On pourra

aussi utiliser un grand nombre de points initiaux choisis aléatoirement et réaliser des optimisations déterministes à partir de tous ces points.

4.3 Méthodes d'analyse de sensibilité

Les méthodes d'optimisation mathématiques nécessitent le calcul des dérivées (premières et éventuellement secondes) des fonctions objectifs et des contraintes. Les méthodes possibles pour ce calcul d'analyse de sensibilité sont présentées dans ce paragraphe.

On considère une fonction Φ d'un vecteur de paramètres $\mathcal{P} = [p_1\, p_2 \cdots p_p]$. Dans notre cas, cette fonction est également indirectement fonction de $\mathcal{P}$ par l'intermédiaire de la température $T(\mathcal{P})$ et du gradient de température $q(\mathcal{P})$ qui sont obtenus par la résolution par éléments frontières :

$$\Phi(\mathcal{P}) = \Psi(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}) \tag{4.3}$$

L'objectif est d'obtenir la dérivée de la fonction objectif par rapport à un paramètre p de l'ensemble $\mathcal{P}$: $\frac{\partial \Phi}{\partial p}$ pour une utilisation dans les méthodes d'optimisation. Dans le cas de contraintes linéaires, le calcul des dérivées est direct. Par contre, une approche semblable à celle présentée pour la fonction objectif doit être utilisée pour les contraintes non linéaires.

La complexité des problèmes rend très difficile le calcul des dérivées analytiquement pour des cas réalistes. L'analyse de sensibilité peut être effectuée par trois grandes méthodes numériques présentées, par exemple, par Tortorelli [151] :
- la méthode des différences finies,
- la méthode par différentiation directe,
- la méthode de l'état adjoint.

Un aperçu de chaque méthode est donné ci-dessous dans le cas d'une utilisation avec une résolution des problèmes thermiques par la méthode des éléments frontières.

4.3.1 Calcul par différences finies

Cette méthode, utilisée notamment par Dulikravich [145] et Martin [152] avec une résolution par éléments frontières de l'équation de la chaleur, est très simple à mettre en œuvre pour approcher la dérivée d'un objectif. Celle-ci s'exprime par :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\Phi(\mathcal{P} + \Delta p) - \Phi(\mathcal{P})}{\Delta p} \tag{4.4}$$

Dans ce cas, le nombre de calculs de la fonction objectif à effectuer est de $p + 1$ pour p paramètres. Cette méthode est la plus simple à mettre en œuvre mais reste peu précise. D'autre part, l'influence de la taille du pas Δp est importante. Un pas trop grand conduit à une mauvaise approximation de la dérivée alors que pour un pas trop faible, la dérivée obtenue est fortement dépendante de la précision du calcul de la fonction Φ.

L'erreur est de l'ordre de $o(\Delta p)$ donc une faible perturbation conduit à une meilleure précision. Toutefois, pour des perturbations trop faibles, l'erreur d'approximation peut devenir importante [151, 152]. Il existe donc généralement un intervalle de perturbations dans lequel le calcul par différences finies permet d'obtenir un résultat assez précis comme montré sur la figure 4.3 entre 10^{-4} et 10^{-3}.

L'utilisation de différences finies centrées (équation 4.5) permet d'améliorer la précision mais le nombre de calculs passe à $2p + 1$.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\Phi(\mathcal{P} + \Delta p) - \Phi(\mathcal{P} - \Delta p)}{\Delta p} \tag{4.5}$$

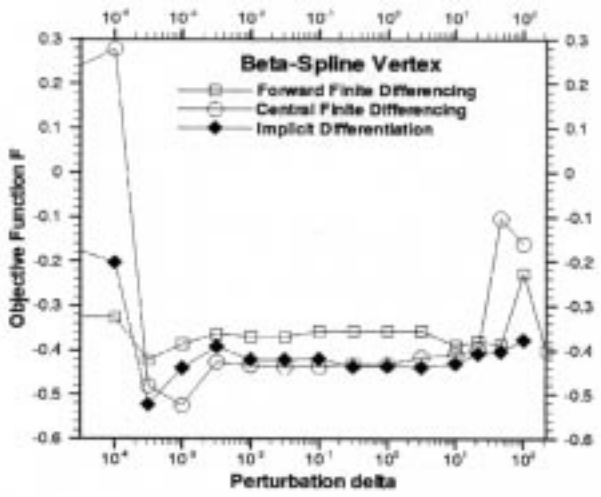


FIG. 4.3 – Effet de la perturbation sur le calcul de la sensibilité calculée par différences finies [152]

4.3.2 Calcul par différentiation directe

Le calcul par différentiation directe est très populaire dans le cas d'une résolution par éléments frontières. Prasad [153], Park [154, 155] et Martin [152] l'utilisent pour déterminer les sensibilités de la température et du flux sur les frontières et aux points internes pour des problèmes stationnaires 3D.

La dérivée de la fonction Φ s'écrit à partir des dérivées des températures $\frac{\partial T}{\partial p}$ et des gradients de température $\frac{\partial q}{\partial p}$:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\partial \Psi}{\partial T}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)\frac{\partial T}{\partial p}(\mathcal{P}) + \frac{\partial \Psi}{\partial q}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)\frac{\partial q}{\partial p}(\mathcal{P}) + \frac{\partial \Psi}{\partial p}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) \tag{4.6}$$

Sur la frontière du domaine, la méthode des éléments frontières permet d'écrire l'équation de la chaleur sous la forme discrétisée (4.7) pour un problème stationnaire. Les matrices H et G et les vecteurs T et q sont tous ici des fonctions du vecteur de paramètres $\mathcal{P}$.

$$[H(\mathcal{P})]\{T(\mathcal{P})\} - [G(\mathcal{P})]\{q(\mathcal{P})\} = 0 \tag{4.7}$$

La méthode consiste à dériver directement cette équation pour obtenir le système suivant pour chaque paramètre :

$$[H(\mathcal{P})]\left\{\frac{\partial T}{\partial p}(\mathcal{P})\right\} + \left[\frac{\partial H}{\partial p}(\mathcal{P})\right]\{T(\mathcal{P})\} = [G(\mathcal{P})]\left\{\frac{\partial q}{\partial p}(\mathcal{P})\right\} + \left[\frac{\partial G}{\partial p}(\mathcal{P})\right]\{q(\mathcal{P})\} \tag{4.8}$$

La résolution directe du problème a déjà permis de calculer G, H, T et q. Pour pouvoir résoudre ce système, il faut donc calculer les matrices $\frac{\partial G}{\partial p}$ et $\frac{\partial H}{\partial p}$ ainsi que les dérivées des conditions aux limites.

La résolution du système se fait alors de la même manière que le problème direct en introduisant les dérivées des conditions aux limites. La résolution du système permet alors de déterminer les dérivées $\frac{\partial T}{\partial p}$ et $\frac{\partial q}{\partial p}$ inconnues sur la frontière et calculer le résultat de l'équation (4.6).

Au total, pour p paramètres et quel que soit le nombre d'objectifs, le calcul de sensibilité nécessite l'assemblage de p matrices dérivées de G et H et la résolution de p systèmes linéaires de la forme (4.8).

4.3.3 Calcul par la méthode de l'état adjoint

Cette méthode est utilisée pour déterminer les sensibilités d'un objectif par rapport à des conditions aux limites par Meric [156] ou à des paramètres géométriques définissant le domaine de calcul par Park [157] et Aithal [158].

La méthode permet de calculer la dérivée de la fonction objectif sans jamais calculer explicitement les dérivées de la température $T(\mathcal{P})$ et du gradient de température $q(\mathcal{P})$. Pour cela, on définit la fonction augmentée $\hat{\Psi}$ en introduisant des multiplicateurs de Lagrange κ :

$$\hat{\Psi}(\mathcal{P}) = \Psi\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) - \kappa\left(H(\mathcal{P})T(\mathcal{P}) - G(\mathcal{P})q(\mathcal{P})\right) \tag{4.9}$$

La fonction initiale Ψ et la fonction augmentée $\hat{\Psi}$ ont la même sensibilité puisque $T(\mathcal{P})$ et $q(\mathcal{P})$ sont solutions du problème direct et vérifient donc $[H(\mathcal{P})]\{T(\mathcal{P})\} = [G(\mathcal{P})]\{q(\mathcal{P})\}$.

La dérivée de la fonction augmentée s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\Psi}}{\partial p}(\mathcal{P}) = \frac{\partial\Psi}{\partial T}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)\frac{\partial T}{\partial p}(\mathcal{P}) + \frac{\partial\Psi}{\partial q}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)\frac{\partial q}{\partial p}(\mathcal{P}) + \frac{\partial\Psi}{\partial p}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right)\\ - \kappa\left(\frac{\partial H}{\partial p}T(\mathcal{P}) + H(\mathcal{P})\frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial G}{\partial p}q(\mathcal{P}) - G(\mathcal{P})\frac{\partial q}{\partial p}\right)\end{aligned} \tag{4.10}$$

En réorganisant l'équation précédente, la dérivée peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\Psi}}{\partial p}(\mathcal{P}) = \frac{\partial\Psi}{\partial p}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) - \kappa\left(\frac{\partial H}{\partial p}T(\mathcal{P}) - \frac{\partial G}{\partial p}q(\mathcal{P})\right)\\ + \frac{\partial T}{\partial p}(\mathcal{P})\left(\frac{\partial\Psi}{\partial T}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) - \kappa H(\mathcal{P})\right) + \frac{\partial q}{\partial p}(\mathcal{P})\left(\frac{\partial\Psi}{\partial q}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) + \kappa G(\mathcal{P})\right)\end{aligned} \tag{4.11}$$

$\frac{\partial T}{\partial p}$ et $\frac{\partial q}{\partial p}$ sont connus respectivement sur Γ_T et Γ_ϕ. Il reste donc à choisir les multiplicateurs κ de manière à annuler les facteurs des termes inconnus $\frac{\partial T}{\partial p}$ sur Γ_ϕ et $\frac{\partial q}{\partial p}$ sur Γ_T. κ doit donc être choisi de manière à vérifier le problème adjoint suivant de l'équation (4.12) qui correspond à la forme discrétisée du problème continu proposé par Meric [156].

$$\begin{cases}\dfrac{\partial\Psi}{\partial T}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) - \kappa H(\mathcal{P}) = 0 \text{ sur } \Gamma_\phi\\ \dfrac{\partial\Psi}{\partial q}\left(T(\mathcal{P}), q(\mathcal{P}), \mathcal{P}\right) + \kappa G(\mathcal{P}) = 0 \text{ sur } \Gamma_T\end{cases} \tag{4.12}$$

Une fois que κ a été calculé, la dérivée de la fonction objectif est obtenue à partir de l'équation (4.11). Le calcul de sensibilité nécessite donc la résolution d'un problème adjoint pour chaque objectif, indépendamment du nombre de paramètres. Pour cela, les chargements adjoints $\frac{\partial\Psi}{\partial T}$ et $\frac{\partial\Psi}{\partial q}$ doivent être évalués pour chaque objectif. Malheureusement, l'assemblage des matrices dérivées de G et H est toujours nécessaire pour chaque paramètre afin de calculer l'expression (4.11).

4.3.4 Comparaison des méthodes

La méthode de calcul par différences finies est la plus facile à mettre en œuvre mais aussi la plus coûteuse en calculs et la moins précise. Les méthodes par différentiation et par résolution de l'état adjoint permettent d'améliorer la précision, sans avoir à se soucier du choix des pas de perturbations.

Le choix entre ces deux méthodes se fera selon deux critères : le rapport du nombre de paramètres sur le nombre de fonctions à dériver et la mise en œuvre. En théorie, la méthode par différentiation est plus rapide pour un nombre élevé d'objectifs par rapport au nombre de paramètres et est plus facile à mettre en œuvre. La méthode de l'état adjoint est au contraire plus efficace dans la situation inverse mais nécessite la mise en place du problème adjoint.

En pratique, pour une résolution par éléments frontières, ces deux méthodes de calcul nécessitent l'assemblage des matrices pleines $\frac{\partial G}{\partial p}$ et $\frac{\partial H}{\partial p}$. Cette étape d'assemblage est généralement beaucoup plus longue que l'étape de résolution du système. La méthode de l'état adjoint perd donc une partie de son avantage par rapport à la méthode par différentiation.

Enfin, on peut noter que ces trois méthodes restent utilisables avec un calcul transitoire pour lequel la fonction objectif et les contraintes sont des fonctions du temps t. Tortorelli [159] et Haftka [160] développent les équations obtenues par différentiation et par la méthode de l'état adjoint pour les problèmes transitoires résolus par la méthode des éléments finis. Une attention particulière doit toutefois être apportée au choix du schéma temporel pour la résolution, sous peine de voir la précision chuter.

4.4 Algorithme de la procédure d'optimisation

La figure 4.4 présente l'algorithme qui a été mis en place pour réaliser l'optimisation en reliant :
- l'étape de simulation numérique par éléments frontières (BEM),
- l'étape d'analyse de sensibilité,
- la méthode d'optimisation.

Les données à fournir sont :
- les données nécessaires à la résolution du problème thermique :
  - la géométrie et les paramètres nécessaires au maillage,
  - les conditions limites et initiales,
  - les propriétés matériaux,
- les données nécessaires à l'optimisation :
  - les paramètres à optimiser,
  - l'objectif recherché,
  - les contraintes à respecter,
- un point de départ pour la procédure (jeu de paramètres initiaux).

Les choix réalisés pour les données d'optimisation sont détaillés dans le paragraphe 4.5. La résolution par éléments frontières a été détaillée dans le chapitre 3 et sera validée dans le chapitre 5 dans le cas des transferts thermiques en injection. L'analyse de sensibilité est effectuée soit par différences finies soit par différentiation. Les détails de l'implantation sont dans le paragraphe 4.7. La méthode d'optimisation retenue est la méthode de programmation quadratique séquentielle ou *sequential quadratic programming* (SQP). La fonction *fmincon* du module d'optimisation de Matlab® a été utilisée. Les raisons de ce choix et les détails de l'algorithme sont explicités dans le paragraphe 4.6.

L'optimisation est une procédure itérative (on note k l'itération en cours). L'algorithme se déroule comme suit : à l'état initial ($k = 0$), on dispose d'un ensemble de paramètres $\mathcal{P}^0$, la simulation numérique par la méthode des éléments frontières permet d'obtenir des résultats en température $T(\mathcal{P}^k)$ et en flux $\phi(\mathcal{P}^k)$. Ces résultats sont utilisés pour évaluer la valeur de l'objectif $\Phi(\mathcal{P}^k)$ et des contraintes $g(\mathcal{P}^k)$ et $h(\mathcal{P}^k)$. Parallèlement, l'analyse de sensibilité permet de déterminer les dérivées de l'objectif ($\nabla\Phi(\mathcal{P}^k)$) et des contraintes ($\nabla g(\mathcal{P}^k)$ et $\nabla h(\mathcal{P}^k)$) par rapport aux paramètres.

Tant que les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits pour le jeu de paramètres $\mathcal{P}^k$, la méthode d'optimisation est utilisée pour calculer un nouveau jeu de paramètres à partir des résultats de la simulation et de l'analyse de sensibilité. Pour cela, on détermine une direction de progression d^k et un pas α^k par la résolution d'un sous problème quadratique défini par la matrice Hessienne H^k. Le nouveau jeu de paramètres est alors $\mathcal{P}^{k+1} = \mathcal{P}^k + \alpha^k d^k$.

Ce nouveau jeu de paramètres est utilisé pour définir les données de la simulation suivante : un nouveau maillage est réalisé et les conditions aux limites sont mises à jour.

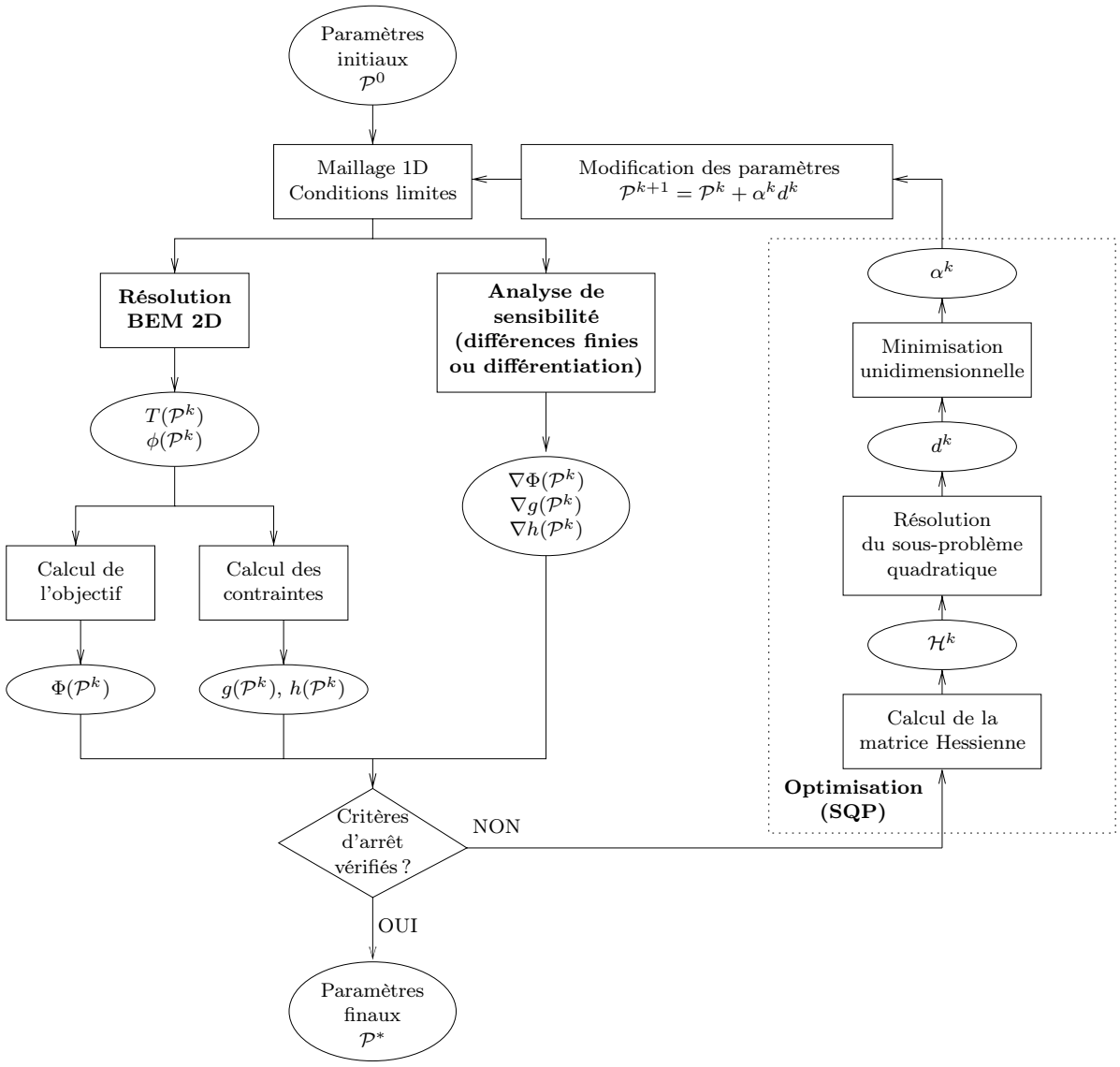


FIG. 4.4 – Algorithme de la procédure d'optimisation développée

4.5 Description du problème d'optimisation

4.5.1 Fonctions objectifs possibles

L'objectif recherché est de trouver la meilleure combinaison possible de paramètres géométriques et de paramètres procédés permettant d'améliorer le refroidissement du moule. L'axe d'amélioration recherché peut être :

- une amélioration de la qualité de la pièce (réduction des défauts d'origine thermique),
- une amélioration de la productivité (diminution du temps de cycle).

Selon le type de modèle thermique utilisé, la simulation numérique donne accès à des résultats différents :

- modèle stationnaire : température du moule moyenne au cours d'un cycle stabilisé,
- transitoire : évolutions de température dans la pièce et le moule au cours d'un cycle.

Les fonctions objectifs retenues seront donc fonctions de ces résultats.

4.5.1.1 Fonctions objectifs utilisables avec les calculs stationnaires

Les fonctions objectifs utilisables avec un calcul stationnaire ne peuvent être que fonction de la température dans le moule (généralement à la surface de la cavité). L'évolution de température dans la pièce n'est pas connue et ne peut donc pas être utilisée directement comme objectif. L'évolution de la température de la pièce (c'est-à-dire le temps de cycle et la distribution) sera toutefois fonction de la température du moule et accessible par un calcul analytique approché dans l'épaisseur de la pièce (voir paragraphe 1.4.2).

Température moyenne à la surface de la cavité du moule La température à la surface de la cavité du moule Γ_M est un indicateur du temps de refroidissement. Abaisser cette température permettra donc de diminuer les temps de cycle. On définit donc un premier objectif qui est la température moyenne à la surface de la cavité :

$$\Phi = T_{moy} = \frac{\int_{\Gamma_M} T \, d\Gamma}{\Gamma_M} \tag{4.13}$$

Écart maximal de température à la surface de la cavité du moule Le moyen le plus simple de mesurer l'uniformité de température à la surface du moule est de calculer l'écart maximal de température, c'est-à-dire la différence entre les valeurs maximales et minimales :

$$\Phi = \Delta T = \max_{\Gamma_M} T - \min_{\Gamma_M} T \tag{4.14}$$

Bien que facile à calculer, cette fonction objectif, utilisée par Zou [161], Tang [84] et Huang [86] présente quelques inconvénients. Tout d'abord, le calcul ne donne accès qu'à une amplitude de variation de la température mais ne prend pas directement en compte la distribution de température. L'inconvénient majeur de cette fonction est qu'elle est non dérivable analytiquement puisque les positions des valeurs minimales et maximales peut être variable avec les paramètres.

Écart à une température objectif L'uniformité de température dans la pièce sera fortement influencée par la répartition de température à la surface de la cavité. Matsumoto [76] et Zhou [77] proposent donc d'utiliser une fonction objectif évaluant l'écart de la température de la cavité à une température objectif T_{obj} préalablement choisie (en fonction par exemple de la température de moule nécessaire pour le remplissage) :

$$\Phi = \sigma_1 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{\text{obj}}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{\int_{\Gamma_M} \sqrt{(T - T_{obj})^2} \, d\Gamma}{\Gamma_M} \tag{4.15}$$

Pandelidis [82] utilise cette même fonction avec un modèle transitoire au moment de l'éjection. L'utilisation de cette fonction doit permettre d'homogénéiser la température à la surface de la cavité, tout en se rapprochant d'un temps de cycle voulu (contrôlé par le temps de refroidissement et donc par la température du moule).

Écart à la température moyenne Pour éviter d'avoir à choisir a priori une température de surface objectif, on peut améliorer l'uniformité de température en minimisant l'écart de la distribution de température à la surface par rapport à sa température moyenne comme proposé par Park [78] :

$$\Phi = \sigma_2 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{moy}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{\int_{\Gamma_M} \sqrt{(T - T_{moy})^2} \, d\Gamma}{\Gamma_M} \tag{4.16}$$

Cette fonction permet également d'homogénéiser la température à la surface de la cavité mais sans avoir aucun contrôle sur la température moyenne qui en résultera. La configuration finale pourra donc présenter une température très uniforme mais aussi très élevée en moyenne, ce qui conduira à un temps de refroidissement très long.

Température moyenne et écart à la température moyenne Pour pallier ce problème, on utilisera une combinaison du dernier objectif avec un objectif indicateur du temps de refroidissement. Park [79] propose d'utiliser directement le temps de refroidissement calculé analytiquement en fonction de la température du moule.

Dans notre application, l'écart à la température moyenne sera combiné avec la température moyenne par l'intermédiaire d'un coefficient de pondération ω compris entre 0 et 1. On obtient alors un nouvel objectif :

$$\Phi = \omega \frac{T_{moy}}{T^0_{moy}} + (1 - \omega) \frac{\sigma_2}{\sigma_2^0} \text{ avec } 0 \leq \omega \leq 1 \tag{4.17}$$

L'exposant 0 indique les valeurs dans la configuration initiale (avant le début de l'optimisation). Ce dernier objectif devrait permettre d'améliorer la qualité du refroidissement tout en conservant un contrôle du temps de refroidissement.

4.5.1.2 Fonctions objectifs utilisables avec les calculs transitoires

Tang [84, 85] qui utilise une résolution transitoire par éléments finis, se contente d'utiliser une fonction objectif sur la température à la surface du moule au moment de l'éjection (semblable à celles utilisées pour les calculs stationnaires).

Toutefois, dans le cas où une résolution transitoire est utilisée, on a accès directement à la température dans la pièce et à son évolution. Il paraît donc intéressant d'utiliser directement ce résultat dans les objectifs. On définit pour cela trois fonctions objectifs : le temps de refroidissement, l'uniformité de température dans la pièce et comme précédemment une combinaison de ces deux objectifs.

Temps de refroidissement On définit le temps de refroidissement t_{ref} comme la durée du refroidissement au bout de laquelle la température maximale (ou moyenne pour des pièces épaisses) est inférieure à la température d'éjection T_{ej}.

La fonction objectif s'écrira alors :

$$\Phi = t_{ref} = \min t \quad / \quad T(M, t) < T_{ej} \quad \forall M \in \Omega_P \tag{4.18}$$

ou :

$$\Phi = t_{ref} = \min t \quad / \quad T_{moy}(\Omega_P, t) < T_{ej} \tag{4.19}$$

La température dans le pièce n'est connue qu'à la fin de chaque pas de temps. Il est nécessaire d'obtenir une précision plus grande du temps de refroidissement, en particulier pour pouvoir détecter des variations de celui-ci en fonction de petites variations des paramètres. Pour cela, on utilise une approximation linéaire entre deux pas de temps t^n et t^{n+1} comme indiqué sur la figure 4.5.

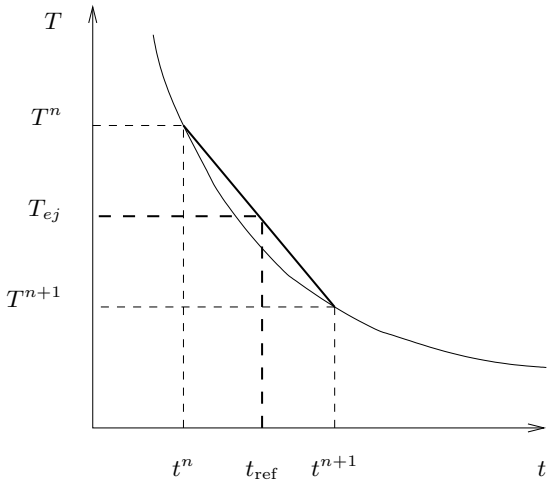


FIG. 4.5 – Principe de détermination du temps de refroidissement

Uniformité de température dans la pièce Si l'uniformité de température dans la pièce au moment de l'éjection est atteinte, la poursuite du refroidissement dans l'air, limité par le coefficient d'échange convectif avec l'air, sera uniforme.

Les gradients thermiques entre les différentes zones du moule et de la pièce (souvent générés par la géométrie de la pièce) sont également à éviter. Nous définissons pour cela une fonction objectif estimant l'uniformité de température au moment de l'éjection :

$$\Phi = \sigma_P = \frac{1}{\Omega_P} \int_{\Omega_P} \|T - T_{moy}\| \, d\Omega \ \text{ pour } \ t = t_{ref} \tag{4.20}$$

Cette fonction est une forme légèrement modifiée de celle proposée par Pandelidis [82] qui compare les écarts de la température de la pièce à la température en surface du moule au moment de l'éjection.

Combinaison du temps de refroidissement et de l'uniformité de la pièce Une façon simple d'améliorer l'uniformité de température dans une pièce consiste à éloigner les canaux de refroidissement de la surface, ce qui a pour autre conséquence d'augmenter la température du moule et donc le temps de refroidissement.

Si l'on souhaite pouvoir contrôler cette augmentation, nous utiliserons une combinaison des deux objectifs, par l'intermédiaire du coefficient de pondération ω ($0 \leq \omega \leq 1$). t^0_{ref} et σ^0_P sont les valeurs des objectifs avec le vecteur initial de paramètres.

$$\Phi = \omega \frac{t_{ref}}{t^0_{ref}} + (1 - \omega) \frac{\sigma_P}{\sigma^0_P} \tag{4.21}$$

4.5.2 Paramètres à optimiser

Le nombre de canaux n'est pas retenu directement comme paramètre d'optimisation. La modification du nombre de canaux (et donc du nombre de paramètres définissant leurs positions et leurs tailles) nécessiterait en effet la prise en compte d'un paramètre entier et la modification des contraintes en conséquence (voir paragraphe 4.5.3) à chaque itération de l'optimisation. Dans la version actuelle, l'influence du nombre de canaux devra donc être étudiée manuellement en réalisant plusieurs optimisations avec différentes configurations.

De même, le choix du matériau du moule ou du fluide de refroidissement doit être réalisé auparavant. Les propriétés peuvent être utilisées comme paramètres mais elles évolueront alors continûment lors de l'optimisation. L'obtention de propriétés d'un matériau existant effectivement n'est alors pas assurée.

4.5.2.1 Paramétrage de la géométrie

Pour limiter le nombre de paramètres, l'optimisation est réalisée sur les formes géométriques plutôt que sur les nœuds du maillage. Ceci permet de limiter le nombre de paramètres mais aussi d'exprimer plus facilement les contraintes et de faciliter l'utilisation des résultats (pour par exemple une définition CAO de la géométrie du moule).

Comme nous ne considérons que des problèmes en 2 dimensions, les canaux sont décrits à partir de leurs sections. Les sections elliptiques sont paramétrées à l'aide de 5 données (figure 4.6) :
- les coordonnées du centre : P_x et P_y,
- les rayons : R_1 et R_2,
- l'orientation des axes par rapport aux directions du plan : α_C.

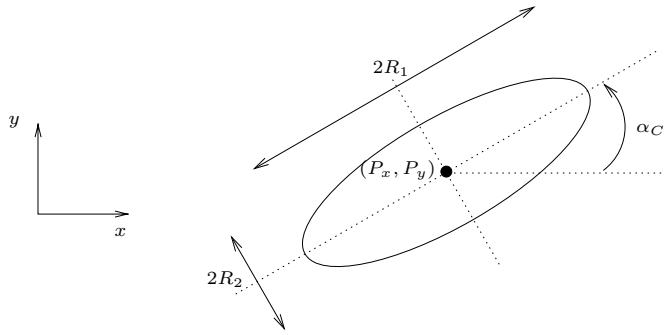


FIG. 4.6 – Paramètres de description des géométries de section de canaux

Ces formes étant définies, on a développé des fonctions de maillage automatique de ces frontières selon ces paramètres. A partir du nombre total d'éléments sur la frontière du canal, on répartit uniformément les nœuds sur la périphérie. Les coordonnées des extrémités des éléments sont alors pour θ variant de 0 à 2π par pas de $\frac{2\pi}{N_e}$ (ou de 0 à -2π pour une frontière intérieure) :

$$\begin{cases} x(\theta) = R_1 \cos\theta \cos\alpha_C - R_2 \sin\theta \sin\alpha_C + P_x \\ y(\theta) = R_1 \cos\theta \sin\alpha_C + R_2 \sin\theta \cos\alpha_C + P_y \end{cases} \tag{4.22}$$

Pour réduire le nombre de paramètres, un même paramètre d'optimisation peut être utilisé pour définir plusieurs sections. Par exemple, si l'on souhaite que tous les canaux aient le même rayon, deux possibilités existent (voir figure 4.7) :
- utiliser un paramètre pour chaque rayon et introduire des contraintes égalités entre tous ces paramètres,
- utiliser le même paramètre pour tous les rayons.

La deuxième solution sera bien sûr préférée car elle permet de réduire le nombre des paramètres d'optimisation et permet donc une résolution plus rapide et plus fiable. La même démarche sera utilisée pour gérer les symétries (voir figure 4.7) et d'une manière générale, tous les cas où un même paramètre d'optimisation peut être utilisé pour plusieurs paramètres géométriques.

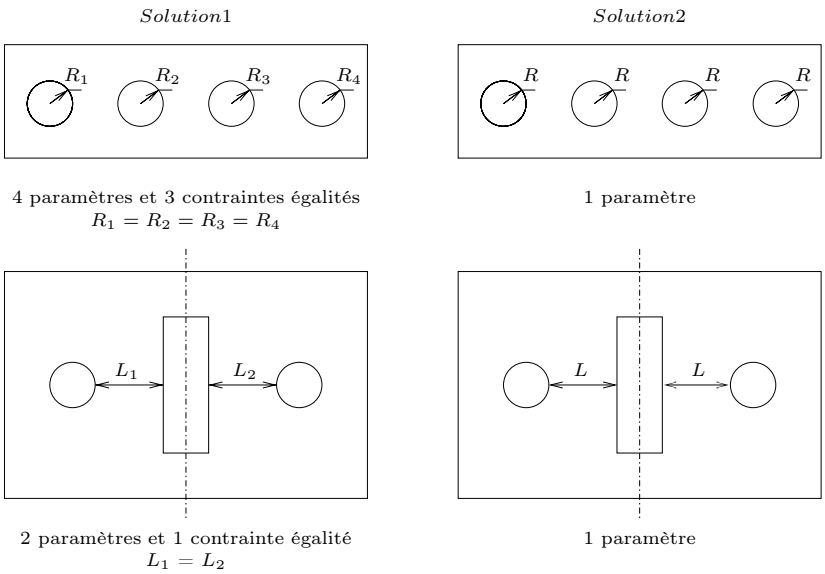


FIG. 4.7 – Choix du nombre de paramètres

4.5.2.2 Paramètres procédés

Le réglage de la régulation thermique du moule a également une influence sur le refroidissement du moule. En particulier, les paramètres suivants apparaissent dans les modèles thermiques et sont utilisables pour l'optimisation :

- le débit du fluide,
- la température du fluide,
- les propriétés thermiques du fluide,
- les propriétés thermiques du moule.

L'optimisation des propriétés thermiques du fluide et du moule peut toutefois conduire à des valeurs irréalisables en pratique. D'une manière générale, ces valeurs seront donc fixées avant optimisation.

On peut également envisager d'utiliser le temps de cycle comme un paramètre de manière à améliorer la distribution de température dans le moule (en utilisant un temps de refroidissement plus long que le minimum théorique). Ce temps de refroidissement peut être utilisé directement comme paramètre lorsque le modèle est transitoire ou par l'intermédiaire de la densité de flux imposé à la surface du moule lorsque le modèle est stationnaire.

Les autres paramètres du procédé, en particulier la pression ou la durée de maintien, n'apparaissent pas directement dans les modèles thermiques et ne peuvent donc pas être utilisées comme paramètres d'optimisation.

4.5.3 Contraintes

4.5.3.1 Contraintes sur les paramètres géométriques

Les contraintes sur la position et la taille des canaux de refroidissement doivent être introduites de manière à assurer :
- la non interpénétration des canaux les uns dans les autres,
- le maintien des canaux à l'intérieur de l'insert ou du moule,
- une distance canal/cavité minimale,
- une répartition éventuelle des canaux dans différentes zones du moule.

Des contraintes liées à la fabrication peuvent également être imposées :
- un rayon minimal ou maximal réalisable,
- un rapport de rayons réalisable (pour les ellipses),
- une orientation d'ellipses réalisable (pour la fabrication par assemblage de strates).

4.5.3.2 Contraintes sur les paramètres procédés

Les limites sur les contraintes sont également dues aux limitations du procédé d'injection. On peut citer par exemple :
- la limite de puissance de la pompe du circuit de refroidissement d'où une perte de charges et un débit dans le circuit qui seront limités (influencés par la longueur du circuit et le diamètre des canaux),
- les températures maximales et minimales du fluide de refroidissement imposées par les capacités du régulateur.

On peut également souhaiter conserver un écoulement turbulent dans le circuit de refroidissement pour obtenir le meilleur échange possible. Dans ce cas, une contrainte entre le rayon, le débit et les propriétés du fluide est obtenue.

4.5.3.3 Introduction des contraintes

Dans les applications trouvées dans la bibliographie [85, 84, 78], les contraintes sur les paramètres géométriques sont introduites par l'intermédiaire de bornes ou de relations linéaires entre les paramètres. Cette technique a dans un premier temps été réutilisée.

Les contraintes linéaires (égalités ou inégalités) sont regroupées et introduites sous forme matricielle par l'intermédiaire des matrices $[A]$ et $[A_{eq}]$ et des vecteurs $\{b\}$ et $\{b_{eq}\}$:

$$\begin{cases} [A]\,\{\mathcal{P}\} \leq \{b\} \\ [A_{eq}]\,\{\mathcal{P}\} = \{b_{eq}\} \end{cases} \tag{4.23}$$

L'utilisation de contraintes linéaires est très restrictive, en particulier pour les paramètres géométriques. Par exemple pour positionner deux canaux circulaires dans un carré, on dispose de 5 paramètres qui sont les positions des centres des canaux : P_{x1}, P_{y1}, P_{x2} et P_{y2} et le rayon des canaux R. Le vecteur des paramètres est donc $\mathcal{P} = \{P_{x1}\ P_{y1}\ P_{x2}\ P_{y2}\ R\}^T$.

Pour forcer les canaux à rester dans le domaine en introduisant un jeu minimal δ entre les canaux et la surface, on obtient les quatre relations suivantes pour chaque canal i :

$$\begin{cases} P_{xi} + R + \delta \leq L_x \\ P_{yi} + R + \delta \leq L_y \\ P_{xi} - R - \delta \geq 0 \\ P_{yi} - R - \delta \geq 0 \end{cases} \tag{4.24}$$

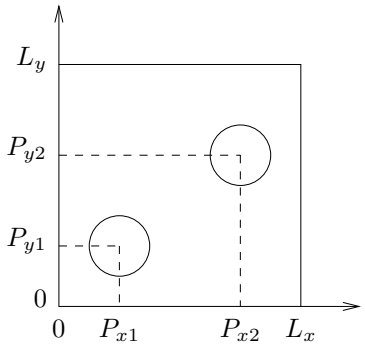


FIG. 4.8 – Géométrie et définitions des paramètres

ce qui est introduit sous forme matricielle dans les données :

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \ , \ \{\mathcal{P}\} = \begin{Bmatrix} P_{xi} \\ P_{yi} \\ R \end{Bmatrix} \text{ et } \{b\} = \begin{Bmatrix} L_x \\ L_y \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{4.25}$$

Pour gérer la non interpénétration des canaux, en utilisant une contrainte linéaire sur les paramètres, on autorise les canaux à se placer soit côte à côte, soit l'un au dessus de l'autre mais on ne peut pas autoriser les deux :

$$-P_{x1} + P_{x2} - 2R \geq \delta \quad \text{ou} \quad -P_{y1} + P_{y2} - 2R \geq \delta \tag{4.26}$$

Pour avoir des contraintes moins restrictives que celles imposées par les relations linéaires, nous avons introduit deux autres types de contraintes : les contraintes linéaires par morceaux et les contraintes non linéaires basées sur la distance minimale des canaux aux frontières du moule.

En utilisant une contrainte linéaire par morceaux, il est possible d'étendre le domaine des solutions. On peut par exemple définir la contrainte sous la forme d'une condition sur P_{x2} :

$$\begin{cases} R + \delta \leq P_{y2} \leq L_y - R - \delta \text{ si } P_{x2} \geq P_{x1} + 2R + \delta \\ P_{y1} + R + \delta \leq P_{y2} \leq L_y - R - \delta \text{ sinon} \end{cases} \tag{4.27}$$

Enfin, en utilisant une contrainte non linéaire (basée sur la distance entre les frontières), il est possible d'étendre encore le domaine des solutions comme le fait Huang [86].

$$\left((P_{x2} - P_{x1})^2 + (P_{y2} - P_{y1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} - 2R \geq \delta \tag{4.28}$$

D'une manière plus générale, nous calculerons la distance minimale de chaque canal à toutes les autres frontières du domaine (frontières extérieure et autres canaux). Cette distance devra être supérieure à un jeu δ imposé : $\min d > \delta$. Cette contrainte est donc bien plus simple à définir que les deux précédentes et pourrait donc plus facilement être utilisée pour des problèmes complexes ou en 3D.

Les zones que le deuxième canal peut occuper sont représentées sur la figure 4.9 en fonction de la contrainte utilisée pour éviter la collision des canaux. Selon la formule utilisée, le domaine obtenu est différent. Les contraintes linéaires ou linéaires par morceaux nécessitent d'être adaptées à chaque problème, alors que la contrainte non linéaire est plus générale. L'effet du type de contrainte sur l'efficacité de la méthode d'optimisation sera étudié dans le chapitre 5.

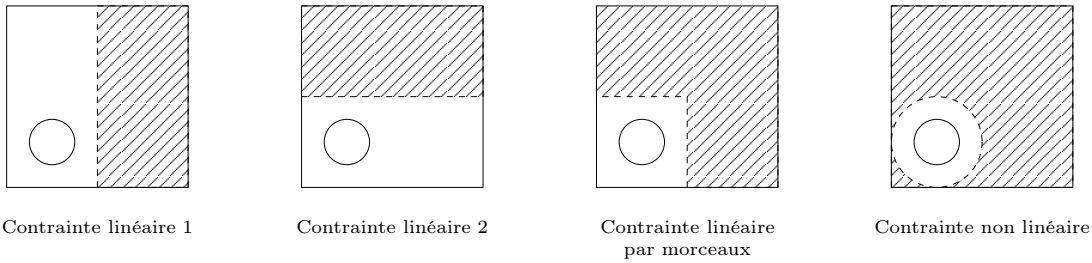


FIG. 4.9 – Zones solutions (hachurées) pour le deuxième canal en fonction du type de contrainte utilisé

4.6 Choix de la méthode d'optimisation

4.6.1 Étude du relief des fonctions à optimiser

Pour choisir une méthode d'optimisation efficace pour le problème détaillé dans le paragraphe précédent, nous allons essayer de déterminer le relief des fonctions à optimiser sur un exemple simple.

Définition du cas test Ce cas test s'approche du modèle stationnaire présenté dans le chapitre 2. On considère un domaine carré de côté L percé d'un canal circulaire centré en (P_x, P_y) et de rayon R (voir figure 4.10). La face inférieure de la plaque est soumise à un flux ϕ, la face supérieure est maintenue à une température T_0 et les deux côtés sont isolés. La surface du canal est soumise à la convection avec un fluide à température T_∞ avec un coefficient d'échange $h(R)$. Les valeurs numériques de L et des conditions aux limites sont reportées dans le tableau 4.2.

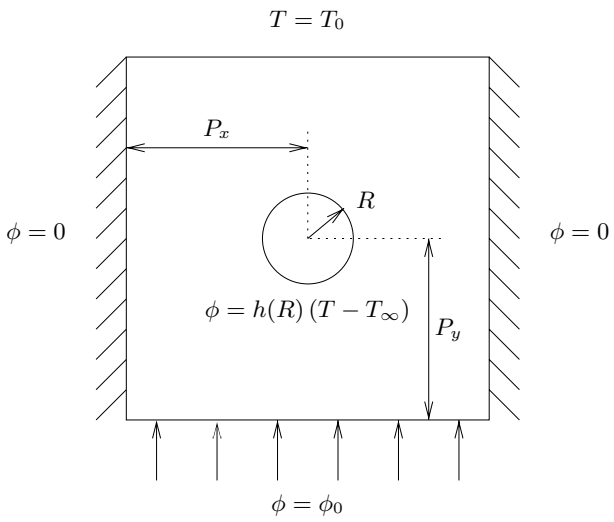


FIG. 4.10 – Géométrie, conditions aux limites et définition des paramètres

Le coefficient d'échange est calculé en fonction du rayon du canal et des propriétés du fluide (par exemple de l'eau dont les propriétés sont rappelées dans le tableau 4.3).

On considère 4 paramètres décrivant la géométrie du canal et la condition aux limites appliquée à sa surface (figure 4.10) :

Longueur L [m]	**Densité de flux imposée ϕ_0 [W.m^{-2}.K^{-1}]**	**Température imposée T_0 [°C]**	**Température du fluide T_∞ [°C]**
0,1	10^4	50	20

TAB. 4.2 – Dimensions et conditions aux limites du cas test

Débit D_F [m^3.s^{-1}]	**Conductivité λ_F [W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Masse volumique ρ_F [kg.m^{-3}]**	**Viscosité η_F [Pa.s]**	**Capacité calorifique massique C_{PF} [J.kg^{-1}.K^{-1}]**
2.10^{-5}	0,63	996	8.10^{-4}	4180

TAB. 4.3 – Propriétés du réfrigérant pour le cas test

- les coordonnées du centre du canal : P_x et P_y,
- le rayon du canal : R,
- la température du réfrigérant : T_∞.

On regarde les effets des paramètres sur quatre fonctions objectif définies sur la surface inférieure (sensée représenter la cavité d'un moule) :
- la température moyenne : T_{moy},
- la différence maximale de température : ΔT,
- l'écart à une température objectif de 60°C : σ_1,
- l'écart à la température moyenne : σ_2.

Pour observer les surfaces de réponse de ces fonctions objectifs, on fait varier les paramètres entre les valeurs données dans le tableau 4.4 et on réalise le calcul pour toutes les combinaisons possibles, soit ici 900 calculs.

Paramètre	P_x [m]	P_y [m]	R [m]	T_∞ [°C]
Valeur minimale	0,02	0,02	0,002	20
Valeur maximale	0,08	0,08	0,010	100
Nombre de valeurs	10	10	3	3

TAB. 4.4 – Valeurs minimales et maximales des paramètres étudiés

Résultats Les figures 4.12 à 4.13 présentent les surfaces obtenues pour les 4 objectifs en fonction des paramètres P_x et P_y, les paramètres R et T_∞ étant fixés aux valeurs médianes. Les surfaces obtenues pour les autres valeurs des paramètres R et T_∞ présentent la même forme générale (voir annexe F).

On remarque tout d'abord que les fonctions que l'on cherche à optimiser ne sont pas linéaires, même si dans certaines cas les variations de la pente sur le domaine des solutions est faible. Il est surtout intéressant de noter que pour ce cas test, les surfaces obtenues présentent un unique minimum global dans les plans P_x, P_y. On pourra vérifier sur les figures en annexe que cet optimum reste le même pour les autres valeurs de R et T_∞.

Cet exemple ne garantit absolument pas que l'on aura toujours à faire à des fonctions présentant les mêmes propriétés (en particulier lorsque l'on augmentera le nombre de canaux et de paramètres). On peut toutefois supposer que les surfaces resteront simples, même si elles présentent des optimums locaux.

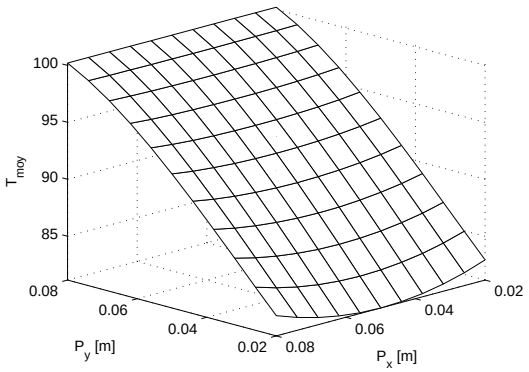


FIG. 4.11 – Surface décrite par la température moyenne en fonction des paramètres P_x et P_y

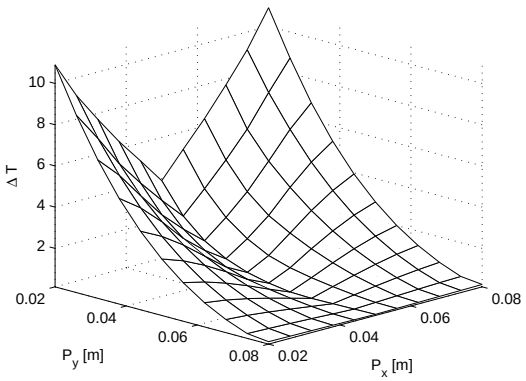


FIG. 4.12 – Surface décrite par la différence maximale de température en fonction des paramètres P_x et P_y

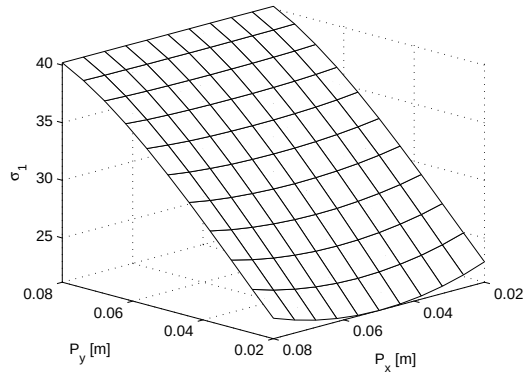


FIG. 4.13 – Surface décrite par l'écart à la température objectif en fonction des paramètres P_x et P_y

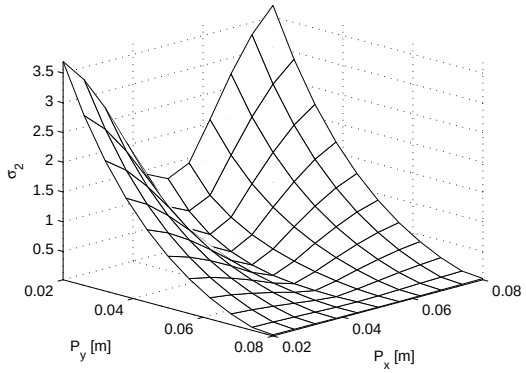


FIG. 4.14 – Surface décrite par l'écart à la température moyenne en fonction des paramètres P_x et P_y

Le choix d'une méthode d'optimisation classique semble donc être le plus judicieux pour une raison d'efficacité (limitation du nombre de calculs). Il faut en revanche garder à l'esprit qu'en cas d'existence de minimums locaux, la méthode ne sera pas totalement fiable. On pourra toujours répéter l'optimisation à partir de plusieurs points initiaux pour améliorer la fiabilité.

Méthode d'optimisation retenue Étant donné le relief des fonctions à optimiser, une méthode d'optimisation par programmation mathématique a été retenue. Pour une optimisation continue sous contraintes, les méthodes du second ordre présentent la meilleure convergence près d'un optimum même si seule l'obtention d'un optimum local est garantie.

La fonction *fmincon* du module optimisation de Matlab® a donc été utilisée. Cette fonction utilise un algorithme SQP (programmation quadratique séquentielle) dont le détail est exposé ci-dessous.

4.6.2 Algorithme SQP de Matlab®

Cette méthode est basée sur l'algorithme de Newton/Wilson présenté en annexe (paragraphe E.1.2.3). Cette méthode itérative (figure 4.15) se décompose comme suit :

1. calcul de la fonction et du gradient au point actuel,

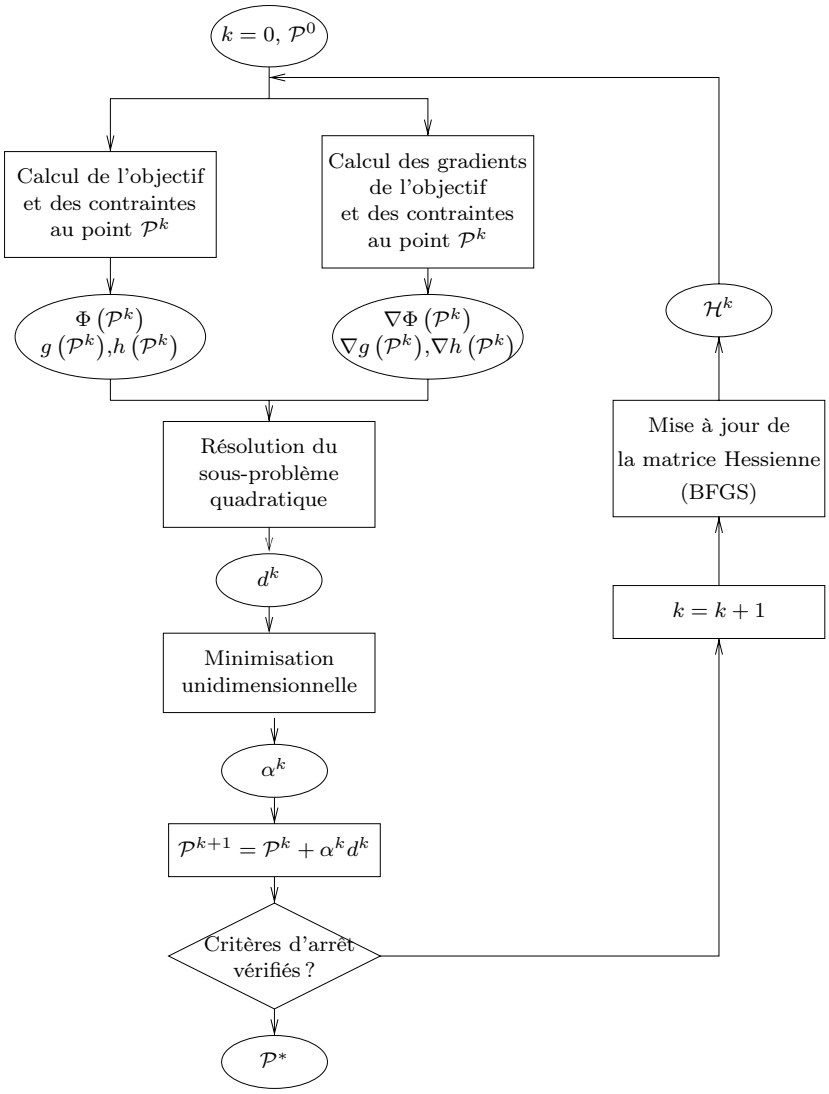


FIG. 4.15 – Algorithme de la méthode SQP

2. calcul de la direction d'avancée :
   - approximation au point actuel par un problème quadratique,
   - résolution du problème quadratique
3. calcul du pas qui permet une diminution suffisante d'une fonction de mérite quantifiant l'objectif et les contraintes (étape de minimisation unidimensionnelle),
4. calcul du point suivant et approximation de la matrice Hessienne pour l'itération suivante.

4.6.2.1 Approximation quadratique du problème

La méthode d'optimisation repose sur le fait qu'une fois que l'on connaît les gradients de l'objectif et des contraintes au point en cours (à l'itération k), un problème non linéaire peut s'approcher au point $\mathcal{P}^k$ par un problème quadratique à contraintes linéaires (4.29).

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathcal{P}\in\mathbb{R}^n} \Phi(\mathcal{P}) \\ g_i(\mathcal{P}) \leq 0 \quad i \in I = \{1, 2, \cdots, m_g\} \\ h_j(\mathcal{P}) = 0 \quad j \in J = \{1, 2, \cdots, m_h\} \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} \min\limits_{d\in\mathbb{R}^n} q(d) \text{ avec } q(d) = \dfrac{1}{2} d^T \mathcal{H}^k d + \nabla\Phi^T(\mathcal{P}^k) d \\ \nabla g(\mathcal{P}^k) d + g(\mathcal{P}^k) \leq 0 \\ \nabla h(\mathcal{P}^k) d + h(\mathcal{P}^k) = 0 \end{cases} \tag{4.29}$$

La résolution de ce sous problème quadratique permet d'obtenir une direction d'avancée d^k pour passer à l'itération suivante.

$\mathcal{H}^k$ est la matrice Hessienne de la fonction Lagrangienne $\mathcal{L}(\mathcal{P}, \kappa)$ à l'itération k :

$$\mathcal{L}(\mathcal{P}, \kappa) = \Phi(\mathcal{P}) + \sum_{i\in I} \kappa_i g_i(\mathcal{P}) + \sum_{j\in J} \kappa_j h_j(\mathcal{P}) \tag{4.30}$$

$$\mathcal{H}(\mathcal{P}, \kappa) = \nabla^2_{\mathcal{P}} \mathcal{L}(\mathcal{P}, \kappa) = \nabla^2\Phi(\mathcal{P}) + \sum_{i\in I} \kappa_i \nabla^2 g_i(\mathcal{P}) + \sum_{j\in J} \kappa_j \nabla^2 h_j(\mathcal{P}) \tag{4.31}$$

L'algorithme utilisé par Matlab® utilise une méthode quasi-newtonienne pour ne pas avoir à calculer explicitement les dérivées secondes nécessaires à l'assemblage de la matrice $\mathcal{H}$. On utilise par défaut la formule de mise à jour BFGS (voir paragraphe E.1.1.3), modifiée si nécessaire pour maintenir les matrices successives définies positives ([162]).

4.6.2.2 Résolution du sous-problème quadratique

Le sous-problème quadratique à contraintes linéaires que l'on cherche à résoudre à chaque itération k est de la forme :

$$\begin{cases} \min\limits_{d\in\mathbb{R}^n} q(d) \text{ avec } q(d) = \dfrac{1}{2} d^T \mathcal{H}^k d + \nabla\Phi^T(\mathcal{P}^k) d \\ A_{eq} d = b_{eq} \\ Ad \leq b \end{cases} \tag{4.32}$$

Résolution d'un problème quadratique à contraintes inégalités Les problèmes quadratiques à contraintes inégalités sont résolus itérativement en les transformant à chaque itération en un problème à contraintes égalités uniquement. Pour cela, on doit déterminer à chaque itération l'ensemble des contraintes actives. Ce type de méthodes est connu sous l'appellation méthode par activation de contraintes (*active set method*), qu'on appelle aussi méthode par projection.

A chaque itération k_{PQ} de la résolution du problème quadratique, on désigne par $\mathcal{A}$ l'ensemble des contraintes saturées (contraintes égalités et contraintes inégalités pour lesquelles l'égalité est vérifiée). A partir du point $d^{k_{PQ}}$, on cherche $d^{k_{PQ}+1} = d^{k_{PQ}} + \alpha^{k_{PQ}} \delta^{k_{PQ}}$ avec :

– $\delta^{k_{PQ}}$ la direction solution du problème quadratique à contraintes égalités : $\begin{cases} \min q(\delta) \\ A_i^T \delta = 0 \quad i \in \mathcal{A} \end{cases}$

– $\alpha^{k_{PQ}}$ le pas maximal qui permet de ne pas enfreindre une contrainte qui n'est pas encore active :

$$\alpha^{k_{PQ}} = \min\left(1, \min_{i \notin \mathcal{A}} \frac{b_i - A_i^T d^{k_{PQ}}}{A_i^T \delta^{k_{PQ}}}\right)$$

A chaque itération k_{PQ}, on s'est alors ramené à la résolution d'un problème quadratique avec uniquement des contraintes égalités.

Résolution d'un problème quadratique à contraintes égalités

$$\begin{cases} \min\limits_{d \in \mathbb{R}^n} q(d) \text{ avec } q(d) = \dfrac{1}{2} d^T \mathcal{H} d + \nabla \Phi^T(\mathcal{P}^k) d \\ A^T d = b \text{ (on note } m \text{ le nombre de contraintes)} \end{cases} \tag{4.33}$$

La méthode de résolution des problèmes quadratiques à contraintes égalités consiste à trouver deux matrices $\mathcal{Y}$ et $\mathcal{Z}$ de tailles respectives $(n \times m)$ et $(n \times (n-m)))$ telles que la matrice $[\mathcal{Y} : \mathcal{Z}]$ soit non singulière et $\begin{cases} A^T \mathcal{Y} = I \\ A^T \mathcal{Z} = 0 \end{cases}$.

La méthode de résolution des problèmes quadratiques de Matlab® utilise une décomposition QR de A pour déterminer les matrices $\mathcal{Y}$ et $\mathcal{Z}$ (le détail du calcul peut être trouvé dans les références [147] et [162]).

$d = \mathcal{Y} b$ est alors solution de $A^T d = b$. L'ensemble des solutions peut s'écrire $d = \mathcal{Y} b + \delta$ où δ est tel que $A^T \delta = 0$. $\mathcal{Z}$ ayant des colonnes linéairement indépendantes, celles-ci constituent des vecteurs de base pour δ qui peut alors se décomposer en $\delta = \mathcal{Z} y = \sum_{i=1}^{n-m} z_i y_i$ où y_i sont les composantes dans les directions z_i. Un point d solution s'écrit alors : $d = \mathcal{Y} b + \mathcal{Z} y$.

La fonction $q(d)$ peut désormais s'écrire sous la forme d'une fonction de y :

$$\Psi(y) = \frac{1}{2} y^T \mathcal{Z}^T \mathcal{H} \mathcal{Z} y + (\nabla \Phi(\mathcal{P}^k) + \mathcal{H} \mathcal{Y} b) \mathcal{Z} y + \frac{1}{2} (\nabla \Phi(\mathcal{P}^k) + \mathcal{H} \mathcal{Y} b)^T \mathcal{Y} b \tag{4.34}$$

Si la matrice $\mathcal{Z}^T \mathcal{H} \mathcal{Z}$ est définie positive, le minimum y^* de la fonction $\Psi(y)$ est unique et est obtenu pour $\nabla \Psi(y) = 0$ soit :

$$(\mathcal{Z}^T \mathcal{H} \mathcal{Z}) y = -\mathcal{Z}^T (\nabla \Phi(\mathcal{P}^k) + \mathcal{H} \mathcal{Y} b) \tag{4.35}$$

La résolution de ce système linéaire permet d'obtenir y^* et donc $d^* = \mathcal{Y} b + \mathcal{Z} y^*$ solution du problème quadratique.

4.6.2.3 Optimisation unidimensionnelle

La résolution du sous-problème quadratique a permis d'obtenir une direction d'avancée d^k. Il reste alors à déterminer le pas selon cette direction α^k pour trouver le point suivant $\mathcal{P}^{k+1} = \mathcal{P}^k + \alpha^k d^k$.

La longueur du pas est déterminée par minimisation unidimensionnelle de la fonction $\bar{\Phi}(\mathcal{P})$ dans la direction d^k. La fonction utilisée (équation (4.36)) permet de prendre en compte à la fois l'objectif et les contraintes grâce aux paramètres $\bar{\kappa}_i$ définis par l'équation (4.37). Cette fonction est connue sous le nom de fonction exacte pénalisée l_1 [147, 162].

$$\bar{\Phi}(\mathcal{P}) = \Phi(\mathcal{P}) + \sum_{i=1}^{m_h} \bar{\kappa}_i h_i(\mathcal{P}) + \sum_{i=1}^{m_g} \bar{\kappa}_i \max(0, g_i(\mathcal{P})) \tag{4.36}$$

$$\bar{\kappa}_i = \bar{\kappa}_i^{k+1} = \max_i \left(\kappa_i, \frac{1}{2}(\bar{\kappa}_i^k + \kappa_i)\right) \quad i = 1, \cdots, m \tag{4.37}$$

Le pas α^k est donc divisé par 2 jusqu'à ce qu'une diminution suffisante de la fonction soit obtenue.

Critères d'arrêt Les critères d'arrêt sont contrôlés par l'intermédiaire de trois paramètres ε_C, ε_Φ et $\varepsilon_\mathcal{P}$ ($\ll 1$). L'optimisation est arrêtée si les conditions de Kuhn-Tucker (équation 4.38) sont vérifiées à la fin d'une itération.

$$\begin{cases} \max\left(\nabla\Phi(\mathcal{P}) + \sum_i \kappa_i \nabla g_i(\mathcal{P}), \kappa_i g_i(\mathcal{P})\right) < \varepsilon_\Phi \\ \max\left(g_i(\mathcal{P})\right) < \varepsilon_C \end{cases} \tag{4.38}$$

Si les contraintes sont vérifiées et que l'une des deux autres conditions suivantes est également vérifiée, on considère que l'algorithme ne peut plus produire de meilleure solution et que l'on peut arrêter les itérations.

$$\begin{cases} (g_i(\mathcal{P})) < \varepsilon_C \\ \left\|\mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n\right\| < 2\varepsilon_\mathcal{P} \text{ ou } \left\|\nabla\Phi(\mathcal{P})\left(\mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n\right)\right\| < 2\varepsilon_\Phi \end{cases} \tag{4.39}$$

On peut enfin définir un nombre maximal d'itérations $k_{\max}$ et un nombre maximal d'appels au calcul de la fonction $k^\Phi_{\max}$ tels que l'optimisation est arrêtée si $k > k_{\max}$ ou $k^\Phi > k^\Phi_{\max}$.

4.6.3 Propriétés de cet algorithme

Plusieurs propriétés rendent la méthode SQP avantageuse [149] :
- les points successifs (y compris le point initial) ne sont pas forcément solutions (ce qui est utile si l'on a du mal à trouver un point initial respectant toutes les contraintes),
- la résolution repose sur la résolution de problèmes quadratiques à l'aide de procédures simples et bien connues (ils se ramènent eux mêmes à la résolution de systèmes linéaires).

L'algorithme de Matlab® permet l'utilisation de gradients fournis par l'utilisateur ou utilise les différences finies pour les estimer. Par contre, il n'est pas possible de fournir les dérivées secondes directement pour le calcul de la matrice Hessienne. En utilisant l'algorithme BFGS, la convergence est donc superlinéaire (au lieu de quadratique lorsque la matrice est exacte). La convergence (éventuellement vers un optimum local) est assurée par le maintien des matrices Hessiennes successives définies positives. La convergence globale est améliorée également par le choix de la fonction exacte pénalisée l_1 pour l'optimisation unidimensionnelle [149, 162].

4.7 Choix et implantation des méthodes d'analyse de la sensibilité

La méthode de calcul par différences finies est la méthode la plus simple à implanter puisqu'elle n'utilise que des résolutions directes du problème thermique. Quel que soit le nombre de fonctions à dériver (objectif et contraintes), l'équation de la chaleur doit être résolue p fois pour p paramètres d'optimisation.

Pour un problème à p paramètres pour lequel on souhaite obtenir la dérivée de f fonctions (objectif et contraintes non linéaires), la méthode par différentiation nécessite la résolution de p systèmes alors que la méthode de l'état adjoint nécessite la résolution de f systèmes (ces systèmes sont de la taille du problème direct). On peut donc s'attendre à ce que la méthode de l'état adjoint soit plus efficace lorsque le nombre de paramètres augmente.

Dans les deux cas, il est nécessaire d'assembler les matrices dérivées $\frac{\partial G}{\partial p}$ et $\frac{\partial H}{\partial p}$. Ces matrices étant pleines et non symétriques, l'assemblage des matrices est de loin l'étape la plus longue du calcul quelle que soit la méthode de calcul (sauf pour un nombre très grand de paramètres bien sûr).

Cette conclusion n'est pas la même dans le cas d'un calcul par éléments finis pour lequel l'assemblage des matrices est plus rapide et la méthode de l'état adjoint devient rapidement plus efficace que la méthode par différentiation lorsque le nombre de paramètres augmente.

La méthode de calcul par différences finies a été utilisée dans ce travail pour le calcul des dérivées des fonctions non analytiquement dérivables. La méthode par différentiation, plus facile à mettre en œuvre que la méthode de l'état adjoint, a été implantée pour le calcul des dérivées des fonctions dérivables. Les détails de cette implantation sont exposés dans le paragraphe suivant.

4.7.1 Calcul par différences finies

Le calcul par différences finies des dérivées de l'objectif et des contraintes non linéaires est géré par le sous-programme d'optimisation *fmincon*. Le schéma utilisé est décentré à droite.

Les options d'optimisation obligent à choisir le même pas de perturbation alors que tous les paramètres n'ont pas forcement le même ordre de grandeur. Il faut donc être prudent lors du choix du système d'unité du problème pour obtenir une bonne précision du calcul pour tous les paramètres avec la même perturbation.

4.7.2 Implantation de la méthode par différentiation

4.7.2.1 Dérivées des fonctions objectif

Le calcul des dérivées de la fonction objectif est possible lorsque celle-ci s'écrit sous la forme d'une fonction continue et dérivable des températures et des flux. Ce calcul est donc possible pour les objectifs stationnaires mais pas pour les objectifs transitoires, puisque le temps de refroidissement ne s'exprime pas comme une fonction dérivable de la température.

Dans un premier temps, on doit exprimer les dérivées de la fonction objectif $\frac{\partial \Phi}{\partial p}$ en fonction des dérivées de la température $\frac{\partial T}{\partial p}$ et du gradient de température $\frac{\partial q}{\partial p}$ qui seront solutions de l'analyse de sensibilité.

Température moyenne à la surface de la cavité du moule Cette fonction objectif est définie à la surface de la cavité, qui a priori n'est pas une surface variable avec les paramètres. Dans ce cas, la dérivée de la température moyenne s'écrit simplement :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\partial T_{moy}}{\partial p} = \frac{\int_{\Gamma_{\text{cav}}} \frac{\partial T}{\partial p}\, d\Gamma}{\Gamma_{\text{cav}}} \tag{4.40}$$

Si l'on souhaite utiliser cet objectif sur une surface qui est fonction des paramètres, il faut prendre en compte les variations de cette frontière. Le calcul de la dérivée est réalisé en passant par la forme discrétisée de l'objectif. Par exemple pour des éléments constants, l'objectif s'écrit :

$$\Phi = T_{moy} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_e} L_i} \left(\sum_{i=1}^{N_e} T_i L_i \right) \tag{4.41}$$

Les longueurs d'éléments L_i sont fonctions des paramètres, la dérivée de l'objectif s'écrit donc :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^{N_e} L_i\right)^2} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\partial T_i}{\partial p} L_i + \sum_{i=1}^{N_e} T_i \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \sum_{i=1}^{N_e} L_i - \left(\sum_{i=1}^{N_e} T_i L_i \right) \left(\sum_{i=1}^{N_e} \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \right) \tag{4.42}$$

Écart à une température objectif et à la température moyenne Les mêmes remarques s'appliquent pour le calcul des fonctions objectif σ_1 et σ_2. Les expressions des dérivées de ces objectifs sont en annexe G.

4.7.2.2 Dérivées des coordonnées du maillage et des conditions limites

Les paramètres peuvent être de deux types : géométriques (description des frontières) ou procédé (conditions limites). Dans le cas de paramètres géométriques, les dérivées des coordonnées des nœuds du maillage de la frontière peuvent être obtenues en utilisant les fonctions canoniques. Par exemple, le maillage d'un cercle de rayon R, de centre $(P_x,\, P_y)$ est effectué à l'aide de nœuds de coordonnées :

$$x = P_x + R\cos\theta \text{ et } y = P_y + R\sin\theta \tag{4.43}$$

où θ prend des valeurs discrètes dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. L'influence du rayon d'un cercle sur la position des nœuds répartis sur la périphérie est alors :

$$\frac{\partial x}{\partial R} = \cos\theta \text{ et } \frac{\partial x}{\partial R} = \sin\theta \tag{4.44}$$

Toutefois, le calcul par différences finies des dérivées des coordonnées du maillage a donné une très bonne précision et cette méthode, plus simple à mettre en place, a donc été retenue.

Les paramètres procédés n'ont pas d'influence sur les coordonnées du maillage, mais interviennent uniquement sur les dérivées des conditions aux limites. Les dérivées des conditions aux limites en température imposée et en flux imposé ne sont non nulles que si le paramètre est effectivement la valeur de la condition limite.

$$\forall M \in \Gamma_T, \quad T = T_0 \quad \text{donc} \quad \frac{\partial T}{\partial p} = \frac{\partial T_0}{\partial p} = \begin{cases} 1 \text{ si } p = T_0 \\ 0 \text{ sinon} \end{cases} \tag{4.45}$$

$$\forall M \in \Gamma_\phi, \quad q = q_0 \quad \text{donc} \quad \frac{\partial q}{\partial p} = \frac{\partial q_0}{\partial p} = \begin{cases} 1 \text{ si } p = q_0 \\ 0 \text{ sinon} \end{cases} \tag{4.46}$$

Dans le cas de la convection, le coefficient d'échange h dépend de la géométrie (par l'intermédiaire du rayon des canaux) et éventuellement de la température. On considère que la conductivité λ est constante (elle n'intervient pas en tant que paramètre).

$$\forall M \in \Gamma_h, \quad q = \frac{-h}{\lambda}(T - T_\infty) \quad \text{donc} \quad \frac{\partial q}{\partial p} = \frac{\partial q_0}{\partial p} = -\frac{T - T_\infty}{\lambda}\frac{\partial h}{\partial p} - \frac{h}{\lambda}\frac{\partial T}{\partial p} + \frac{h}{\lambda}\frac{\partial T_\infty}{\partial p} \tag{4.47}$$

Pour des raisons de facilité de mise en œuvre, le calcul des dérivées des conditions aux limites est aussi effectué par différences finies et a montré une très bonne précision.

A partir des dérivées des coordonnées du maillage et des conditions aux limites, l'objectif du calcul suivant est d'obtenir les dérivées de la température et du flux, dans un premier temps sur les frontières puis à l'intérieur du domaine. On se place dans le cas le plus simple : problème stationnaire, discrétisation par éléments constants, le principe étant le même pour les autres configurations.

4.7.2.3 Frontières du domaine

Pour un point i sur la frontière du domaine, la résolution par la méthode des éléments frontières donne l'équation suivante :

$$\sum_{j=1}^{N_e} H_{ij} T_j = \sum_{j=1}^{N_e} G_{ij} q_j \tag{4.48}$$

En dérivant par rapport au paramètre p, on obtient :

$$\sum_{j=1}^{N_e} \frac{\partial H_{ij}}{\partial p} T_j + \sum_{j=1}^{N_e} H_{ij} \frac{\partial T_j}{\partial p} = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{\partial G_{ij}}{\partial p} q_j + \sum_{j=1}^{N_e} G_{ij} \frac{\partial q_j}{\partial p} \tag{4.49}$$

Pour tous les points i de la frontière, on obtient le système d'équations suivant :

$$[H]\left\{\frac{\partial T}{\partial p}\right\}+\left[\frac{\partial H}{\partial p}\right]\{T\}=[G]\left\{\frac{\partial q}{\partial p}\right\}+\left[\frac{\partial G}{\partial p}\right]\{q\} \tag{4.50}$$

T, q, G et H sont obtenus lors de la résolution par la méthode des éléments frontières. Lorsque les intégrations sont réalisées par une méthode de Gauss, les termes des matrices G et H (qui ne dépendent que de la géométrie) s'écrivent à partir des coordonnées du maillage par l'intermédiaire de L, r et d et de leurs dérivées selon les équations (4.51) et (4.52). Les définitions des distances d et r sont rappelées sur la figure 4.16.

$$G_{ij}=\int_{\Gamma_j}\frac{1}{2\pi}\ln\frac{1}{r}\,d\Gamma=\frac{L_j}{4\pi}\int_{-1}^{1}\ln\frac{1}{r(\xi)}\,d\xi=\frac{L_j}{4\pi}\sum_{k=1}^{N_G}\omega_k\ln\frac{1}{r(\xi_k)} \tag{4.51}$$

$$H_{ij}=c_i\delta_{ij}+\int_{\Gamma_j}\frac{d}{2\pi r^2}\,d\Gamma=c_i\delta_{ij}+\frac{L_j}{4\pi}\int_{-1}^{1}\frac{d}{r^2(\xi)}\,d\xi=c_i\delta_{ij}+\frac{L_j}{4\pi}\sum_{k=1}^{N_G}\frac{d\omega_k}{r^2(\xi_k)} \tag{4.52}$$

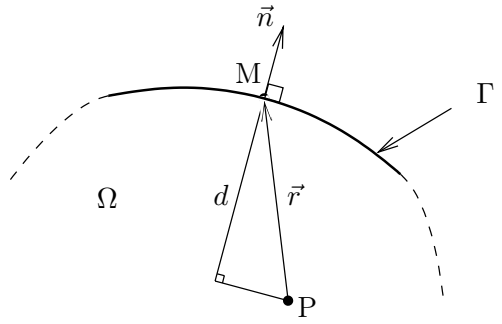


FIG. 4.16 – Définition des distances r et d

Les dérivées des matrices G et H s'expriment donc simplement à partir des dérivées des coordonnées des nœuds selon les équations (4.53) et (4.54). Le calcul de ces expressions est détaillé en annexe H.

$$\frac{\partial G_{ij}}{\partial p}=\frac{1}{4\pi}\left(\frac{\partial L_j}{\partial p}\sum_{k=1}^{N_G}\omega_k\ln\frac{1}{r(\xi_k)}+L_j\sum_{k=1}^{N_G}\frac{-\omega_k}{r(\xi_k)}\frac{\partial r(\xi_k)}{\partial p}\right) \tag{4.53}$$

$$\frac{\partial H_{ij}}{\partial p}=\frac{\partial c_i}{\partial p}\delta_{ij}+\frac{1}{4\pi}\left[\frac{\partial L_j}{\partial p}\sum_{k=1}^{N_G}\frac{d\omega_k}{r^2(\xi_k)}+L_j\sum_{k=1}^{N_G}\frac{\omega_k}{r^3(\xi_k)}\left(\frac{\partial d}{\partial p}r(\xi_k)-2d\frac{\partial r(\xi_k)}{\partial p}\right)\right] \tag{4.54}$$

Les termes conduisant à une intégrale singulière (lorsque le point de collocation appartient à l'élément), sont calculés par dérivation des expressions analytiques des termes diagonaux de G et H.

En introduisant les conditions aux limites différentiées dans le système (4.50), la résolution permet d'obtenir les dérivées de la température et du flux $\frac{\partial T}{\partial p}$ et $\frac{\partial q}{\partial p}$ inconnues sur les frontières (résolution semblable à la méthode directe par éléments frontières).

Il faut noter d'autre part que la prise en compte des conditions de contact n'entraîne pas de modifications supplémentaires des matrices. En effet, les conditions de continuité différentiées s'écrivent :

$$\begin{cases}\frac{\partial T_{\Sigma_1}}{\partial p}-\frac{\partial T_{\Sigma_2}}{\partial p}=-\mathcal{R}\lambda_1\frac{\partial q_{\Sigma_1}}{\partial p}\\ -\lambda_1\frac{\partial q_{\Sigma_1}}{\partial p}=\lambda_2\frac{\partial q_{\Sigma_2}}{\partial p}\end{cases} \tag{4.55}$$

Après prise en compte de ces conditions comme indiqué dans le paragraphe 3.3.2, le système s'écrit :

$$\begin{bmatrix} H_1 & H_{\Sigma_1} & -G_{\Sigma_1} & 0 \\ 0 & H_{\Sigma_2} & \frac{\lambda_1}{\lambda_2}G_{\Sigma_2} - \lambda_1\mathcal{R}H_{\Sigma_2} & H_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial T_1}{\partial p} \\ \frac{\partial T_{\Sigma_1}}{\partial p} \\ \frac{\partial q_{\Sigma_1}}{\partial p} \\ \frac{\partial T_2}{\partial p} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial H_1}{\partial p} & \frac{\partial H_{\Sigma_1}}{\partial p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial H_{\Sigma_2}}{\partial p} & \frac{\partial H_2}{\partial p} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_1 \\ T_{\Sigma_1} \\ T_{\Sigma_2} \\ T_2 \end{Bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} G_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial p} \\ \frac{\partial q_2}{\partial p} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial G_1}{\partial p} & \frac{\partial G_{\Sigma_1}}{\partial p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial G_{\Sigma_2}}{\partial p} & \frac{\partial G_2}{\partial p} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_{\Sigma_1} \\ q_{\Sigma_2} \\ q_2 \end{Bmatrix} \quad (4.56)$$

On constate que les seules matrices modifiées sont les matrices G et H et elles sont calculées pour le calcul direct. Les dérivées $\frac{\partial H}{\partial p}$ et $\frac{\partial G}{\partial p}$ ne sont pas modifiées par l'introduction des relations de continuité.

4.7.2.4 Intérieur du domaine

Pour un point i à l'intérieur du domaine, la température est calculée à partir des solutions sur la frontière :

$$T_i = \sum_{j=1}^{N_e} G_{ij} q_j - \sum_{j=1}^{N_e} H_{ij} T_j \quad (4.57)$$

La dérivée de la température par rapport à un paramètre p s'écrit alors simplement :

$$\frac{\partial T_i}{\partial p} = \frac{\partial G_{ij}}{\partial p} q_j + G_{ij}\frac{\partial q_j}{\partial p} - \frac{\partial H_{ij}}{\partial p} T_j - H_{ij}\frac{\partial T_j}{\partial p} \quad (4.58)$$

Comme pour le calcul sur la frontière, T_j, q_j, G_{ij}, H_{ij} sont calculés lors de la résolution directe. $\frac{\partial T_j}{\partial p}$ et $\frac{\partial q_j}{\partial p}$ sont calculés lors de l'analyse de sensibilité sur les frontières. Il reste donc à calculer $\frac{\partial G_{ij}}{\partial p}$ et $\frac{\partial H_{ij}}{\partial p}$ pour obtenir $\frac{\partial T_i}{\partial p}$. Ces calculs sont effectués de la même manière que sur la frontière du domaine (équations (4.53) et (4.54)). Le calcul des dérivées des gradients de température aux points internes s'effectue selon le même principe.

4.7.3 Comparaisons des calculs de dérivées par différences finies et par différentiation

4.7.3.1 Géométrie du test

On considère une plaque carrée de côté L percée d'un canal elliptique centré en (P_x, P_y) de rayons (R_1, R_2) et incliné d'un angle α avec l'axe x (voir figure 4.17 et tableau 4.5). La face inférieure de la plaque est soumise à une densité de flux ϕ, la face supérieure est maintenue à une température T_0 et les deux côtés sont isolés. La surface du canal est soumise à la convection avec un fluide à température T_∞ avec un coefficient d'échange $h(R_1, R_2)$.

Paramètre	L	P_x	P_y	R_1	R_2	α_C	ϕ_0	T_0	T_∞
Valeur	0,1m	0,045m	0,055m	0,02m	0,01m	$\frac{\pi}{6}$	10^4W.m^{-2}.K^{-1}	50°C	20°C

TAB. 4.5 – Dimensions et conditions aux limites

Le coefficient d'échange est calculé en fonction du rayon hydraulique équivalent $R = \sqrt{R_1 R_2}$ et des propriétés du fluide (par exemple de l'eau dont les propriétés sont rappelées dans le tableau 4.6) circulant dans le canal. La

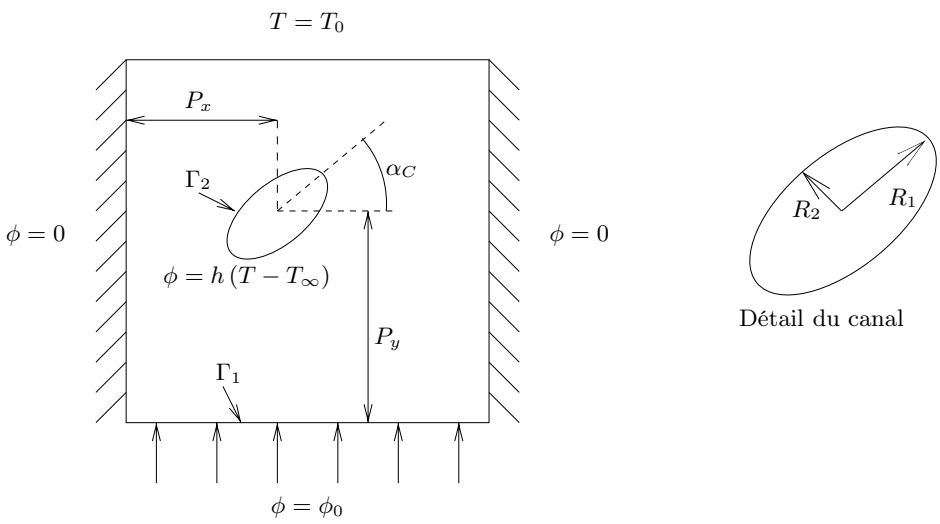


FIG. 4.17 – Géométrie de test pour le calcul de sensibilité

corrélation utilisée pour le calcul du nombre de Nusselt est la relation de Colburn présentée dans le paragraphe 1.4.2.3 :

$$h(R_1, R_2) = 0,023 \frac{\lambda}{\sqrt{R_1 R_2}} Re^{0,8} Pr^{\frac{1}{3}} \tag{4.59}$$

Débit D_F **[m^3.s^{-1}]**	**Conductivité** λ_F **[W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Masse volumique** ρ_F **[kg.m^{-3}]**	**Viscosité** η_F **[Pa.s]**	**Capacité calorifique massique** C_{PF} **[J.kg^{-1}.K^{-1}]**
10^{-5}	0,63	996	8.10^{-4}	4180

TAB. 4.6 – Propriétés du réfrigérant pour le cas test

Les sensibilités de la température par rapport à la géométrie (P_x, P_y, R_1, R_2 et α_C) et aux conditions aux limites (ϕ, T_0, T_∞) sont calculées par différences finies et par différentiation. Plusieurs pas de perturbation sont testés pour le calcul par différences finies afin d'évaluer l'influence de celui-ci. Les sensibilités des fonctions objectifs (T_{moy}, σ_1 et σ_2) sont également calculées sur la frontière inférieure Γ_1 et sur la frontière du canal Γ_2 (frontière fonction des paramètres géométriques).

4.7.3.2 Sensibilité des températures sur la frontière et à l'intérieur du domaine

Les figures de l'annexe I permettent de comparer les sensibilités obtenues sur tout le domaine avec les deux méthodes. Les erreurs maximales de la sensibilité sur la frontière en fonction du pas utilisé pour le calcul par différences finies sont représentées en annexe J sur les figures J.1 à J.8. Selon les paramètres, l'ordre de grandeur des pas donnant les plus faibles erreurs sont variables.

Les erreurs relatives entre les deux calculs (avec les pas donnant la meilleure précision) sont résumées dans le tableau 4.7. On constate dans l'ensemble un très bon accord entre les valeurs obtenues par différences finies et par différentiation. L'erreur est plus importante pour le paramètre α_C car la sensibilité est nulle en certains points du domaine, ce qui entraîne une erreur relative élevée.

Paramètre	Pas	Erreur sur la frontière [%]	Erreur aux points internes [%]
P_x	10^{-8}m	$2,26.10^{-04}$	$2,18.10^{-03}$
P_y	10^{-8}m	$5,08.10^{-04}$	$1,04.10^{-03}$
R_1	10^{-8}m	$1,23.10^{-03}$	$1,87.10^{-04}$
R_2	10^{-8}m	$5,08.10^{-03}$	$2,21.10^{-04}$
α_C	10^{-8}	$2,34.10^{-01}$	$1,14.10^{-01}$
ϕ_0	1W.m^{-2}	$7,93.10^{-05}$	$7,94.10^{-05}$
T_0	10^{-2}°C	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_∞	10^{-2}°C	$1,33.10^{-04}$	$1,33.10^{-04}$

TAB. 4.7 – Erreur maximale de sensibilité de la température par rapport aux paramètres

4.7.3.3 Sensibilité des fonctions objectif

Les erreurs entre les calculs de sensibilité des fonctions objectifs entre les deux méthodes de calcul sont reportées dans les tableaux 4.8 à 4.10. Dans tous les cas, l'erreur relative est inférieure à 10^{-2}%, que le calcul de l'objectif soit réalisé sur une frontière fixe (Γ_1) ou sur une frontière qui est fonction des paramètres (Γ_2).

Paramètre	Pas	Erreur sur la frontière Γ_1 [%]	Erreur sur la frontière Γ_2 [%]
P_x	10^{-8}m	$1,66.10^{-05}$	$4,70.10^{-05}$
P_y	10^{-8}m	$6,17.10^{-05}$	$4,41.10^{-05}$
R_1	10^{-8}m	$8,17.10^{-05}$	$8,51.10^{-05}$
R_2	10^{-8}m	$1,00.10^{-04}$	$5,91.10^{-05}$
α_C	10^{-8}	$-6,83.10^{-04}$	$2,60.10^{-03}$
ϕ_0	1W.m^{-2}	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_0	10^{-2}°C	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_∞	10^{-2}°C	$1,33.10^{-04}$	$1,33.10^{-04}$

TAB. 4.8 – Erreur de la sensibilité de la température moyenne (T_{moy}) par rapport aux paramètres

Paramètre	Pas	Erreur sur la frontière Γ_1 [%]	Erreur sur la frontière Γ_2 [%]
P_x	10^{-8}m	$1,32.10^{-05}$	$5,56.10^{-05}$
P_y	10^{-8}m	$6,18.10^{-05}$	$4,57.10^{-05}$
R_1	10^{-8}m	$8,12.10^{-05}$	$8,44.10^{-05}$
R_2	10^{-8}m	$9,99.10^{-05}$	$5,78.10^{-05}$
α_C	10^{-8}	$-8,58.10^{-04}$	$3,21.10^{-03}$
ϕ_0	1W.m^{-2}	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_0	10^{-2}°C	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_∞	10^{-2}°C	$1,33.10^{-04}$	$1,33.10^{-04}$

TAB. 4.9 – Erreur de la sensibilité de l'écart à la température objectif (σ_1) par rapport aux paramètres

Paramètre	Pas	Erreur sur la frontière Γ_1 [%]	Erreur sur la frontière Γ_2 [%]
P_x	10^{-8}m	$-6,08.10^{-05}$	$-4,49.10^{-05}$
P_y	10^{-8}m	$8,67.10^{-05}$	$-1,07.10^{-04}$
R_1	10^{-8}m	$-1,30.10^{-04}$	$-1,16.10^{-03}$
R_2	10^{-8}m	$1,01.10^{-02}$	$-2,99.10^{-04}$
α_C	10^{-8}	$-5,92.10^{-04}$	$2,26.10^{-04}$
ϕ_0	1W.m^{-2}	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_0	10^{-2}	$7,93.10^{-05}$	$7,93.10^{-05}$
T_∞	10^{-2}	$1,33.10^{-04}$	$1,33.10^{-04}$

TAB. 4.10 – Erreur de la sensibilité de l'écart à la température moyenne (σ_2) par rapport aux paramètres

4.7.3.4 Temps de calcul pour un seul calcul de dérivées

L'évolution des temps de calcul de l'analyse de sensibilité par les deux méthodes pour les 8 paramètres est représentée sur la figure 4.18.

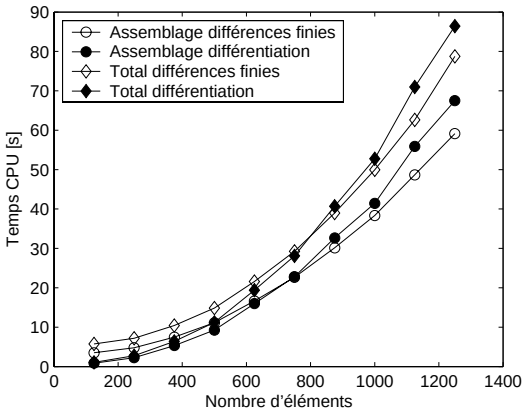


FIG. 4.18 – Évolution des durées d'assemblage et de calcul en fonction du nombre d'éléments

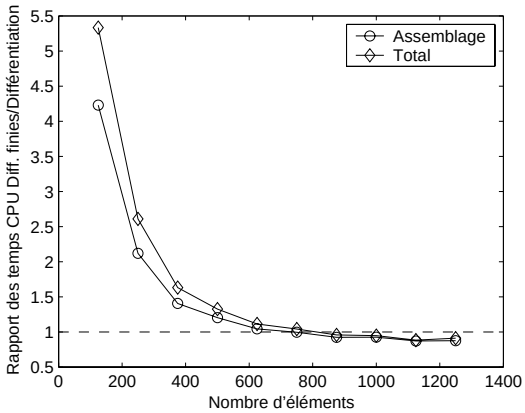


FIG. 4.19 – Évolution des rapports des durées d'assemblage et de calcul en fonction du nombre d'éléments

Le calcul des termes des matrices dérivées $\frac{\partial G}{\partial p}$ et $\frac{\partial H}{\partial p}$ est plus complexe que le calcul des matrices G et H. L'assemblage des p matrices dérivées est donc logiquement plus long que p assemblages des matrices simples. Toutefois, lors du calcul des matrices dérivées, il est possible d'utiliser certains résultats partiels du calcul des matrices originales, ce qui peut expliquer un temps d'assemblage plus court pour des maillages à peu d'éléments (moins de 800 éléments comme on peut le voir sur la figure 4.19).

4.7.3.5 Temps de calcul pour une optimisation complète

On suppose que l'optimisation comporte K itérations comportant chacune n_k itérations de recherche unidimensionnelle.

Si l'analyse de sensibilité est effectuée par différences finies, à chaque itération k, il faut réaliser :
- p calculs de la fonction objectif pour déterminer la valeur des dérivées de l'objectif et donc la direction de progression (la valeur de la fonction objectif est déjà connue à la fin de l'optimisation unidimensionnelle

de l'itération précédente),
- n_K calculs de la fonction pour déterminer le pas lors de l'étape d'optimisation unidimensionnelle (sauf pour la dernière itération).

En ajoutant le calcul de la fonction objectif au point initial, on obtient donc un total de $Kp + 1 + \sum_{k=1}^{K-1} n_k$ calculs par éléments frontières.

Si l'analyse de sensibilité est effectuée par différentiation directe, on doit réaliser à chaque itération k :
- un calcul pour déterminer la valeur de la fonction objectif et de ses dérivées, mais ce calcul comprend l'assemblage et la résolution de $p + 1$ systèmes linéaires,
- n_k calculs de la fonction pour déterminer le pas (ce calcul ne comprend l'assemblage et la résolution que d'un seul système et n'est pas effectué à la dernière itération).

Au total, on obtient donc $K + \sum_{k=1}^{K-1} n_k$ appels à la fonction de calcul par éléments frontières mais $K(p+1) + \sum_{k=1}^{K-1} n_k$ assemblages et résolutions de systèmes.

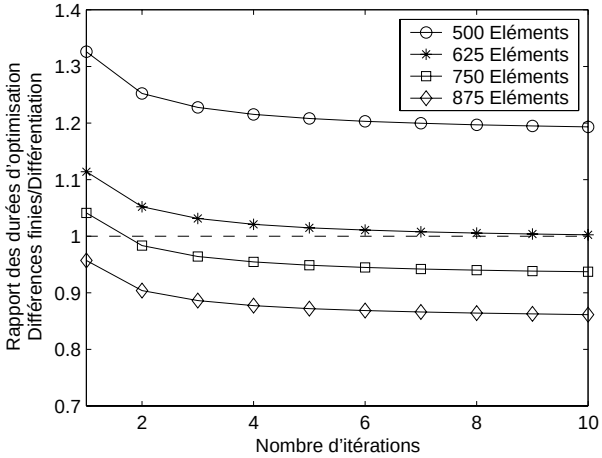


Fig. 4.20 – Évolution du rapport du temps d'optimisation en fonction du nombre d'itérations et du nombre d'éléments

La figure 4.20 représente le rapport des durées d'optimisation (en supposant que les deux méthodes d'analyse de sensibilité conduisent au même nombre d'itérations) calculé d'après les formules précédentes et les résultats en durée obtenus pour une dérivation par rapport aux 8 paramètres dans le paragraphe 4.7.3.4. Compte tenu des remarques précédentes sur le nombre de calculs par itérations, la méthode par différentiation est plus rapide si le nombre d'éléments est inférieur à environ 625 mais sera désavantageuse pour les gros maillages et une optimisation avec peu d'itérations.

Conclusion

La procédure d'optimisation du refroidissement des moules d'injection a été présentée dans ce chapitre. Elle repose sur un couplage de la méthode de calcul par éléments frontières (présentée dans le chapitre 3) avec une méthode d'optimisation de type Newton (méthode SQP disponible dans le module d'optimisation de Matlab®).

La mise en place de la procédure nécessite le choix des objectifs, en relation ici avec l'uniformité de température et le temps de refroidissement. Les fonctions à optimiser ont donc été détaillées en fonction du modèle

de calcul utilisé. Les paramètres retenus sont des paramètres de description de la géométrie des canaux et des paramètres propres à la régulation (comme la température du fluide de refroidissement). La prise en compte de contraintes sur ces paramètres s'avère nécessaire pour l'obtention de résultats réalistes et utilisables.

Enfin, les deux méthodes d'analyse de la sensibilité (par différences finies et différentiation) ont été présentées. Le calcul par différentiation a été implanté et validé par comparaison des résultats avec les calculs par différences finies. Les résultats montrent une très bonne concordance des résultats mais l'implantation du calcul par différentiation conduit à des temps de calcul plus longs pour des maillages ayant un grand nombre d'éléments. La méthode par différentiation sera donc uniquement utilisée lorsque le maillage comporte peu d'éléments et que la fonction objectif est dérivable.

Chapitre 5

Applications et validations expérimentales

L'objectif de ce chapitre est de présenter des applications de la procédure d'optimisation décrite dans le chapitre précédent. Deux exemples seront présentés : un en régime stationnaire et l'autre en régime transitoire. Ces exemples permettront d'étudier l'influence des points initiaux, de l'objectif, des contraintes et du modèle de calcul sur les résultats d'optimisation.

Enfin, des comparaisons des résultats de simulation et d'optimisation seront validés par comparaison à des mesures expérimentales réalisées avec des moules instrumentés.

5.1 Exemple d'application de l'optimisation avec un modèle stationnaire

On se propose de valider notre procédure d'optimisation en comparant les résultats obtenus avec un exemple tiré de la bibliographie. Matsumoto *et al.* [76] proposent d'étudier le placement et le dimensionnement de 4 canaux dans le moule représenté sur la figure 5.1 en utilisant une méthode de Newton (sans traiter de contraintes).

5.1.1 Modèle

Un modèle stationnaire est utilisé pour réaliser l'optimisation. Le modèle utilisé par Matsumoto est légèrement modifié par rapport à celui proposé dans le chapitre 2. Les conditions limites sont en effet les suivantes :

- convection à la surface de la cavité (h=260W.m^{-2}.K^{-1} et T_∞ = 96°C) ;
- convection à la surface des canaux de refroidissement avec un coefficient d'échange constant (h=290W.m^{-2}.K^{-1} et T_∞ = 45°C) ;
- convection sur la surface extérieure du moule (h = 15W.m^{-2}.K^{-1} et T_∞=25°C).

La conductivité du moule n'est pas indiquée mais pour une valeur de 45W.m^{-1}.K^{-1}, les résultats obtenus sont semblables à ceux proposés (voir au paragraphe 5.1.3).

5.1.2 Paramètres de l'optimisation

On cherche à minimiser l'écart des températures à la surface de la cavité moulante à une température objectif T_{obj} = 60°C. Cette fonction définie dans le chapitre précédent s'écrit :

$$\Phi = \sigma_1 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{\text{obj}}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} \tag{5.1}$$

La symétrie du problème permet de limiter le nombre de paramètres à 6 (voir figure 5.2) :

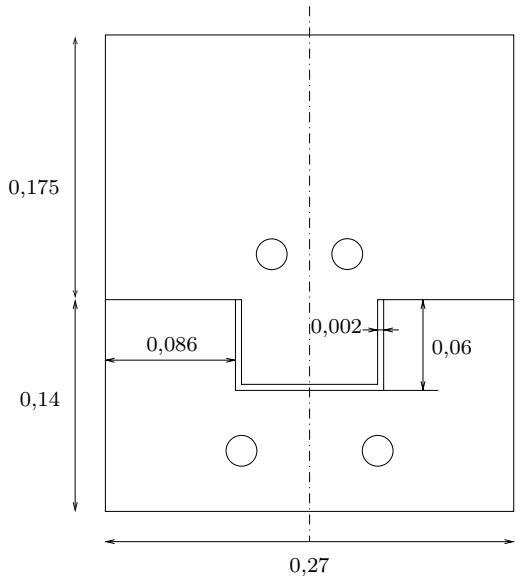


FIG. 5.1 – Géométrie du cas test [m]

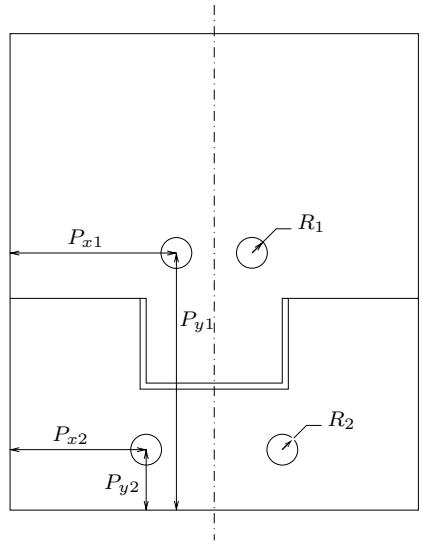


FIG. 5.2 – Définition des paramètres d'optimisation

- P_{x1} et P_{y1} définissent la position des canaux supérieurs,
- R_1 définit le rayon des canaux supérieurs,
- P_{x2} et P_{y2} définissent la position des canaux inférieurs,
- R_2 définit le rayon des canaux inférieurs.

On impose les contraintes suivantes pour forcer les canaux à rester dans le moule. Les contraintes utilisées sont linéaires continues mais ne permettent pas de décrire l'ensemble du moule. $\delta = 5$mm est le jeu minimal autorisé entre deux frontières (par exemple entre un canal et la cavité). Les rayons sont bornés entre $R_{min} = 3$mm et $R_{max} = 10$mm. L'ensemble des solutions ainsi défini est représenté schématiquement sur la figure 5.3.

$$g_i \leq 0 \text{ avec } \begin{cases} g_1 = -P_{x1} + R_1 + 0,088 + \delta \\ g_2 = P_{x1} + R_1 - 0,135 + \delta \\ g_3 = P_{y1} + R_1 - 0,315 + \delta \\ g_4 = -P_{y1} + R_1 + 0,082 + \delta \\ g_5 = -P_{x2} + R_2 + \delta \\ g_6 = P_{x2} + R_2 - 0,135 + \delta \\ g_7 = -P_{y2} + R_2 + \delta \\ g_8 = P_{y2} + R_2 - 0,08 + \delta \\ g_9 = -R_1 + R_{min} \\ g_{10} = -R_2 + R_{min} \\ g_{11} = R_1 - R_{max} \\ g_{12} = R_2 - R_{max} \end{cases} \tag{5.2}$$

Étant donné que les valeurs de paramètres proposées par Matsumoto *et al.* (tableau 5.1) vérifient ces contraintes linéaires, nous réaliserons dans un premier temps une comparaison avec cette configuration. D'autres contraintes, moins restrictives seront testées dans le paragraphe 5.1.6.

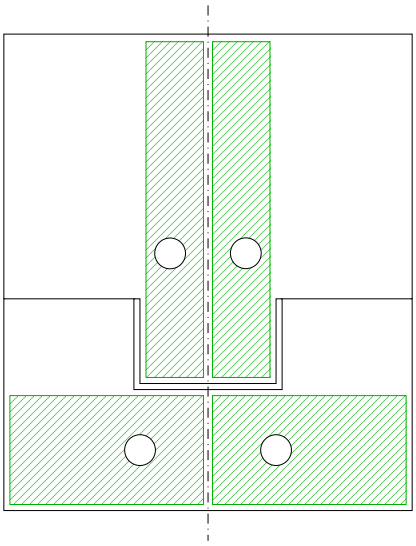


FIG. 5.3 – Zones solutions (hachurées) pour chacun des canaux de refroidissement

Paramètre	P_{x1} [m]	P_{y1} [m]	R_1 [m]	P_{x2} [m]	P_{y2} [m]	R_2 [m]
Valeur initiale	0,11	0,13	4.10^{-3}	0,06	0,04	4.10^{-3}
Valeur finale	0,115	0,098	10.10^{-3}	0,11	0,035	10.10^{-3}

TAB. 5.1 – Valeurs initiales et finales des paramètres proposées par Matsumoto [76]

5.1.3 Comparaison des résultats de simulation dans les configurations initiales et finales

Dans un premier temps, on se contente de comparer les profils de température à la surface de la cavité pour les mêmes géométries que celles obtenues par Matsumoto avec la méthode des éléments frontières, afin de valider notre calcul.

Les calculs pour la géométrie initiale et la géométrie finale sont réalisés pour différents maillages (voir tableau 5.2). La figure 5.4 permet de comparer les températures données par Matsumoto et les résultats de la simulation pour les géométries initiales et finales. L'abscisse curviligne s est définie sur la figure 5.5. Même avec le maillage le plus grossier utilisé (maillage 11), on a une bonne concordance des résultats, avec un écart moyen de température de 0,4°C pour les deux géométries. Les erreurs les plus importantes sont situées dans les coins de la cavité.

Le tableau 5.2 permet de comparer les valeurs de la fonction objectif pour les deux géométries en fonction du maillage. Les figures 5.6 et 5.7 représentent l'évolution de la valeur de l'objectif en fonction du nombre d'éléments. On constate qu'à partir d'un certain nombre d'éléments (830 pour les éléments constants et 548 pour les éléments linéaires), la valeur des objectifs se stabilise. La différence entre le maillage le plus fin (maillage 2) et le plus grossier (maillage 11) est de 3% environ. Le calcul avec les éléments constants étant plus rapide qu'avec les éléments linéaires, le maillage 5 (830 éléments constants) semble le mieux adapté. Il faut donc vérifier que le maillage n'a pas trop d'influence sur les paramètres optimisés et que l'on retrouve des résultats proches de ceux proposés par Matsumoto.

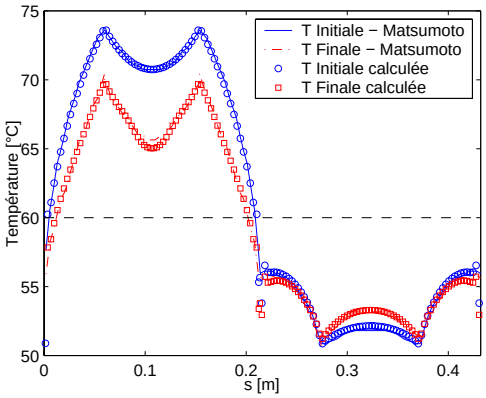


FIG. 5.4 – Comparaison des températures pour le maillage 11

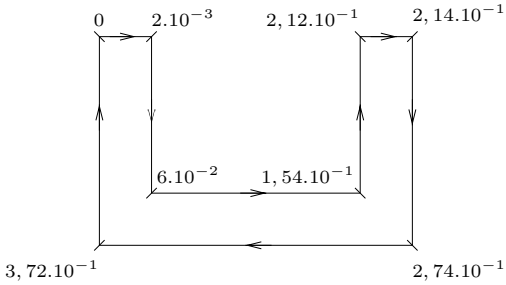


FIG. 5.5 – Définition de l'abscisse curviligne s le long de la cavité [m]

Maillage	Type d'éléments	Nombre d'éléments	Fonction objectif initiale calculée	Fonction objectif finale calculée
1	Constants	1580	7,9766	6,0304
2	Linéaires	1580	7,9715	6,0268
3	Constants	1208	7,9784	6,0313
4	Linéaires	1208	7,9718	6,0270
5	Constants	830	7,9841	6,0338
6	Linéaires	830	7,9727	6,0275
7	Constants	548	8,0038	6,0436
8	Linéaires	548	7,9744	6,0294
9	Constants	330	8,0342	6,0586
10	Linéaires	330	7,9960	6,0407
11	Constants	201	8,1998	6,1422
12	Linéaires	201	8,0558	6,0645

TAB. 5.2 – Évolution de la fonction objectif calculée en fonction du maillage

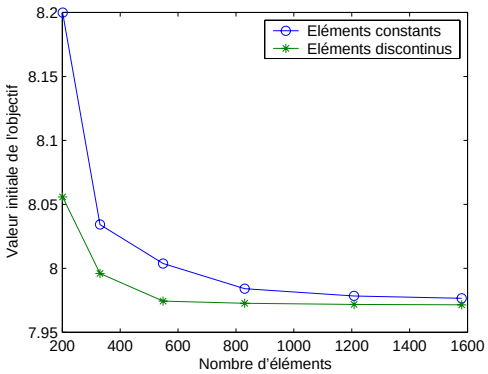


FIG. 5.6 – Évolution de la valeur de l'objectif pour la géométrie initiale en fonction du nombre d'éléments

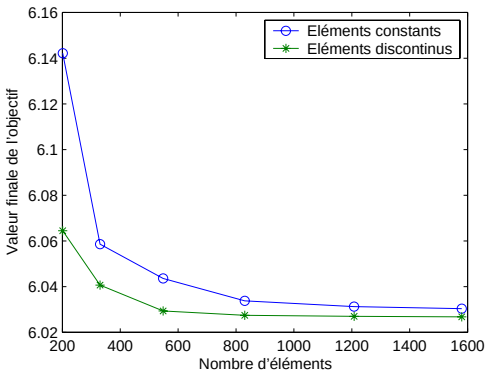


FIG. 5.7 – Évolution de la valeur de l'objectif pour la géométrie finale en fonction du nombre d'éléments

5.1.4 Effet du maillage sur le résultat de l'optimisation

Les résultats d'optimisation selon le maillage sont reportés dans le tableau 5.3. Dans tous les cas, les valeurs d'objectifs obtenues sont inférieures à celles obtenues par Matsumoto *et al.* En l'absence de détails sur les contraintes (en particulier les distances minimales entre les surfaces sont inconnues), il est difficile de comparer plus précisément les valeurs finales des paramètres, mais la forme finale obtenue (figures 5.8 à 5.10) et la répartition de température à la surface de la cavité (figure 5.11) sont globalement semblables.

Le maillage a peu d'influence sur les résultats de l'optimisation. Les paramètres ayant une forte influence sur la valeur de la fonction objectif (P_{x1} et P_{y1}) atteignent dans tous les cas la même valeur, mais ces valeurs correspondent à des contraintes saturées. Pour le paramètre P_{y2}, l'optimum ne correspond pas à une contrainte saturée et sa valeur exacte est donc plus difficile à obtenir. De plus, ce paramètre a une faible influence sur l'objectif, comme on peut le voir sur les figures 5.12 à 5.14. La position des canaux inférieurs ne modifie presque pas la répartition de température dans cette moitié du moule. On constate alors des différences en fonction du maillage. Le nombre d'itérations est également variable en fonction du maillage puisque les valeurs comparées aux critères d'arrêt varient légèrement.

Maillage	**Itérations**	**Objectif**	**Écart relatif** [%]	P_{x1} [m]	P_{y1} [m]	P_{x2} [m]	P_{y2} [m]	R_1 [m]	R_2 [m]
Matsumoto	?	6,0268	-	0,115	0,098	0,110	0,0350	0,010	0,010
1	8	5,7889	-3,95	0,103	0,097	0,120	0,0198	0,010	0,010
2	8	5,7848	-4,02	0,103	0,097	0,120	0,0197	0,010	0,010
5	8	5,7916	-3,90	0,103	0,097	0,120	0,0199	0,010	0,010
6	8	5,7853	-4,01	0,103	0,097	0,120	0,0196	0,010	0,010
9	6	5,8113	-3,58	0,103	0,097	0,120	0,0203	0,010	0,010
10	7	5,7969	-3,81	0,103	0,097	0,120	0,0196	0,010	0,010
11	6	5,8791	-2,45	0,103	0,097	0,120	0,0224	0,010	0,010
12	5	5,8261	-3,33	0,103	0,097	0,120	0,0150	0,010	0,010

Tab. 5.3 – Valeurs optimisées des paramètres en fonction du maillage

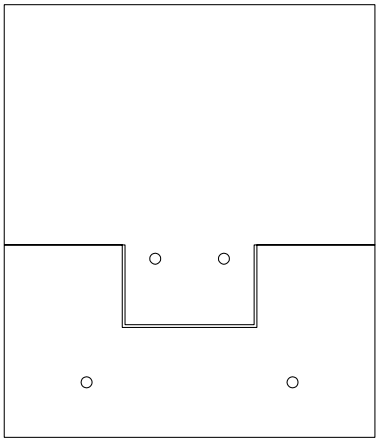


Fig. 5.8 – Géométrie initiale

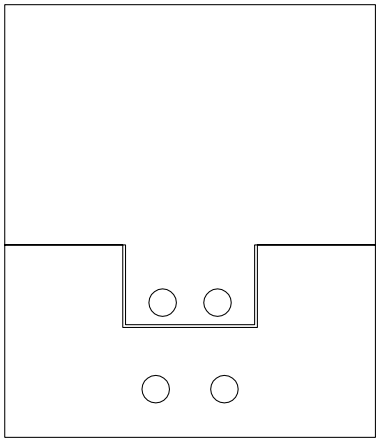


Fig. 5.9 – Géométrie finale obtenues par Matsumoto

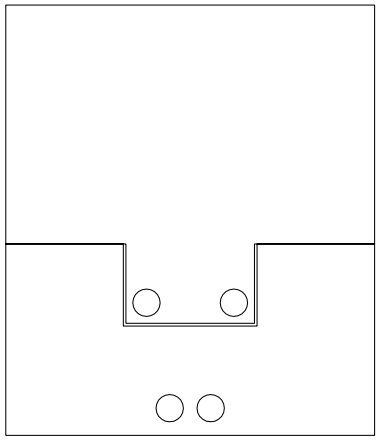


Fig. 5.10 – Géométrie finale obtenue avec le maillage 1

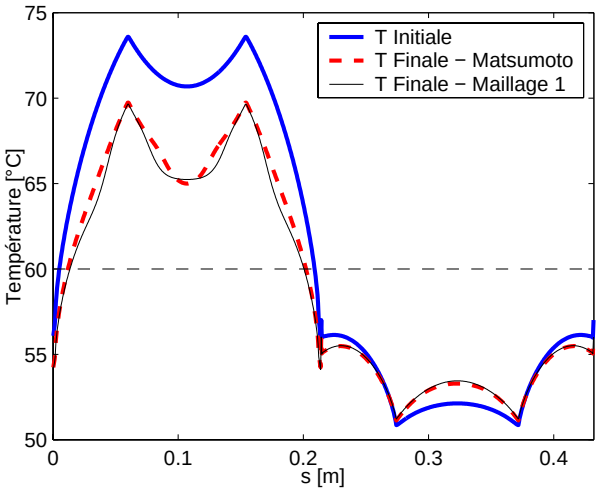


FIG. 5.11 – Comparaison des répartitions de température à la surface de la cavité

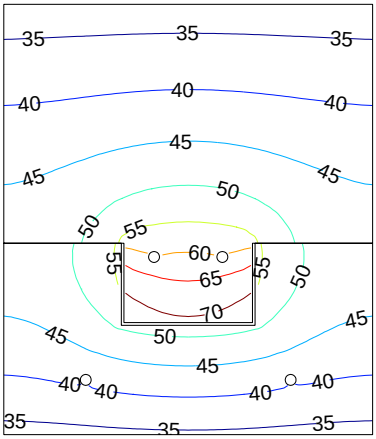


FIG. 5.12 – Répartition de température obtenue avec la géométrie initiale

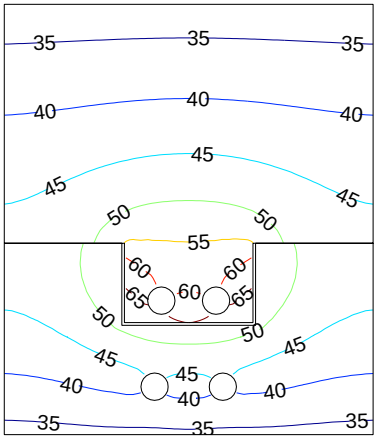


FIG. 5.13 – Répartition de température obtenue avec la géométrie finale de Matsumoto

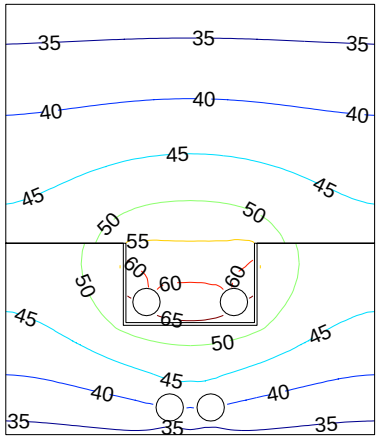


FIG. 5.14 – Répartition de température obtenue avec la géométrie finale obtenue avec le maillage 1

5.1.5 Prise en compte d'un coefficient de convection variable

L'hypothèse d'un coefficient d'échange convectif constant retenue par Matsumoto est peu réaliste. Selon l'écoulement, des variations importantes sont en effet observées avec le rayon. La dépendance du coefficient d'échange a donc été introduite et l'effet du débit sur les résultats a été étudié.

Le coefficient d'échange convectif utilisé semble correspondre à un écoulement laminaire pour lequel $Nu = 3,66$ (la conductivité correspondante est alors $\lambda_F = \frac{2Rh_F}{Nu} = 0,63\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$, valeur de l'eau). Le débit maximal pour rester en écoulement laminaire dans des canaux de 4 mm de rayon est $1{,}5.10^{-5}\text{m}^3.\text{s}^{-1}$.

5.1.5.1 Modèle

On introduit les modèles de variations du coefficient d'échange présentés dans le chapitre 2. Pour éviter les discontinuités pouvant compliquer l'optimisation et obtenir des variations plus réalistes, on introduit une zone de transition entre les modèles de calcul du coefficient d'échange pour les écoulements turbulents et les écoulements laminaires.

On a vu dans le chapitre 2 qu'en régime laminaire, $Nu = 3,66$ et en régime turbulent, $Nu = 0,023Re^{0,8}Pr^{\frac{1}{3}}$. Entre les deux types d'écoulement (3 000<Re<10 000), on approche linéairement Nu en fonction de Re entre les deux types d'écoulement (3 000<Re<10 000) :

$$Nu = 3,66 + \frac{Re - 3\,000}{10\,000 - 3\,000}\left(0,023 \times 10\,000^{0,8}Pr^{\frac{1}{3}} - 3,66\right) \tag{5.3}$$

Les évolutions du coefficient d'échange convectif h obtenues sont représentées sur les figures 5.15 et 5.16.

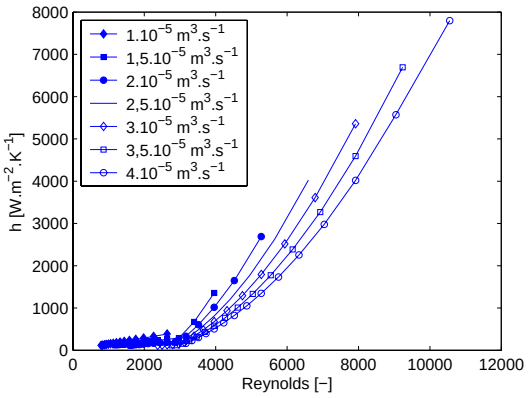


FIG. 5.15 – Évolution du coefficient d'échange convectif h en fonction du débit et du nombre de Reynolds

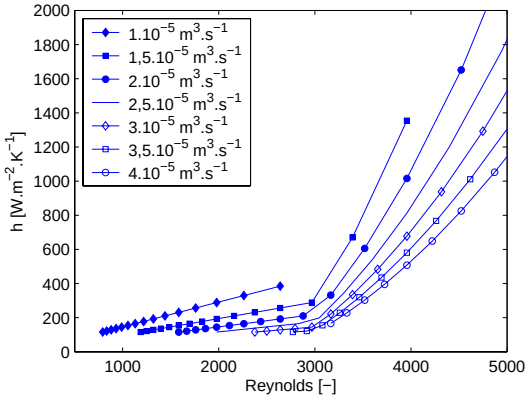


FIG. 5.16 – Détail de l'évolution du coefficient d'échange convectif h en fonction du débit et du nombre de Reynolds pour $Re < 5000$

La figure 5.17 représente l'évolution du coefficient d'échange convectif en fonction du rayon pour différents débits. En fonction du débit, la prise en compte de la variation du coefficient d'échange aura plus ou moins d'effet. Les variations du coefficient avec le rayon sont en effet beaucoup plus importantes pour un écoulement turbulent que pour un écoulement laminaire. Même lorsque l'écoulement est laminaire, un petit rayon est préférable pour augmenter le coefficient d'échange mais au détriment de la surface d'échange (à Nusselt constant, le coefficient évolue comme l'inverse du rayon).

5.1.5.2 Résultats

On réalise de nouveau l'optimisation en utilisant le maillage 5 et en utilisant différents débits. Les valeurs de paramètres et de la fonction objectif obtenues sont reportées dans le tableau 5.4. Les géométries de moules obtenues selon le débit sont représentées sur la figure 5.18.

On constate une évolution inverse de la taille des canaux entre les parties inférieures et supérieures. Dans la partie supérieure, on a une grande quantité de chaleur à évacuer. Pour un débit faible, il est donc préférable de diminuer la taille des canaux pour maximiser le coefficient d'échange. Plus le débit sera élevé et plus il sera possible d'utiliser de grands canaux pour augmenter la surface d'échange tout en maintenant un coefficient d'échange élevé.

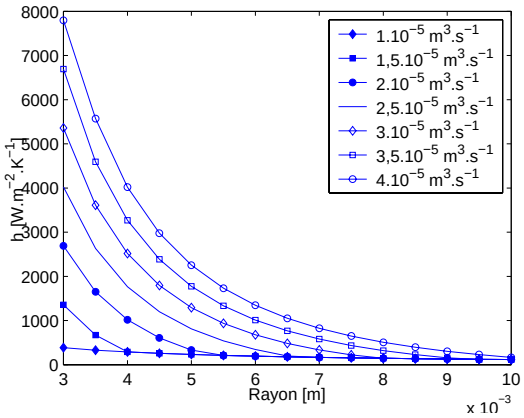


FIG. 5.17 – Évolution du coefficient d'échange convectif h en fonction du rayon du canal pour différents débits

Débit [m^3.s^{-1}]	Φ^0	Φ^*	P_{x1} [m]	P_{y1} [m]	P_{x2} [m]	P_{y2} [m]	R_1 [m]	R_2 [m]
1.10^{-5}	7,9877	6,7013	0,0960	0,0900	0,1200	0,0650	0,0030	0,0100
1,5.10^{-5}	7,9877	4,6912	0,0960	0,0900	0,1200	0,0650	0,0030	0,0100
2.10^{-5}	6,9788	3,8913	0,0992	0,0902	0,0974	0,0156	0,0032	0,0030
2,5.10^{-5}	6,4524	3,7954	0,0993	0,0910	0,0939	0,0152	0,0040	0,0030
3.10^{-5}	6,1495	3,7499	0,0999	0,0919	0,0909	0,0150	0,0049	0,0030
3,5.10^{-5}	5,9558	4,1255	0,1027	0,0967	0,0859	0,0154	0,0097	0,0030
4.10^{-5}	5,7394	4,2337	0,1039	0,0970	0,0852	0,0154	0,0100	0,0030

TAB. 5.4 – Évolution des résultats en fonction du débit

Les canaux de la partie inférieure évoluent de manière inverse. En effet, la température de la partie inférieure est inférieure à la température objectif même avant optimisation. Lorsque le débit est faible, un rayon élevé permet de diminuer la quantité de chaleur évacuée par ces canaux en diminuant fortement le coefficient d'échange convectif. Au contraire, lorsque le débit augmente, les échanges sont limités en diminuant au maximum la surface d'échange (en diminuant le rayon) et en éloignant le plus possible les canaux de la surface.

La figure 5.19 présente les profils de température obtenus à la surface de la cavité du moule après optimisation. On constate qu'un débit plus élevé permet de rapprocher plus facilement la température de la partie supérieure de la température objectif avec des canaux plus grands. La valeur de l'objectif est ainsi meilleure au final.

5.1.6 Influence du point initial et de la forme des contraintes

Les contraintes utilisées dans l'exemple précédent sont restrictives puisqu'elles ne permettent pas aux canaux de parcourir l'ensemble du moule (même si l'ensemble des solutions choisi semble le plus logique). Afin d'éviter ces restrictions, d'autres contraintes moins sévères ont été définies. L'influence du choix du point initial avec les différents types de contraintes est étudiée dans ce paragraphe.

5.1.6.1 Modification du problème

Pour simplifier l'étude des contraintes, seuls deux canaux de rayon constant vont désormais être utilisés. La suppression des canaux de la partie inférieure peut se justifier par un calcul stationnaire sans canaux de

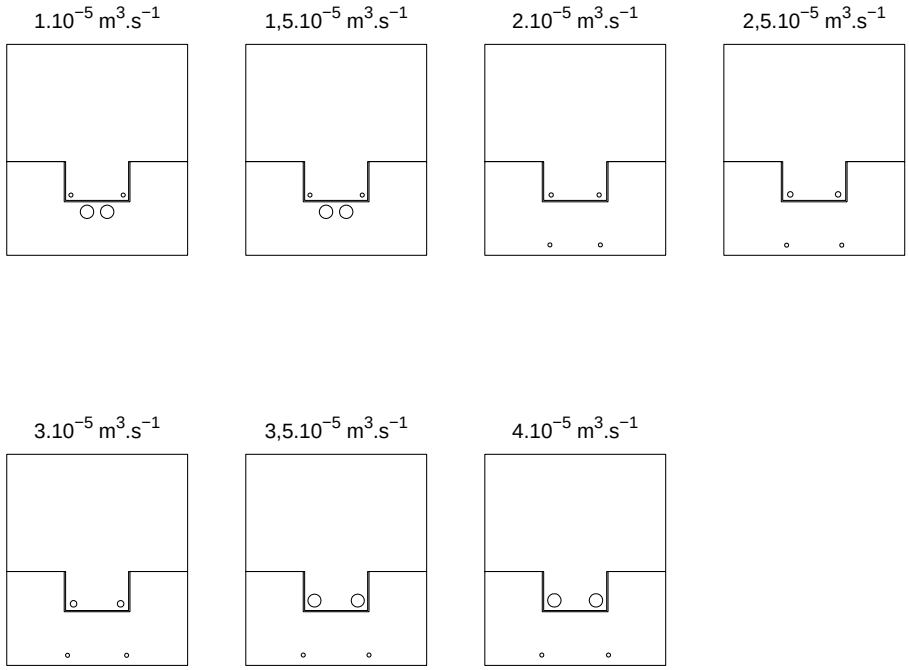


FIG. 5.18 – Géométries finales obtenues selon le débit

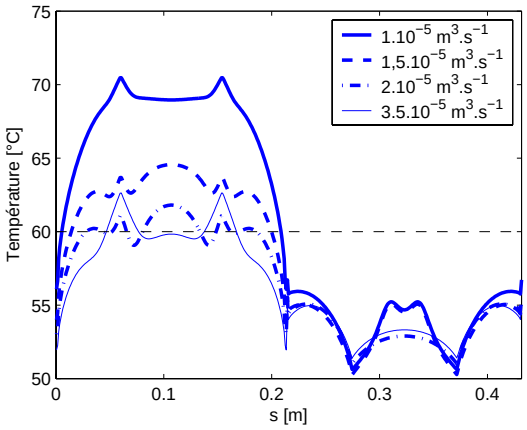


FIG. 5.19 – Profils de températures optimisés selon le débit

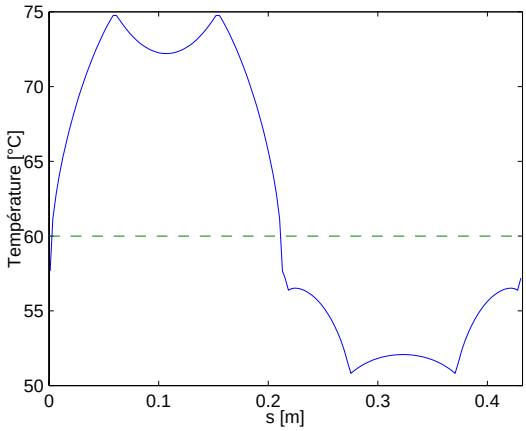


FIG. 5.20 – Profil de température à la surface de la cavité lorsque le moule n'est pas refroidit

refroidissement. Le profil de température à la surface de la cavité lorsque le moule ne contient aucun canal (figure 5.20) fait apparaître deux zones :

- la partie supérieure de la cavité où la température est largement supérieure à l'objectif de 60°C,
- la partie inférieure où la température est légèrement inférieure à l'objectif.

Si l'on ne dispose que d'un régulateur thermique pour maintenir la température du fluide, on ne pourra pas utiliser deux circuits de températures différentes. Dans ce cas, il semble plus intéressant de diminuer la température de la partie supérieure que d'augmenter celle de la partie inférieure qui est plus proche de l'objectif.

On ne considère donc que deux canaux répartis symétriquement dans le moule et dont la position du centre est définie par les deux coordonnées P_x et P_y. Le rayon des canaux est fixé à 4mm.

Enfin, si l'on souhaite que les canaux puissent parcourir l'ensemble du moule, il est nécessaire de définir un unique domaine pour tout le moule et de ne pas séparer les deux moitiés au niveau du plan de joint. En effet, lors du calcul par éléments frontières, la mise en données nécessite de savoir à quel domaine appartient chaque frontière (ou plutôt quelles frontières définissent un domaine). Si une frontière (interne) se trouve à l'extérieur du domaine qu'elle est sensée définir, les résultats de la simulation seront erronés. Pour la suite de l'exemple, on utilisera donc un domaine unique en supprimant l'interface du plan de joint.

5.1.6.2 Cas A : Contraintes linéaires continues

Dans un premier temps, on utilise le même type de contraintes que précédemment et on limite la position des canaux dans l'espace central de la partie supérieure du moule. On définit pour cela les contraintes suivantes :

$$g_i \leq 0 \text{ avec } \begin{cases} g_1 = -P_x + \delta + R + 0,088 \\ g_2 = P_x + \dfrac{\delta}{2} + R - 0,135 \\ g_3 = -P_y + \delta + R + 0,082 \\ g_4 = P_y + \delta + R - 0,315 \end{cases} \tag{5.4}$$

La contrainte maximale est représentée sur la figure 5.21 en fonction des paramètres. L'ensemble des solutions, défini par $\max g_i \leq 0$, est représenté sur la figure 5.22.

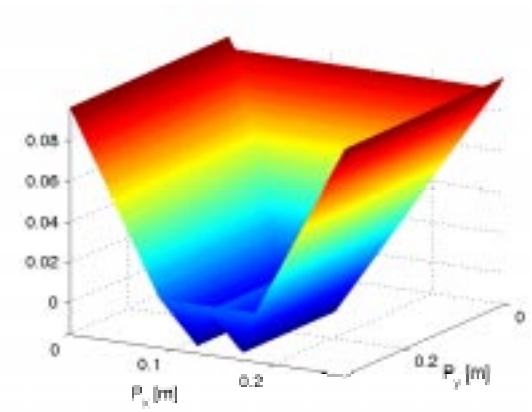


FIG. 5.21 – Valeur de la fonction contrainte en fonction des paramètres dans le cas A

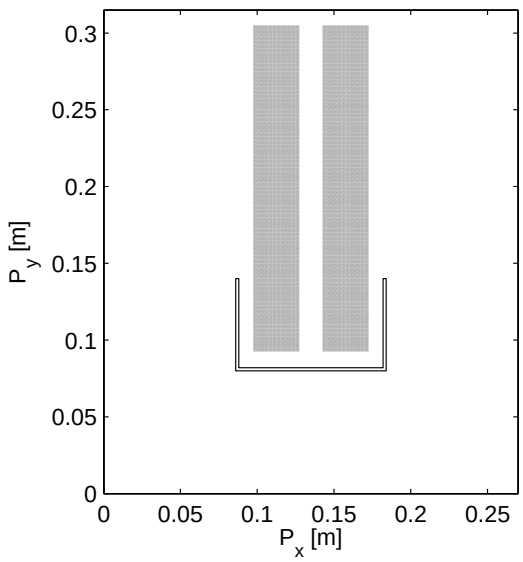


FIG. 5.22 – Ensemble des solutions (zones grisées) dans le cas A

Les résultats obtenus pour différents points initiaux sont rassemblés dans le tableau 5.5 et les géométries correspondantes sont représentées sur la figure 5.25. Il est intéressant de vérifier que l'algorithme ne nécessite pas que le point initial vérifie les contraintes. Dans ce cas, l'algorithme converge tout de même vers un optimum situé à l'intérieur de l'ensemble des solutions.

Cas	Φ^0	P_x^0	P_y^0	Φ^*	P_x^*	P_y^*
1	8,4861	0,0100	0,0100	8,6651	0,1260	0,3060
2	8,5932	0,0100	0,0750	5,2347	0,0970	0,0910
3	8,6312	0,0100	0,1500	8,6646	0,0970	0,3060
4	8,6145	0,0100	0,2000	5,2347	0,0970	0,0910
5	8,6420	0,0100	0,2500	5,2347	0,0970	0,0910
6	8,6480	0,0100	0,3000	8,6646	0,0970	0,3060
7	8,3880	0,1000	0,0100	8,6651	0,1260	0,3060
8	8,9315	0,1000	0,0750	5,2347	0,0970	0,0910
9	8,1515	0,1000	0,1500	5,2347	0,0970	0,0910
10	8,5672	0,1000	0,2000	5,2347	0,0970	0,0910
11	8,6680	0,1000	0,2500	5,2347	0,0970	0,0910
12	8,6670	0,1000	0,3000	8,6646	0,0970	0,3060

Tab. 5.5 – Valeurs finales en fonction des valeurs initiales dans le cas A

Selon les cas, le résultat obtenu n'est toutefois pas toujours un optimum global. En effet, la fonction objectif, représentée en fonction des paramètres vérifiant les contraintes sur la figure 5.23, présente deux minimums locaux pour $P_y = 0,1260$ représentés sur la figure 5.24. Sur cette figure, les courbes de niveau représentent des variations de la fonction objectif de 0,25 vers l'optimum absolu et 0,01 ailleurs pour des raisons de lisibilité.

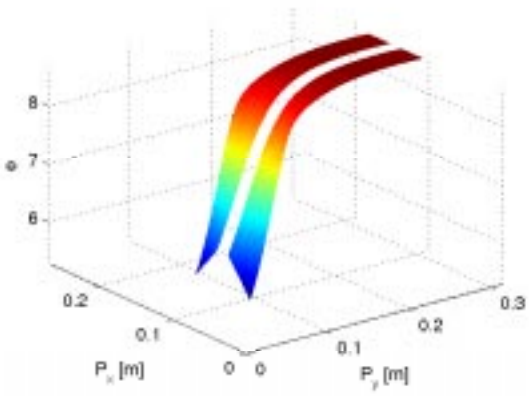


Fig. 5.23 – Représentation de la valeur de l'objectif en fonction des paramètres dans le cas A

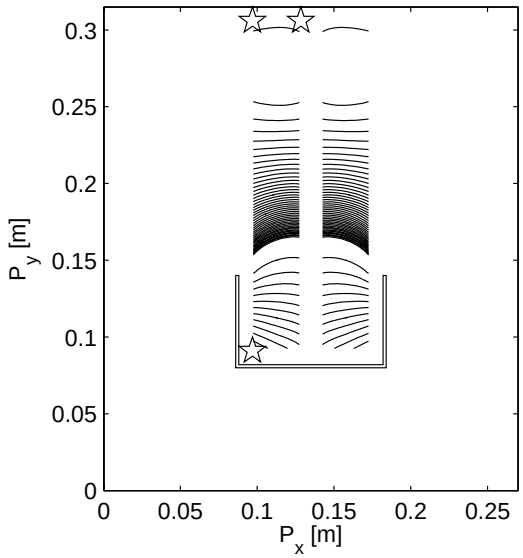


Fig. 5.24 – Courbes de niveaux de la fonction objectif en fonction des paramètres et positions finales obtenues (☆) dans le cas A

Dans tous les cas, la convergence est très rapide (entre 2 et 4 itérations) comme on peut le voir sur la figure 5.26. Dès la première itération, les contraintes sont toutes respectées et on s'approche d'un minimum. Les itérations suivantes sont utilisées pour affiner le résultat.

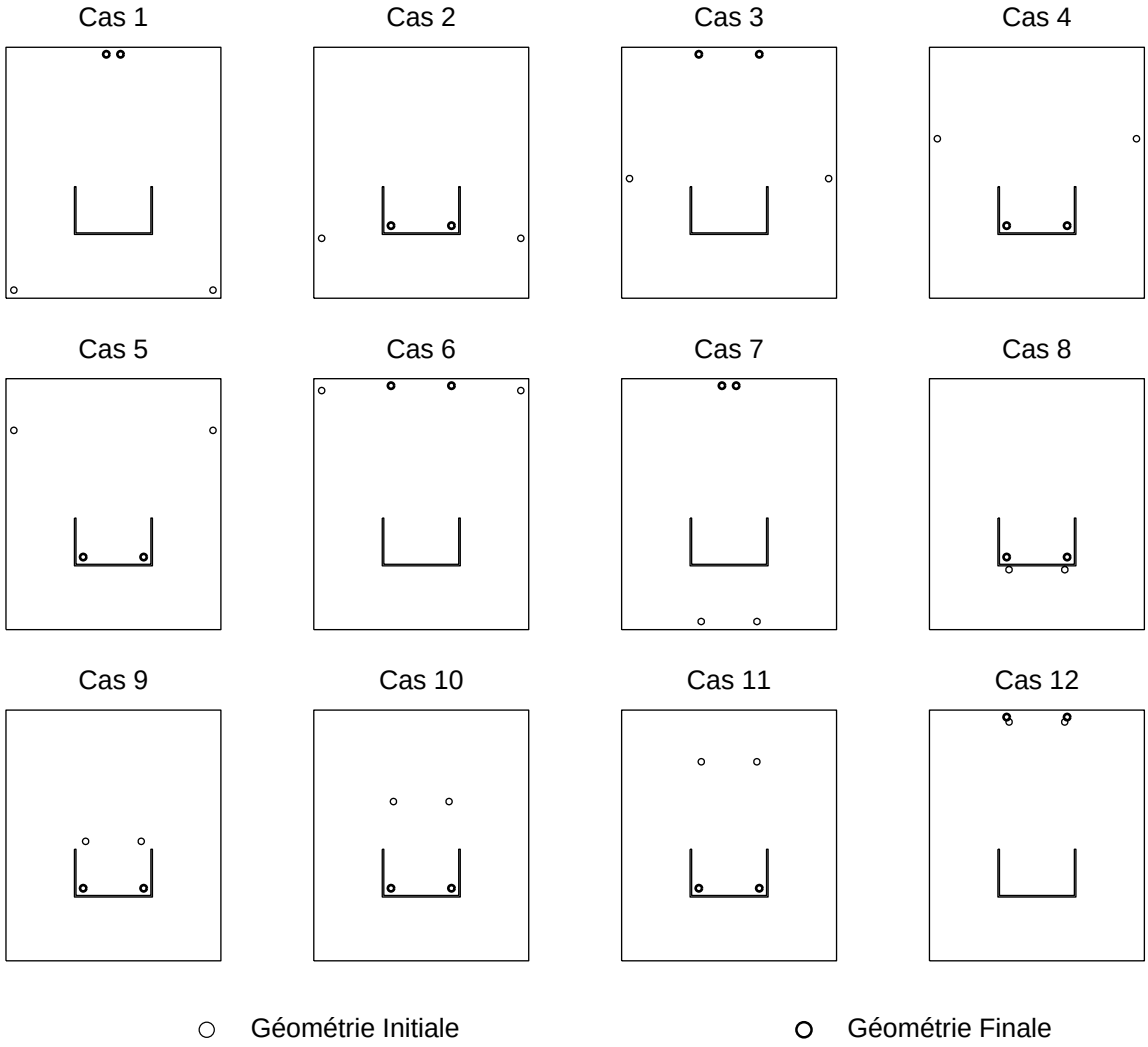


FIG. 5.25 – Géométries finales en fonction du point initial dans le cas A

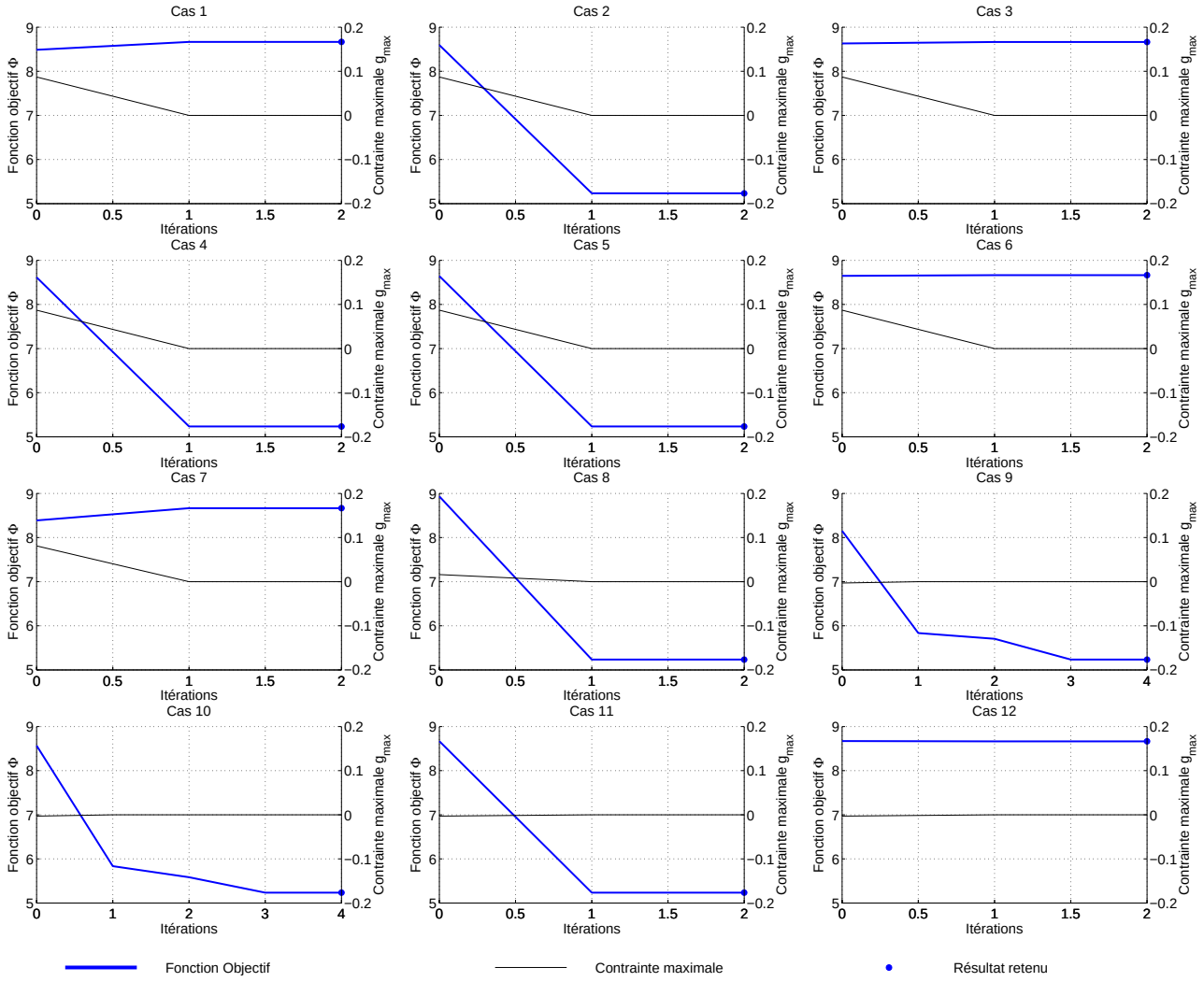


FIG. 5.26 – Évolution de l'objectif et de la contrainte maximale en fonction du point initial dans le cas A

L'hypothèse imposée par les contraintes est très forte puisque l'on limite la position des canaux dans une petite partie du moule. Ce choix semble évident pour cette géométrie, mais si l'on souhaite être moins restrictif, il est possible d'utiliser d'autres types de contraintes. Deux autres contraintes ont donc été testées : une basée sur un découpage du moule en plusieurs zones sur lesquelles sont définies des contraintes linéaires (contrainte linéaire par morceaux) et l'autre basée sur les distances entre frontières (contrainte non linéaire continue).

5.1.6.3 Cas B : Contraintes linéaires par morceaux non continues

Les paramètres P_x et P_y sont bornés pour rester à l'intérieur du moule. Comme le problème est symétrique, on limite la position d'un canal dans une moitié du moule. On a alors les contraintes suivantes :

$$g_i \leq 0 \text{ avec } \begin{cases} g_1 = -P_x + \delta + R \\ g_2 = P_x + \dfrac{\delta}{2} + R - 0,135 \\ g_3 = -P_y + \delta + R \\ g_4 = P_y + \delta + R - 0,315 \end{cases} \tag{5.5}$$

Pour éviter que les canaux ne se placent sur la cavité ou trop près, on définit en plus une contrainte de la façon suivante. On divise la moitié du moule en trois zones comme indiqué sur la figure 5.27. Un test est réalisé sur P_x pour déterminer dans quelle zone le canal se trouve. Si le canal ne se trouve pas dans la zone 1, on écrit une contrainte supplémentaire sur P_y de la façon suivante :

$$\begin{cases} g_5 = \max\left(-P_y + R + \delta + 0,082,\ P_y + R + \delta - 0,008\right) \text{ si } P_x \geq R + \delta + 0,088 \text{ (zone 3)} \\ g_5 = \max\left(-P_y + R + \delta + 0,14,\ P_y + R + \delta - 0,08\right) \text{ si } -R - \delta + 0,086 \leq P_x < R + \delta + 0,088 \text{ (zone 2)} \end{cases} \tag{5.6}$$

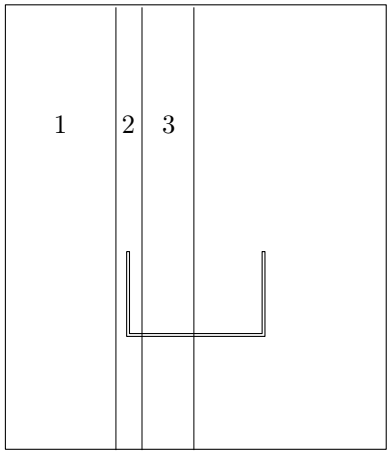


Fig. 5.27 – Zones utilisées pour écrire la contrainte du cas B

La contrainte maximale en fonction des paramètres est représentée sur la figure 5.28 et le domaine des solutions ainsi défini est représenté sur la figure 5.29. On peut voir que cette contrainte est non continue car elle présente de fortes variations lors du passage d'une zone à l'autre. Toutefois, elle présente l'avantage d'être linéaire par morceaux.

Les résultats obtenus avec les différents points de départ utilisés précédemment sont reportés dans le tableau 5.6 et les géométries correspondantes sont représentées sur la figure 5.32. On constate que selon le point de

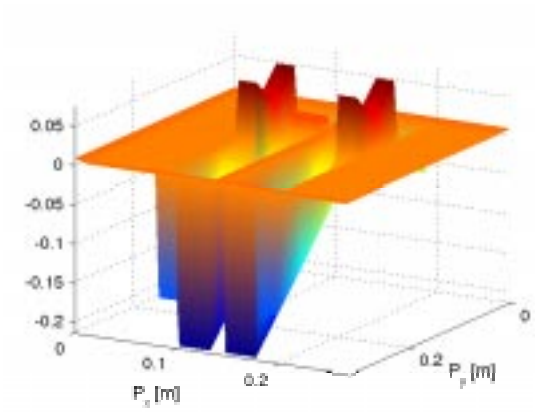


FIG. 5.28 – Valeur de la fonction contrainte en fonction des paramètres dans le cas B

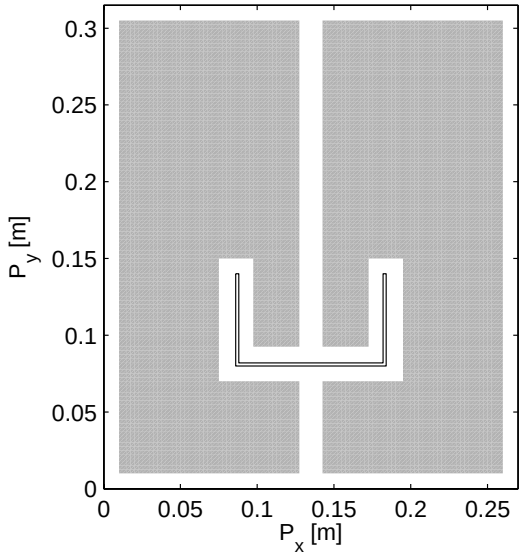


FIG. 5.29 – Ensemble des solutions (zones grisées) dans le cas B

départ, l'algorithme d'optimisation ne converge pas forcément vers le minimum absolu de la fonction objectif. Pour des points de départ trop éloignés de l'optimum global, les résultats obtenus correspondent à des minimums locaux que l'on voit apparaître sur les figures 5.30 et 5.31.

Cas	Φ^0	P_x^0	P_y^0	Φ^*	P_x^*	P_y^*
1	8,4861	0,0100	0,0100	8,3777	0,1148	0,0149
2	8,5932	0,0100	0,0750	8,3777	0,1148	0,0149
3	8,6312	0,0100	0,1500	5,2347	0,0970	0,0910
4	8,6145	0,0100	0,2000	5,2347	0,0970	0,0910
5	8,6420	0,0100	0,2500	8,3777	0,1147	0,0149
6	8,6490	0,0100	0,3000	8,6449	0,0090	0,3060
7	8,3880	0,1000	0,0100	8,3777	0,1149	0,0149
8	8,9315	0,1000	0,0750	8,3777	0,1148	0,0149
9	8,1515	0,1000	0,1500	5,2347	0,0970	0,0910
10	8,5672	0,1000	0,2000	5,2347	0,0970	0,0910
11	8,6680	0,1000	0,2500	8,3777	0,1148	0,0149
12	8,6670	0,1000	0,3000	8,6449	0,0090	0,3060

TAB. 5.6 – Valeurs finales en fonction des valeurs initiales dans le cas B

Les évolutions de la fonction objectif et de la contrainte maximale au cours des itérations sont représentées sur la figure 5.33 pour les différents cas. La convergence est plus lente que précédemment (entre 2 et 23 itérations selon les cas) suite à l'approximation linéaire des contraintes. L'ensemble des solutions est plus complexe, ce qui rend l'optimisation difficile.

La convergence est très rapide lorsque le point de départ est très proche d'un minimum local (cas 6, 7 et 12) par exemple. La convergence vers l'optimum global (cas 3, 4, 9 et 10) est généralement plus longue, ce qui peut s'expliquer par la difficulté de vérifier les contraintes d'arrêt dans cette zone où la pente est plus grande.

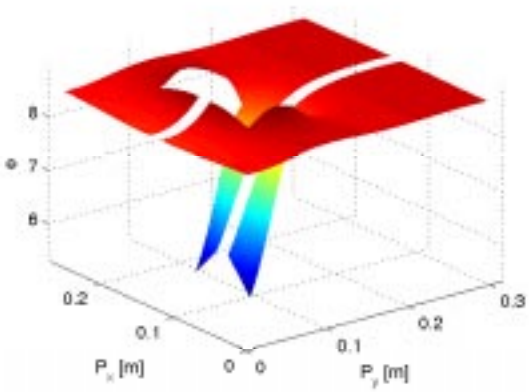


FIG. 5.30 – Représentation de la valeur de l'objectif en fonction des paramètres dans le cas B

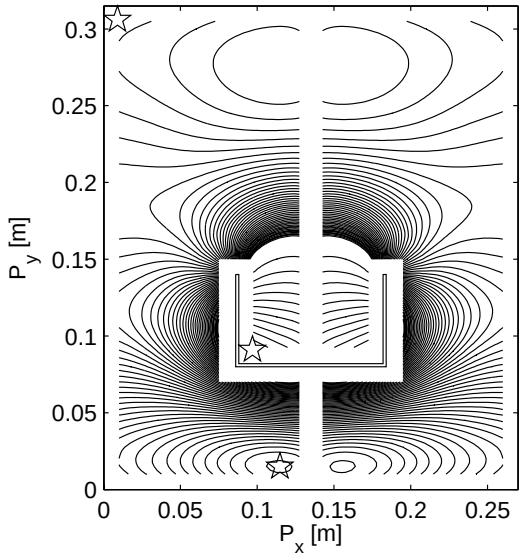


FIG. 5.31 – Courbes de niveaux de la fonction objectif en fonction des paramètres et positions finales obtenues (☆) dans le cas B

Le fait d'utiliser une contrainte non continue ne semble pas gênant dans ce cas car chaque zone contenant les points initiaux comporte son propre minimum local. Les déplacements de canaux entre les zones ne sont toutefois pas impossibles et sont visibles par exemple avec les cas 3 et 4.

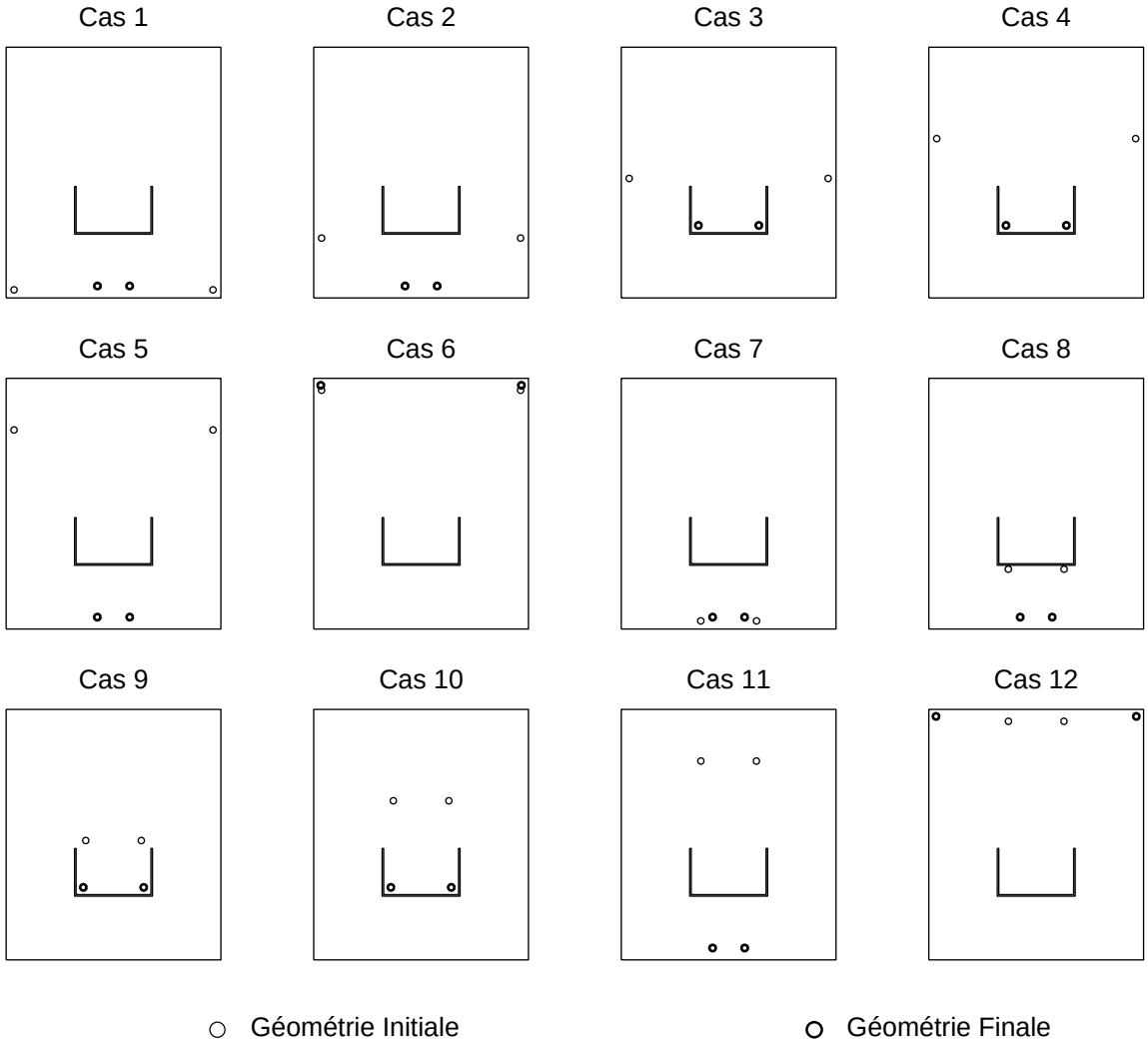


FIG. 5.32 – Géométries finales en fonction du point initial dans le cas B

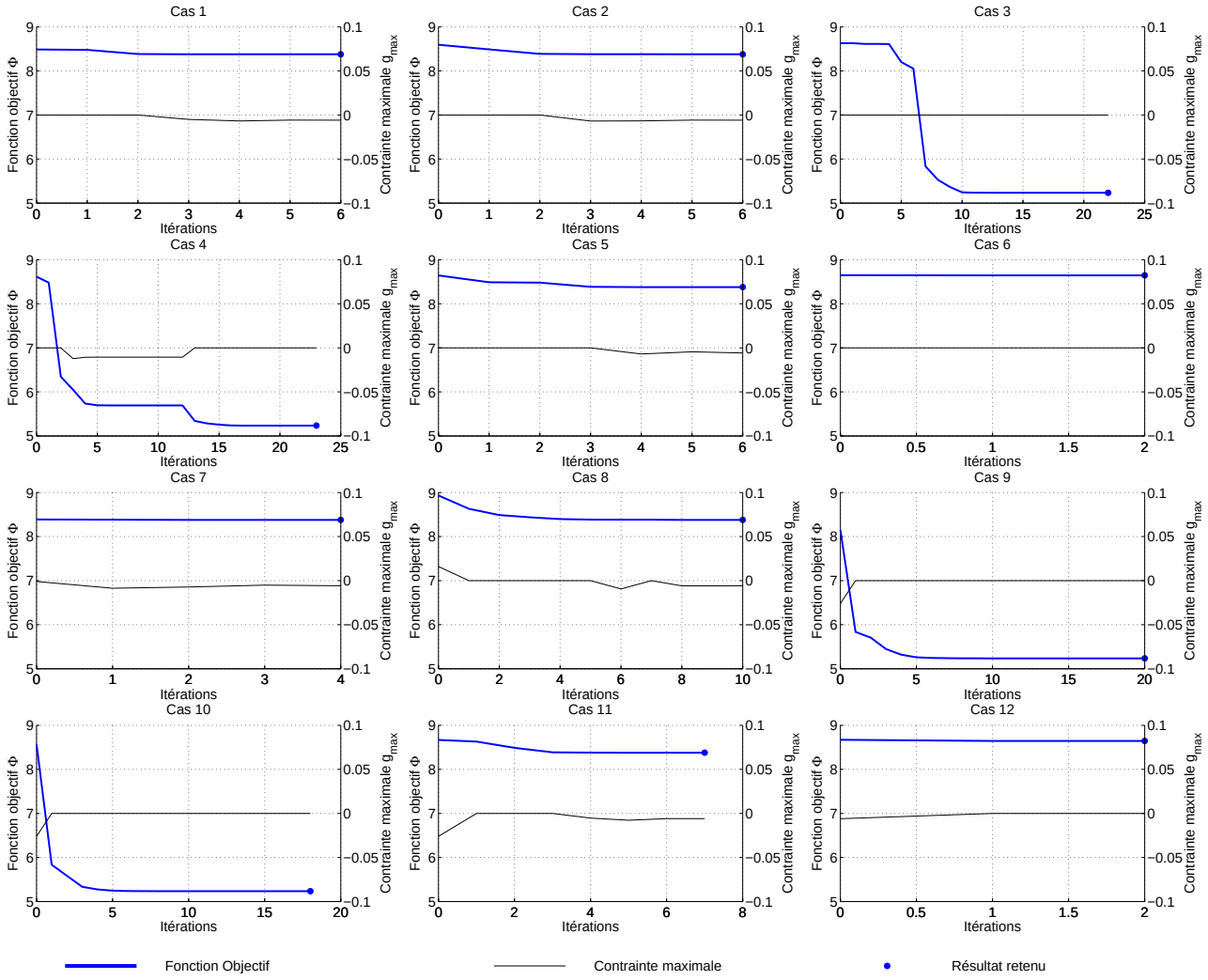


FIG. 5.33 – Évolution de l'objectif et des contraintes en fonction du point initial dans le cas B

5.1.6.4 Cas C : Contrainte non linéaire continue

Enfin, on peut envisager d'utiliser une contrainte non linéaire basée sur les distances entre les différentes frontières, avec une vérification de la position du canal à l'intérieur du polygone décrit par les éléments du contour.

La valeur de la contrainte est calculée de la manière suivante :
- pour chaque frontière du domaine contenant le canal, on détermine si le centre du canal se trouve à l'intérieur de l'espace déterminé par cette frontière et on calcule la distance minimale du centre à cette frontière,
- si le centre est à l'intérieur d'une frontière externe, la contrainte est égale à la distance moins le rayon et un jeu. S'il est à l'extérieur, la contrainte sera l'opposé de la distance moins le rayon et un jeu.
- pour une frontière interne, on inverse la règle précédente.

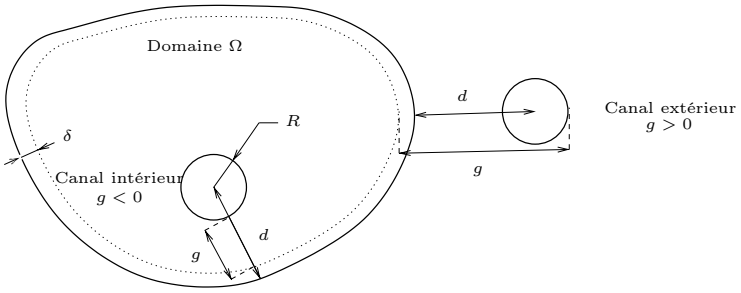


FIG. 5.34 – Définition de la contrainte liée à la distance du centre du canal à la frontière du domaine

Cette contrainte s'écrit donc (voir figure 5.34) :

$$g \leq 0 \text{ avec } \begin{cases} g = -\min(d) + R + \delta \text{ si le centre du canal est à l'intérieur du domaine} \\ g = \min(d) + R + \delta \text{ si le centre du canal est à l'extérieur} \end{cases} \tag{5.7}$$

La contrainte ainsi obtenue est une fonction continue mais non linéaire. Elle est représentée en fonction des paramètres sur la figure 5.35 et l'ensemble des solutions correspondant est indiqué sur la figure 5.36. La contrainte est irrégulière lorsque les paramètres correspondent à une position proche de la frontière externe du moule. La distance est calculée à partir des nœuds de la frontière. Lorsque le maillage est grossier (comme sur la surface extérieure), ce calcul est donc peu précis. Cette formulation a l'avantage de s'adapter facilement à des géométries complexes et serait particulièrement intéressante pour des problèmes 3D, où les stratégies précédentes sont difficiles à mettre en place et demandent une adaptation à chaque problème.

Les solutions obtenues selon le point initial sont résumées dans le tableau 5.7 et sur la figure 5.39. Les points initiaux correspondant aux cas 3, 4, 7 permettent d'obtenir l'optimum absolu. Les cas 1, 2, 5, 6, 8 et 12 correspondent à une convergence vers un optimum local, comme précédemment (voir figures 5.37 et 5.38). Les autres cas (9, 10, 11) correspondent à une convergence vers un optimum local mais avec un passage par un point vérifiant les contraintes et ayant une valeur d'objectif plus faible. La valeur retenue dans ce cas ne correspond pas forcément à un optimum, même si on en est très près. L'algorithme conserve en effet toujours en mémoire la meilleure valeur obtenue au cours des itérations.

Le nombre d'itérations (figure 5.40) est beaucoup plus important que dans le cas précédent (entre 9 et 38) pour un domaine de solutions presque semblable. Dans ce cas, on n'a pas borné les positions des canaux à l'intérieur du domaine mais seulement utilisé la contrainte non linéaire sur la distance. Cette stratégie semble

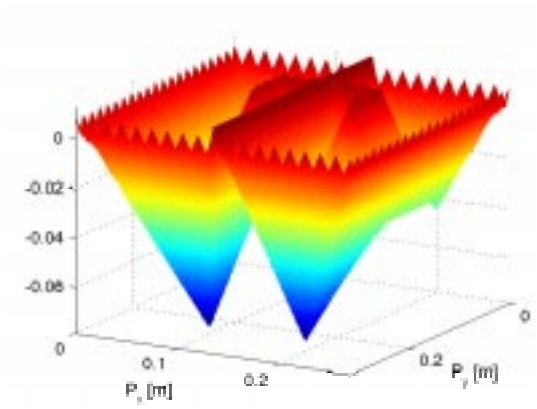


FIG. 5.35 – Valeur de la fonction contrainte en fonction des paramètres dans le cas C

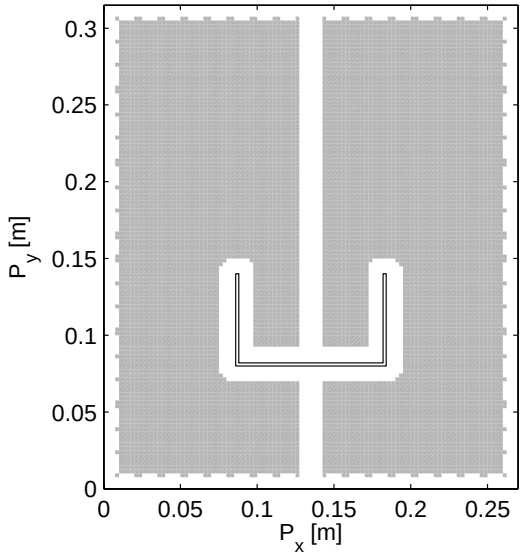


FIG. 5.36 – Ensemble des solutions (zones grisées) dans le cas C

Cas	Φ^0	P_x^0	P_y^0	Φ^*	P_x^*	P_y^*
1	8,4861	0,0100	0,0100	8,3799	0,1222	0,0159
2	8,5932	0,0100	0,0750	8,4829	0,261	0,0132
3	8,6312	0,0100	0,1500	5,2343	0,173	0,0910
4	8,6145	0,0100	0,2000	5,2346	0,1730	0,0910
5	8,6420	0,0100	0,2500	8,6420	0,0100	0,2500
6	8,6480	0,0100	0,3000	8,6429	0,0061	0,3084
7	8,3880	0,1000	0,0100	5,2347	0,1730	0,0910
8	8,9315	0,1000	0,0750	8,3777	0,1542	0,0153
9	8,1515	0,1000	0,1500	5,2923	0,0969	0,0926
10	8,5672	0,1000	0,2000	8,3862	0,1726	0,0134
11	8,6680	0,1000	0,2500	8,3450	0,1122	0,0054
12	8,6670	0,1000	0,3000	8,6623	0,0955	0,3079

TAB. 5.7 – Valeurs finales en fonction des valeurs initiales dans le cas C

donc moins efficace puisque la convergence est moins bonne et l'optimisation donne de moins bons résultats. Toutefois, pour une application à géométries complexes (éventuellement 3D), cette définition des contraintes semble la plus simple à mettre en œuvre.

Cet exemple a permis de valider la procédure d'optimisation utilisant un calcul stationnaire en comparant les résultats avec des résultats obtenus dans la bibliographie. Les résultats montrent l'importance de considérer un coefficient d'échange convectif variable avec le rayon pour prendre en compte les variations du type d'écoulement pour un débit donné.

Enfin, nous avons vu que la définition des contraintes et le choix des points initiaux est également important pour cet exemple. En effet, moins les contraintes sont restrictives (plus l'ensemble des solutions est étendu)

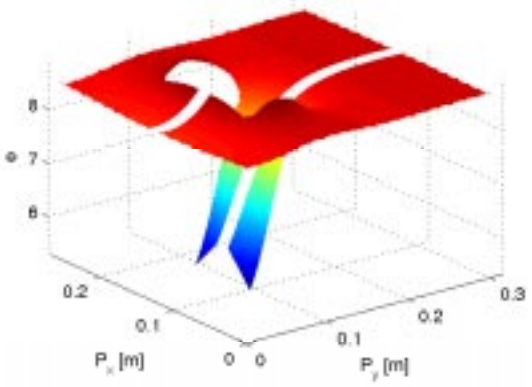


FIG. 5.37 – Représentation de la valeur de l'objectif en fonction des paramètres dans le cas C

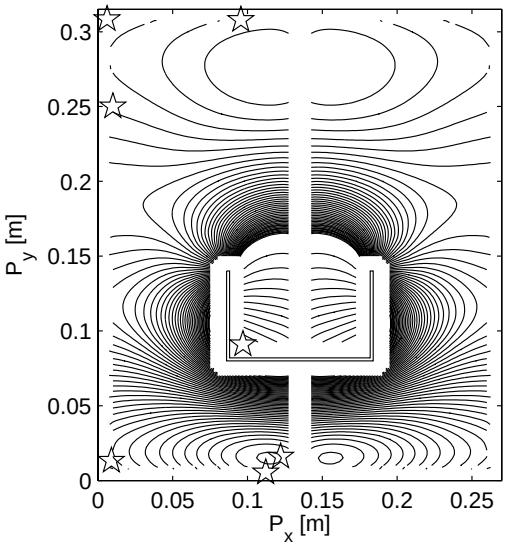


FIG. 5.38 – Courbes de niveaux de la fonction objectif en fonction des paramètres et positions finales obtenues (☆) dans le cas C

et plus on favorise l'apparition d'optimums locaux. La convergence globale de la méthode est alors fortement compromise. Dans ce cas, il serait intéressant d'envisager l'utilisation d'une autre méthode d'optimisation ayant une meilleure convergence globale (recuit simulé, algorithmes génétiques...)

Le type de contraintes utilisé est également important. Les contraintes linéaires, même discontinues (cas B) semblent permettre une convergence beaucoup plus rapide que les contraintes non linéaires continues (cas C) pour des ensembles de solutions quasiment identiques. Les contraintes non linéaires basées sur la distance du canal aux frontières du moule sont toutefois beaucoup plus simples à mettre en place et ne nécessitent qu'une faible adaptation à chaque problème.

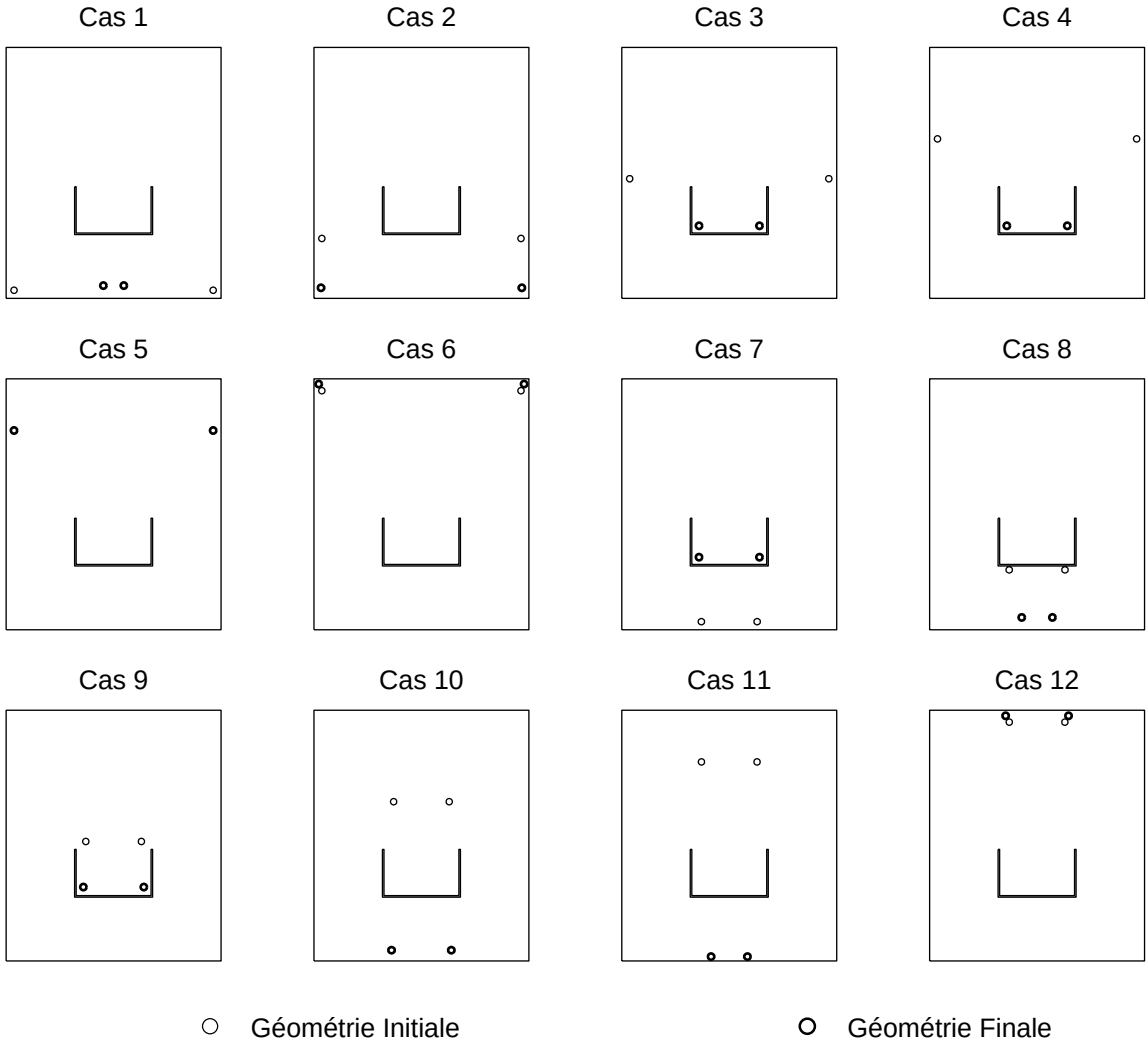


FIG. 5.39 – Géométries finales en fonction du point initial dans le cas C

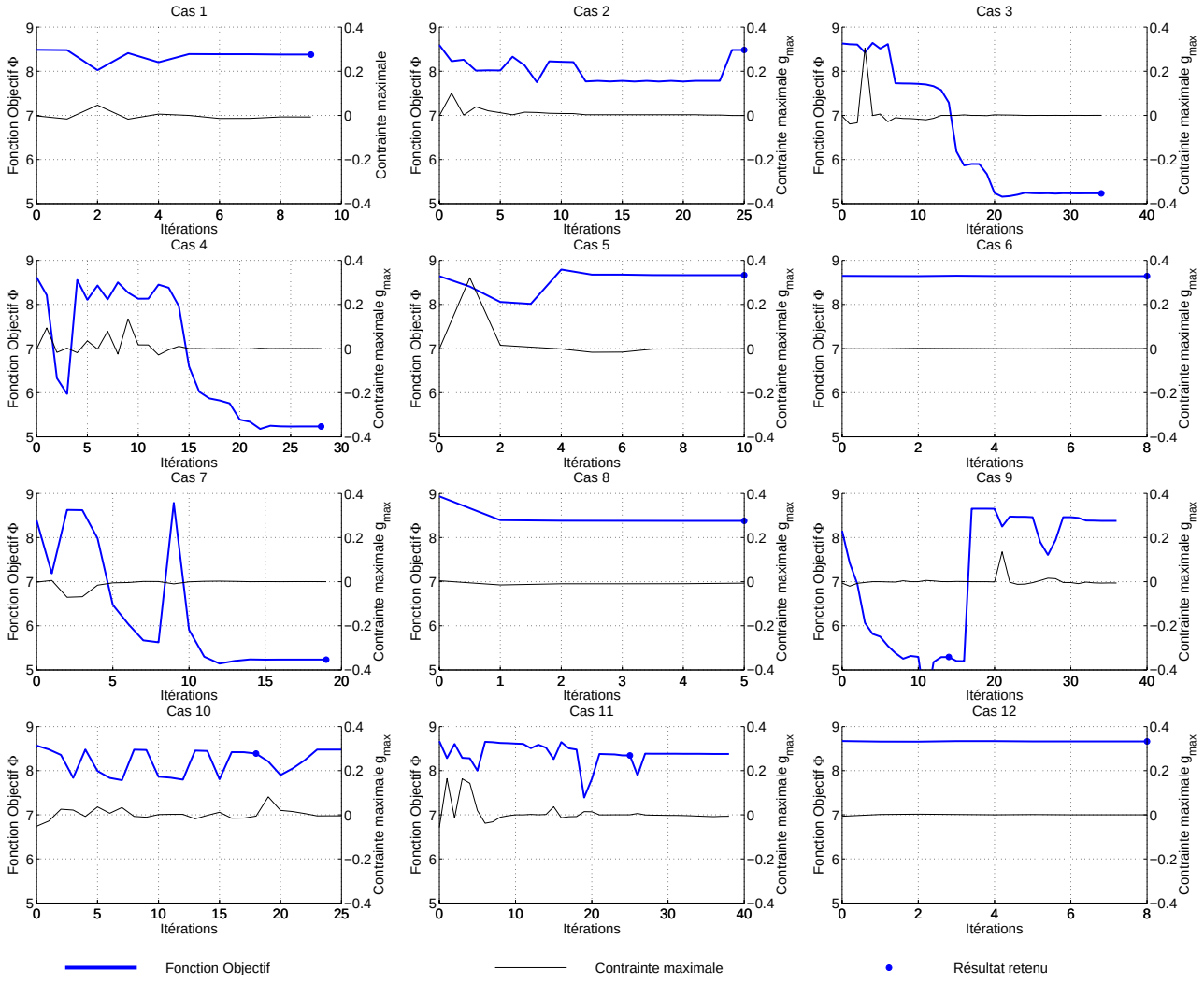


FIG. 5.40 – Évolution de l'objectif et des contraintes en fonction du point initial dans le cas C

5.2 Exemple d'application de l'optimisation avec un modèle transitoire

La procédure d'optimisation est maintenant appliquée à un problème transitoire. Les exemples de la bibliographie qui traitent du problème d'optimisation en transitoire sont tous résolus par la méthode des éléments finis. Nous proposons pour notre part une résolution uniquement basée sur les éléments frontières. L'influence de l'objectif sur les résultats sera étudiée et les résultats seront comparés à ceux obtenus avec un modèle stationnaire.

5.2.1 Définition du problème d'optimisation

Géométrie Tang [84, 85] a proposé une procédure d'optimisation semblable à celle présentée ici mais basée sur des calculs transitoires réalisés par éléments finis. La géométrie utilisée ici est tirée de son étude mais les objectifs sont différents. La géométrie du problème est représentée sur la figure 5.41. 8 canaux sont utilisés pour refroidir une pièce en "T" d'épaisseur $e_P = 3,8$mm.

Paramètres On définit 9 paramètres pour décrire le problème :
- le diamètre des canaux D_C,
- la position des canaux (7 paramètres H et L définis sur la figure 5.42),
- la température de l'eau T_F.

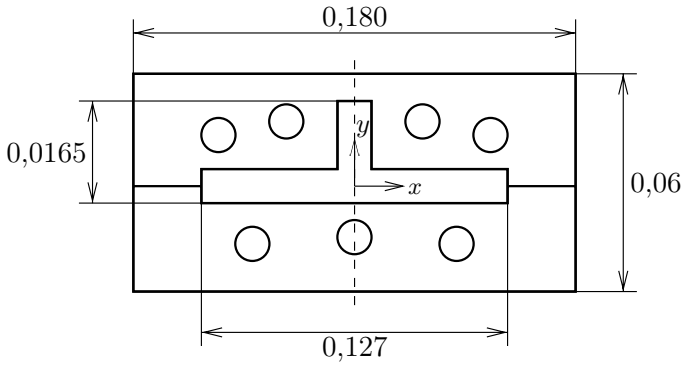


FIG. 5.41 – Géométrie du problème transitoire [m]

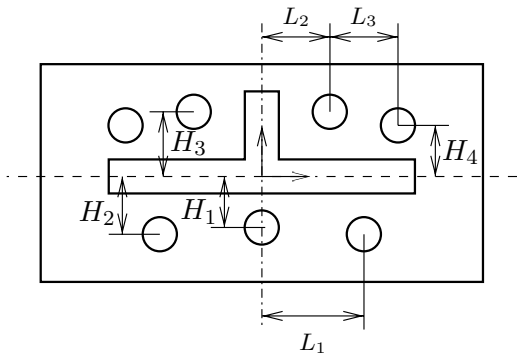


FIG. 5.42 – Définition des paramètres géométriques

Contraintes On introduit les contraintes linéaires suivantes pour contrôler la taille et la position des canaux et la température du fluide :

$$
\begin{array}{lll}
g_1 = D_C - D_{Cmax} & g_7 = \dfrac{D_C}{2} + L_3 + \delta - 0.09 & g_{13} = \dfrac{D_C}{2} + H_3 + \delta - 0.03 \\
g_2 = -D_C + D_{Cmin} & g_8 = D_C + L_2 - L_3 + \delta & g_{14} = \dfrac{D_C}{2} - H_3 + \delta + \dfrac{s}{2} \\
g_3 = \dfrac{D_C}{2} + L_1 + \delta - 0.09 & g_9 = \dfrac{D_C}{2} + H_1 + \delta - 0.03 & g_{15} = \dfrac{D_C}{2} + H_4 + \delta - 0.03 \\
g_4 = D_C - L_1 + \delta & g_{10} = \dfrac{D_C}{2} - H_1 + \delta + \dfrac{s}{2} & g_{16} = \dfrac{D_C}{2} - H_4 + \delta + \dfrac{s}{2} \\
g_5 = \dfrac{D_C}{2} + L_2 + \delta - 0.09 & g_{11} = \dfrac{D_C}{2} + H_2 + \delta - 0.03 & g_{17} = T_F - T_{Fmax} \\
g_6 = \dfrac{D_C}{2} - L_2 + \delta + \dfrac{s}{2} & g_{12} = \dfrac{D_C}{2} - H_2 + \delta + \dfrac{s}{2} & g_{18} = -T_F + T_{Fmin}
\end{array}
\tag{5.8}
$$

Le jeu et les bornes sur le diamètre et la température sont :

$$\delta = 2\text{mm} \qquad D_{Cmin} = 0,634\text{mm} \qquad D_{Cmax} = 0,11\text{mm} \qquad T_{Fmin} = 20°\text{C} \qquad T_{Fmax} = 60°\text{C}$$

Objectif L'objectif est une combinaison du temps de refroidissement et de l'uniformité de la température de la pièce au moment de l'éjection. La température d'éjection est $T_{ej} = 100°\text{C}$. On fait varier le facteur de pondération ω entre ces deux objectifs pour étudier l'effet sur le résultat.

$$\Phi = \omega \frac{t_{ref}}{t_{ref}^0} + (1-\omega)\frac{\sigma_P}{\sigma_P^0} \text{ avec } \sigma_P = \frac{1}{\Omega_P}\int_{\Omega_P} \|T - T_{moy}\|\, d\Omega \text{ pour } t = t_{ref} \tag{5.9}$$

5.2.2 Modèle transitoire

Le modèle utilisé correspond à celui présenté dans le chapitre 2. Les propriétés physiques des matériaux et du fluide de refroidissement sont résumées dans le tableau 5.8. La température d'injection du polymère est de 230°C. Le coefficient d'échange avec le fluide de refroidissement h_F est variable avec les rayons des canaux mais on considère que la viscosité de l'eau est constante avec la température.

Matériau	**Masse volumique ρ [kg.m^{-3}]**	**Capacité calorifique massique C_P [J.kg^{-1}.K^{-1}]**	**Conductivité thermiqueλ [W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Viscosité dynamique η [Pa.s]**
Acier	7820	460	36,5	-
Polymère	938	1800	0,25	-
Réfrigérant	996	4181	0,63	8,01.10^{-4}

Tab. 5.8 – Propriétés des matériaux et du réfrigérant pour le modèle transitoire

La pièce est divisée en domaines de forme carrée en contact parfait de manière à accélérer le calcul et obtenir des domaines qui ne présentent pas de rapport de forme trop élevé (figure 5.43). On utilise deux éléments discontinus (soit 4 nœuds) et 4 points internes dans l'épaisseur. Au total, pour représenter la pièce, on utilise 36 domaines, 288 éléments (soit 576 nœuds) et 584 points internes.

Le moule est simplement séparé en deux domaines en contact au niveau du plan de joint (figure 5.44) Le maillage à la surface de la cavité est de la même taille que le maillage de la pièce. Ailleurs, la taille des éléments est augmentée. Au total, le moule comprend 2 domaines, 378 éléments (soit 756 nœuds) et 174 points internes.

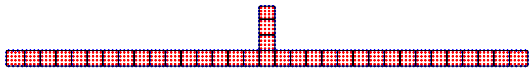


Fig. 5.43 – Maillage de la pièce pour le calcul transitoire

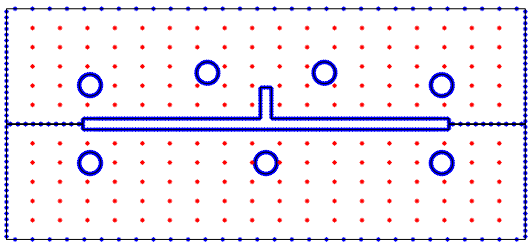


Fig. 5.44 – Maillage du moule pour le calcul transitoire

Le pas de temps est fixé à 2s et la durée du phénomène à 30s. Dans cette configuration, le temps de calcul est d'environ 150s (PC à 1,3GHz et 512Mo de RAM).

5.2.3 Résultats

La géométrie initiale est celle proposée par Tang. Les résultats obtenus pour différentes valeurs de ω sont reportés dans le tableau 5.9 et représentés sur la figure 5.45. L'évolution de la température de la pièce avec le temps et la répartition de la température en $y = 0$ après 22 secondes de refroidissement sont représentées sur les figures 5.47 et 5.46.

Cas	Φ [-]	t_{ref} [s]	σ_P [°C]	D_C [m]	L_1 [m]	L_2 [m]	L_3 [m]	H_1 [m]	H_2 [m]	H_3 [m]	H_4 [m]	T_F [°C]
Initial	1	20,48	546,09	0,0076	0,0610	0,0203	0,0610	0,0135	0,0135	0,0178	0,0135	30
$\omega = 0$	0,981	20,57	535,66	0,0064	0,0715	0,0071	0,0839	0,0348	0,0293	0,0348	0,0071	30
$\omega = 0,5$	0,982	20,00	539,43	0,0068	0,0752	0,0118	0,0755	0,0271	0,0248	0,0109	0,0250	30
$\omega = 1$	0,887	17,94	791,01	0,0064	0,0848	0,0071	0,0178	0,0071	0,0163	0,0071	0,0071	20

TAB. 5.9 – Résultats de l'optimisation transitoire

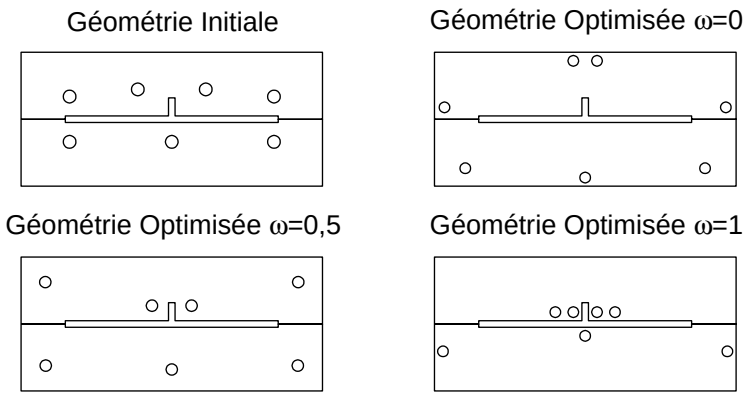


FIG. 5.45 – Géométries obtenues en fonction du facteur ω

Selon les objectifs, qui sont contradictoires, les résultats sont très différents. Pour uniformiser la température de la pièce au moment de l'éjection ($\omega = 0$), il est en effet préférable d'éloigner les canaux de refroidissement et d'utiliser une température de fluide plus élevée. On constate dans ce cas une augmentation du temps de refroidissement négligeable (0,1 seconde) par rapport au cas initial.

Au contraire, pour minimiser le temps de refroidissement ($\omega = 1$), il faut approcher au maximum les canaux de la partie centrale de la pièce et diminuer la température du réfrigérant. Il est ainsi possible de gagner plus de 2 secondes sur le temps de refroidissement (figure 5.47) mais au détriment de l'uniformité de température.

Si l'on choisit un objectif intermédiaire entre le temps de refroidissement et l'uniformité de température ($\omega = 0,5$), la géométrie obtenue est un intermédiaire entre les deux cas précédents. Il faut approcher les deux canaux supérieurs de la partie centrale mais on doit laisser les autres, qui ne sont pas utilisés pour refroidir la zone chaude centrale, assez loin de la cavité.

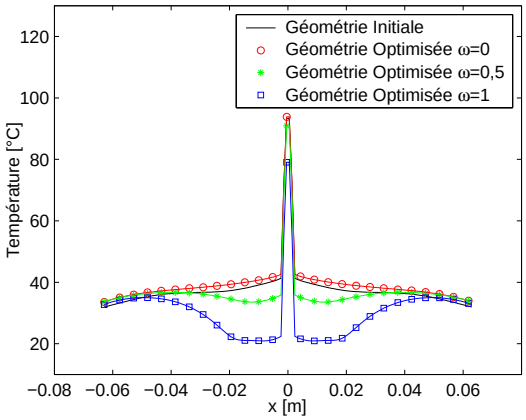


FIG. 5.46 – Comparaison des températures au centre de la pièce ($y = 0$) après 22s de refroidissement

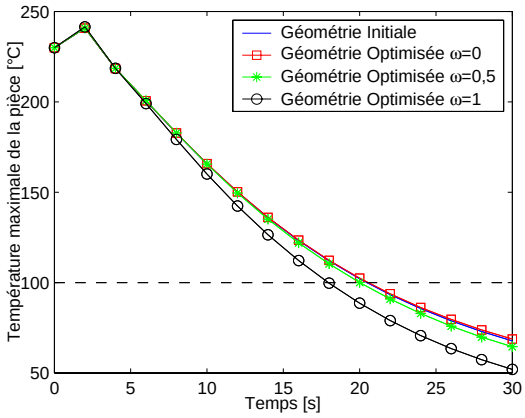


FIG. 5.47 – Évolution de la température maximale de la pièce selon le facteur ω

5.2.4 Comparaison aux résultats obtenus par un calcul stationnaire

Nous avons supposé lors de la définition des objectifs utilisables avec un régime stationnaire que la température moyenne sur la surface de la cavité était un bon indicateur du temps de refroidissement et que l'uniformité de température sur la surface de la cavité était un indicateur de l'uniformité de température dans la pièce. Pour vérifier ces hypothèses, une optimisation est réalisée en régime stationnaire avec ces objectifs pour comparer les résultats aux optimums précédents.

5.2.4.1 Optimisation avec un calcul stationnaire

On utilise la fonction objectif combinaison de la température moyenne et de l'écart à la température moyenne avec un facteur de pondération ω compris entre 0 et 1.

$$\Phi = \omega \frac{T_{moy}}{T^0_{moy}} + (1-\omega)\frac{\sigma_2}{\sigma_2^0} \text{ avec } \sigma_2 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{moy}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} \tag{5.10}$$

Les résultats obtenus pour les différentes valeurs sont résumés dans le tableau 5.10 et sur la figure 5.48. On retrouve les mêmes tendances que pour le cas transitoire :

- pour $\omega = 0$, il faut éloigner les canaux de la cavité,
- pour $\omega = 1$, il faut approcher les canaux de la cavité,
- pour $\omega = 0,5$, il faut placer les canaux dans une position intermédiaire.

Les températures en surface de la cavité sont représentées sur la figure 5.49. On observe bien l'amélioration de l'uniformité de température avec $\omega = 0$ et la diminution de la température moyenne avec $\omega = 1$. Mais les résultats sur les paramètres sont tout de même légèrement différents de ceux obtenus précédemment.

5.2.5 Comparaison des résultats

On effectue les simulations transitoires correspondant aux géométries optimales obtenues avec le modèle stationnaire. Le tableau 5.11 présente les valeurs de temps de refroidissement et de la mesure de l'uniformité dans la pièce pour les géométries optimisées obtenues avec les modèles stationnaires et transitoires.

Le modèle stationnaire ne permet pas de retrouver des résultats aussi bons que ceux du modèle transitoire. En effet, certaines hypothèses ne sont pas réalistes et conduisent à des erreurs d'optimisation. Par exemple, le flux à la surface de la cavité n'est pas uniforme : l'épaisseur de pièce étant plus grand au niveau de l'intersection,

Cas	Φ [-]	T_{moy} [°C]	σ_2 [°C]	D_C [m]	L_1 [m]	L_2 [m]	L_3 [m]	H_1 [m]	H_2 [m]	H_3 [m]	H_4 [m]	T_F [°C]
Initial	1	49,58	4,03	0,0076	0,0610	0,0203	0,0610	0,0135	0,0135	0,0178	0,0135	30
$\omega = 0$	0,23	50,16	0,93	0,0093	0,0392	0,0123	0,0452	0,0208	0,0202	0,0191	0,0229	30
$\omega = 0,5$	0,49	35,33	1,06	0,0111	0,0418	0,0116	0,0457	0,0145	0,0155	0,0147	0,0176	20
$\omega = 1$	0,61	30,38	2,65	0,0093	0,0418	0,0086	0,0464	0,0086	0,0086	0,0086	0,0086	20

TAB. 5.10 – Résultats de l'optimisation stationnaire

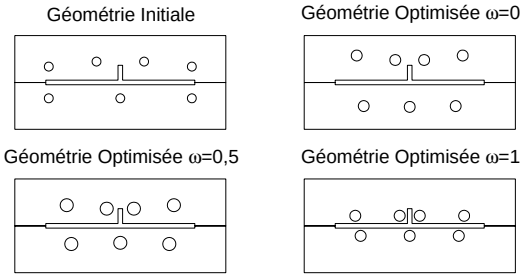


FIG. 5.48 – Géométries obtenues selon le facteur ω

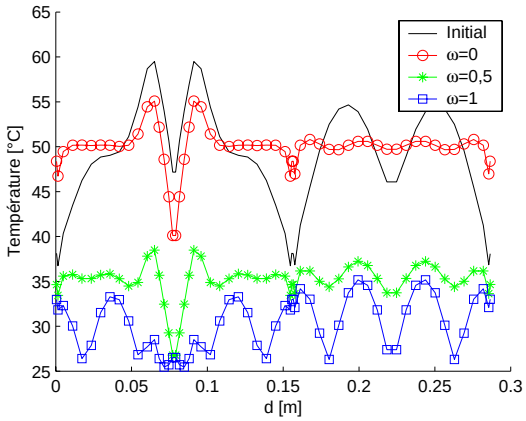


FIG. 5.49 – Profil de température obtenu à la surface de la cavité selon le facteur ω

	Géométries optimales transitoires			**Géométries optimales stationnaires**		
ω	Φ^* [-]	t_{ref} [s]	σ_P [°C]	Φ^* [-]	t_{ref} [s]	σ_P [°C]
0	0,981	20,57	535,66	0,985	20,45	537,85
0,5	0,982	20,00	539,43	1,086	21,53	663,61
1	0,887	17,94	791,01	0,902	20,28	666,60

TAB. 5.11 – Comparaison des résultats transitoires et stationnaires

le flux devrait être plus grand dans cette zone. Pour ces mêmes raisons, la température moyenne dans le moule semble être un mauvais indicateur du temps de refroidissement. La température maximale dans le moule combinée à l'épaisseur de la pièce dans cette zone pourrait être un meilleur indicateur du temps de refroidissement.

Le modèle stationnaire présente toutefois l'avantage d'être résolu beaucoup plus rapidement que le modèle transitoire. Les temps d'optimisation pour le modèle stationnaire restent inférieurs à 3 minutes alors que l'optimisation en régime transitoire peut durer jusqu'à 4 heures pour 7 itérations (PC à 1,3GHz et 512Mo de RAM).

En conclusion, cet exemple nous a permis de montrer l'application de la méthode d'optimisation avec un objectif lié à l'évolution transitoire des températures de la pièce polymère. Les résultats obtenus sont logiques et dépendent de l'objectif recherché : il faut approcher les canaux de la cavité pour accélérer le refroidissement et au contraire les éloigner et augmenter la température du réfrigérant pour améliorer la répartition de température dans la pièce.

Les calculs transitoires sont très longs par rapport aux calculs stationnaires, mais les résultats obtenus grâce à ces derniers ne permettent pas de répondre de manière adaptée aux objectifs liée aux températures du polymère. Les optimisations stationnaires permettent de dégager les bonnes tendances d'évolution sans être aussi efficaces pour l'estimation de l'évolution de température des pièces.

Une modification des objectifs stationnaires prenant en compte l'épaisseur de pièce et la quantité de chaleur à évacuer dans les différentes zones de la pièce pourrait peut-être améliorer les résultats et éviter des longs calculs transitoires pour vraiment obtenir les optimums liés à la température de la pièce.

5.3 Comparaison à des mesures expérimentales

Pour valider le calcul thermique transitoire dans le cas de l'injection, des mesures expérimentales ont été effectuées sur un moule instrumenté en conditions de production. Les températures à la surface du moule mesurées au cours d'un cycle seront comparées aux températures simulées pour les mêmes conditions. La procédure d'optimisation a également été appliquée au moule utilisé pour ces essais. Les résultats obtenus avec les différentes géométries seront donc comparés expérimentalement et numériquement.

5.3.1 Essais expérimentaux

5.3.1.1 Dispositif expérimental

Presse d'injection Les essais d'injection sont réalisés au CROMeP sur une presse d'injection DK-Codim, de 175 tonnes de force de fermeture. L'installation expérimentale est représentée sur la figure 5.50. Une unité de commande informatisée permet de contrôler les paramètres du cycle d'injection et d'obtenir ainsi une bonne reproductibilité pour chaque type de pièce ou ensemble de paramètres.

Un système informatisé d'acquisition de données est connecté sur l'unité d'injection et sur le moule. Il permet de mesurer l'évolution des paramètres de mise en forme en temps réel, en particulier la force de fermeture du moule, la vitesse de rotation de la vis, sa position et la pression hydraulique appliquée à l'arrière de la vis.

Moule Le moule utilisé pour cette étude reprend la géométrie de celui utilisé pour la thèse de G. Saint Martin [163]. Le schéma général du moule est représenté sur la figure 5.51. Il comprend une carcasse dans laquelle on utilise des inserts permettant de mouler des pièces de formes variées.

Les inserts utilisés pour notre étude permettent d'injecter les pièces représentées sur la figure 5.52. La plaque a une épaisseur de 4mm, une longueur de 200mm et une largeur de 40mm. La forme générale des inserts utilisés est représentée sur la figure 5.53 et le plan détaillé est donné en annexe K.

Le matériau des inserts est un acier couramment utilisé pour réaliser les moules d'injection : acier 40CMD8S, dont la fiche technique est en annexe L et les propriétés thermiques sont reportées dans le tableau 5.12.

Polymère injecté Le polymère injecté est l'ABS NOVODUR® P2H-AT de Bayer, polymère amorphe, dont les propriétés thermiques sont également reportées dans le tableau 5.12 (voir aussi en annexe M).

Mesures de température La température est mesurée à la surface du moule à l'aide de capteurs de température Kistler® de type 6192A (voir annexe N). Quatre capteurs de type K sont disposés le long de la cavité comme indiqué sur la figure 5.53 et permettent de mesurer les températures en surface du moule. La température de réfrigérant à l'entrée ou à la sortie du moule est également contrôlée par thermocouple.

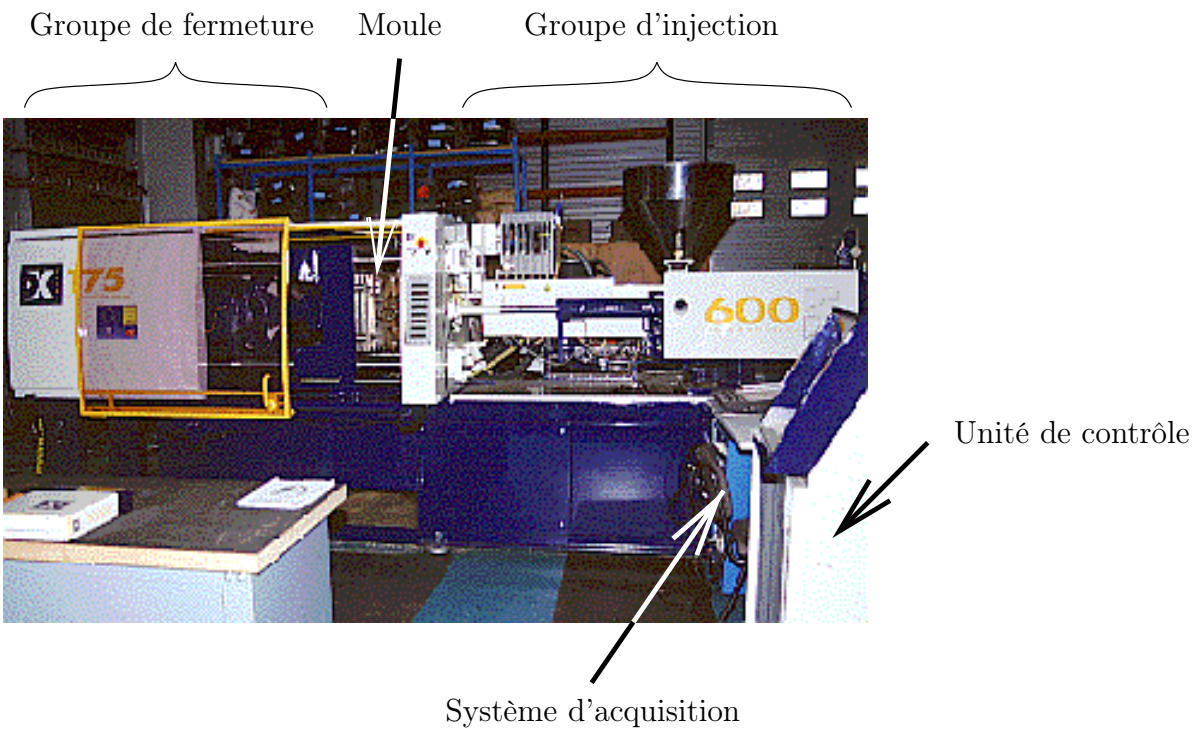


FIG. 5.50 – Presse à injecter

Matériau	**Masse volumique ρ [kg.m^{-3}]**	**Capacité calorifique massique C_P [J.kg^{-1}.K^{-1}]**	**Conductivité thermique λ [W.m^{-1}.K^{-1}]**
Polymère ABS	885	1800	0,13
Acier 40CMD8S	7800	460	34

TAB. 5.12 – Propriétés thermiques du polymère et du moule

Régulation thermique Deux fluides de régulation thermique ont été utilisée dans cette étude : de l'eau pour les faibles températures de refroidissement (30°C) et de l'huile silicone Marlotherm® (dont les propriétés en fonction de la température sont reportées en annexe O) pour celles plus élevées (50 °C). Les propriétés physiques de ces deux fluides aux températures utilisées sont résumées dans le tableau 5.13.

Fluide	**Masse volumique ρ [kg.m^{-3}]**	**Capacité calorifique massique C_P [J.kg^{-1}.K^{-1}]**	**Conductivité thermique λ [W.m^{-1}.K^{-1}]**	**Viscosité dynamique η [Pa.s]**
Eau à 30 °C	996	4180	0,63	$8{,}01.10^{-4}$
Huile à 50 °C	1038	1660	0,127	$1{,}27.10^{-2}$

TAB. 5.13 – Propriétés thermiques des fluides de refroidissement

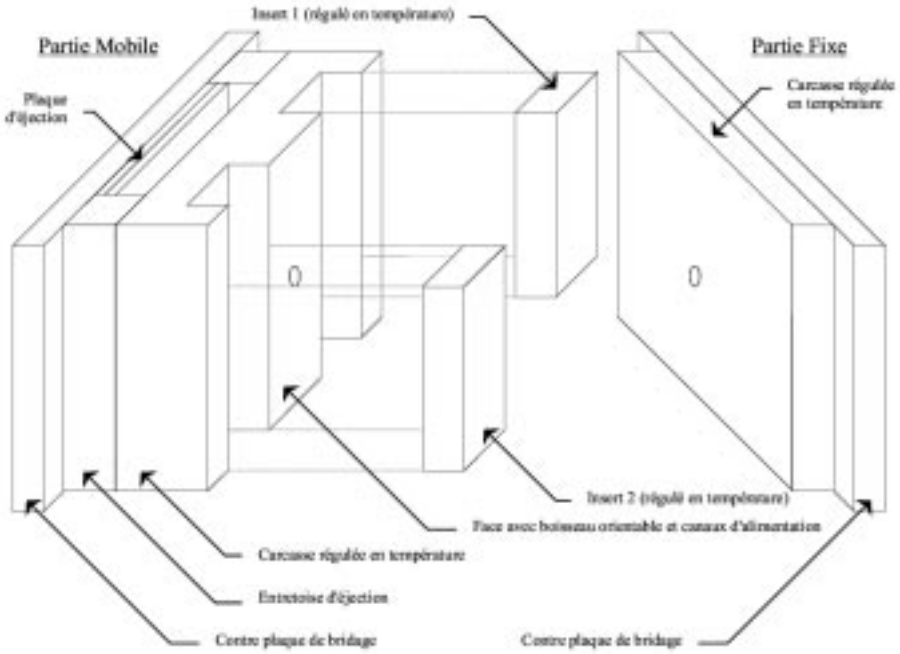


Fig. 5.51 – Schéma du moule et des inserts [163]

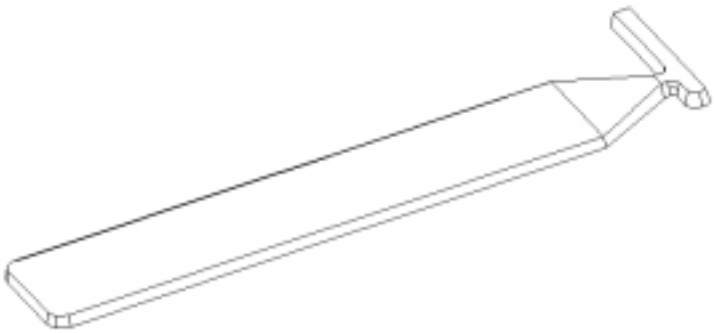


Fig. 5.52 – Schéma de la pièce injectée

La régulation thermique de l'outillage est effectuée au moyen d'unités du type Tool-Temp®. Une mise en pression du circuit de régulation est également effectuée afin d'améliorer l'échange thermique avec le moule. Dans le cas de l'eau, la température peut aller jusqu'à 90°C avec une mise sous pression jusqu'à 4bar. Pour l'huile, il est possible d'atteindre environ 230°C avec une pression de 5,5bar.

La régulation peut être basée soit sur la température mesurée par thermocouple dans le moule soit à partir de la température du fluide de refroidissement dans la réserve du régulateur. Le thermocouple dans le moule étant situé très en profondeur (près de la plaque d'éjection), il semble préférable de réguler par rapport à la température du réfrigérant. Il sera ainsi beaucoup plus facile de comparer les différents cas en ayant dans tous les cas la même température de fluide circulant dans le moule.

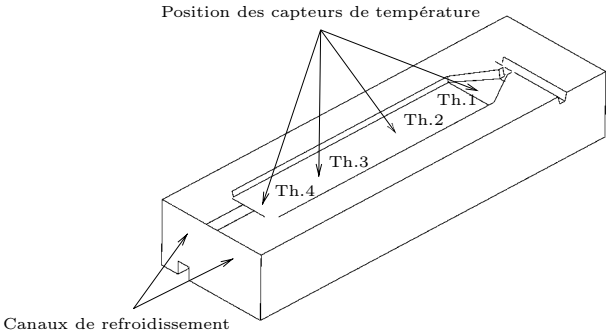


FIG. 5.53 – Schéma des inserts utilisés pour les essais

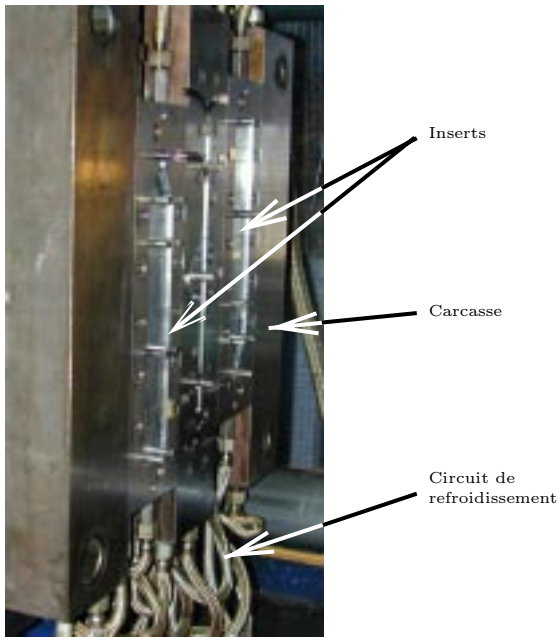


FIG. 5.54 – Détail des inserts dans la carcasse du moule

La carcasse et les inserts sont munis d'un réseau de canalisations destinées à la régulation thermique (voir figure 5.55). Cela assure une bonne homogénéité de température et une dynamique de régulation convenable pour les empreintes du moule. Chaque insert comporte deux canaux de régulation, comme indiqué sur la figure 5.53.

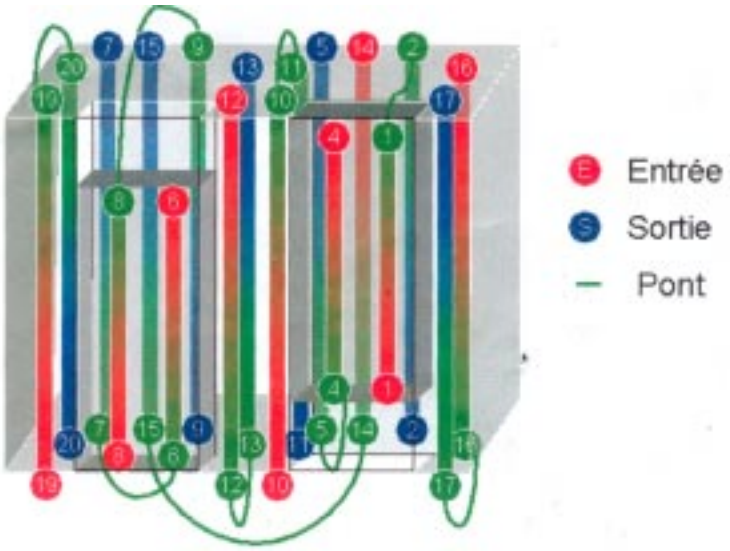


FIG. 5.55 – Schéma du circuit de régulation de la carcasse et des inserts (les canaux sont reliés dans l'ordre croissant de la numérotation)

Géométrie des canaux de régulation des différents inserts La géométrie originale correspond à l'insert déjà disponible au laboratoire. Les canaux de régulation ont été modifiés par une optimisation en régime stationnaire comme présenté précédemment. L'optimisation a été réalisée pour deux types d'inserts :

- un moule massif avec des canaux circulaires,
- un moule stratifié avec des canaux elliptiques.

La géométrie du problème permet de limiter le nombre de paramètres à 3 pour les canaux circulaires (les deux coordonnées de la position du centre et le rayon) et à 4 pour les ellipses (les deux coordonnées de la position du centre et les deux rayons).

Dans le cas des canaux circulaires, l'objectif est de diminuer la température moyenne à la surface de la cavité. Avec les canaux elliptiques, on cherchera à minimiser les écarts de température à la surface de la cavité par rapport à la température moyenne.

Les contraintes sont imposées par les limites de l'insert et par les différents perçages (passage des éjecteurs, des fixations du moule, des thermocouples...) présents tout le long de l'insert (voir le plan de l'insert original en annexe K). Les zones rendues inaccessibles par ces perçages sont représentées sur la figure 5.56. De plus on laisse un jeu de 1,5mm minimum entre les canaux et les différentes frontières du moule.

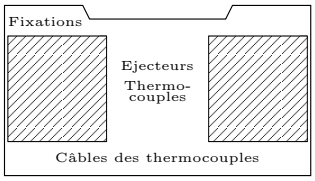


Fig. 5.56 – Emplacements possibles des canaux dans l'insert (régions hachurées)

La géométrie initiale et les géométries finales obtenues pour les deux inserts sont représentées sur la figure 5.57. Les résultats obtenus semblent assez logiques. Dans le cas de l'insert massif, pour diminuer la température en surface, on rapproche les canaux de la cavité. Pour au contraire uniformiser la température dans le cas des canaux elliptiques, on éloigne les canaux et on augmente leur taille.

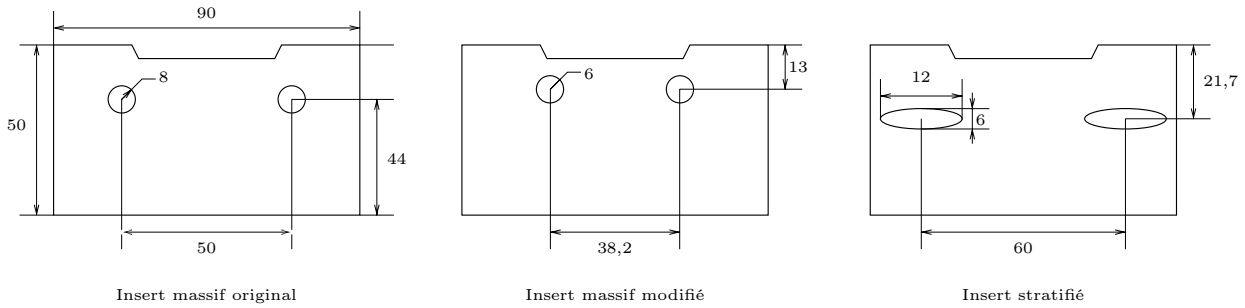


Fig. 5.57 – Positions et tailles des canaux des différents inserts utilisés

5.3.1.2 Résultats

Les essais sont réalisés en conditions de production. Le cycle est contrôlé automatiquement et la production ne nécessite pas d'intervention. Il est ainsi possible de conserver les mêmes réglages (temps d'ouverture, vitesse

d'injection, etc.) pour tous les essais correspondant à un même jeu de paramètres. Un exemple de mesures obtenues sur un cycle pour l'ABS sont représentées sur la figure 5.58.

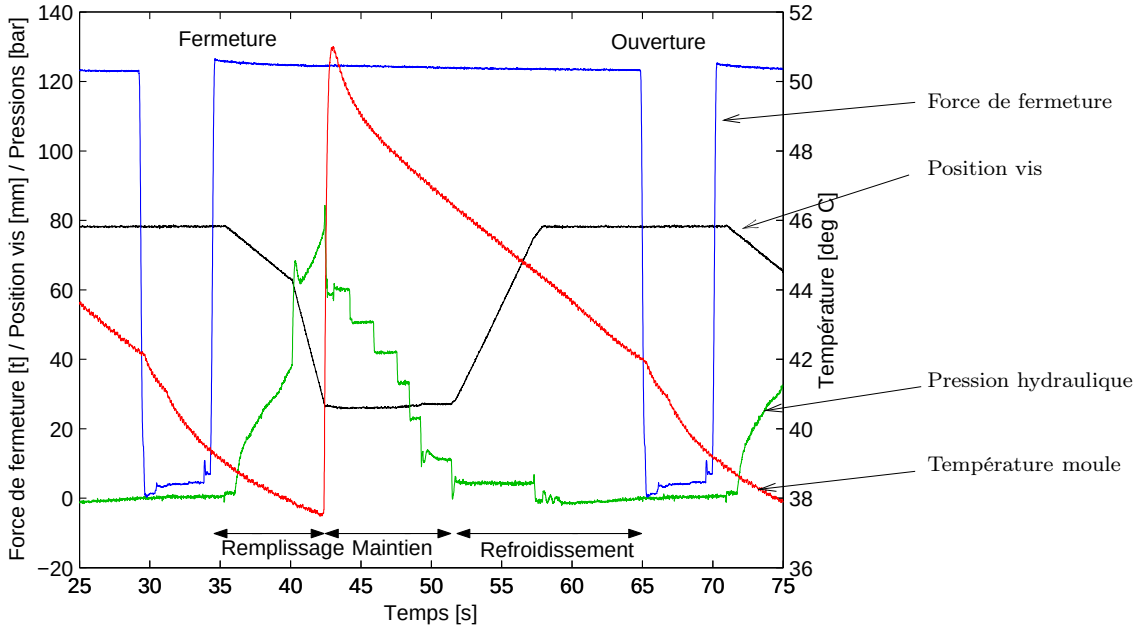


FIG. 5.58 – Différentes phases du cycle d'injection de la plaque ABS

La régulation thermique est mise en route et les essais débutent lorsque la température à la surface du moule est stabilisée (après 30 minutes à 1 heure selon la température). L'acquisition commence alors dès le premier cycle d'injection. Les essais sont stoppés lorsque la température dans le moule atteint un régime quasi-stationnaire, soit après au moins 50 cycles (quelques cycles sont réalisés à cette température). Lors des essais, la température de l'eau ou de l'huile entre l'entrée et la sortie du moule ne varie jamais de plus de 2°C.

5.3.1.3 Comparaison des températures en surface du moule selon l'insert utilisé

Les figures 5.59 et 5.60 représentent l'évolution de température mesurée par un des capteurs de température centraux (Th. 2 ou Th. 3) pour les différentes configurations lors d'un cycle quasi-stationnaire. Les mesures des deux thermocouples situés aux extrémités (Th. 1 et Th. 4) montrent des valeurs légèrement plus faibles. Les figures 5.61 et 5.62 représentent les dérivées temporelles de la température (vitesse de refroidissement) pour les différents cas.

Les différences de température selon les géométries de moule sont faibles (de l'ordre de 5°C). La géométrie originale est en effet assez bien conçue et l'optimisation n'a pas conduit à de grandes modifications pour cette géométrie simple.

Pour une même température de fluide, le moule modifié permet toutefois d'obtenir une température à la surface du moule plus proche de la température du fluide. On a donc un meilleur contrôle de la température en surface de la cavité. La vitesse de refroidissement avec cet insert est plus grande au début du refroidissement (2°C.s^{-1} au lieu de 1,5°C.s^{-1}) mais elle se stabilise plus vite (le transfert thermique est limité par la faible diffusivité du polymère).

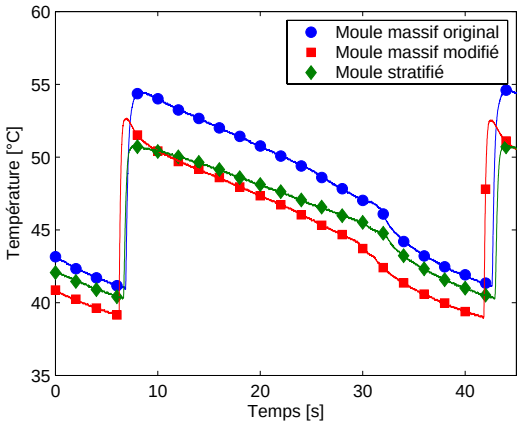


FIG. 5.59 – Comparaison des températures des inserts régulés par de l'eau à 30°C

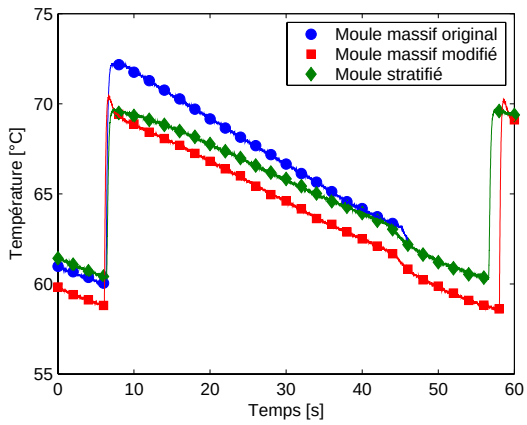


FIG. 5.60 – Comparaison des températures des inserts régulés par de l'huile à 50°C

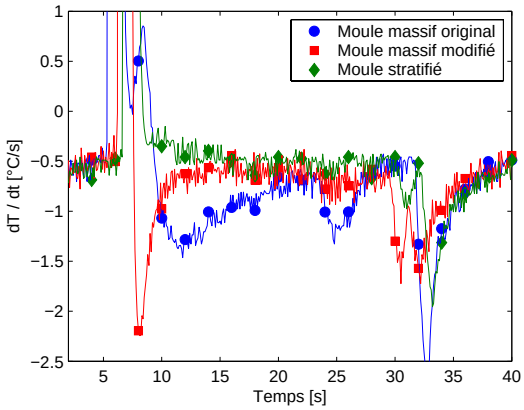


FIG. 5.61 – Vitesse de refroidissement des inserts régulés par de l'eau à 30°C

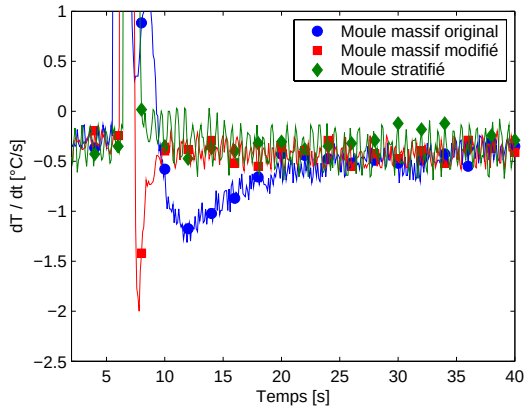


FIG. 5.62 – Vitesse de refroidissement des inserts régulés par de l'huile à 50°C

L'insert à canaux elliptiques permet d'obtenir une température de moule intermédiaire entre les deux inserts. La vitesse de refroidissement reste constante à 0,5°C.s^{-1} au cours du cycle. Le refroidissement en début de cycle est donc moins efficace qu'avec les deux autres inserts. L'amplitude de variation de la température est pourtant plus faible.

5.3.2 Calcul numérique

Le calcul est toujours effectué en deux dimensions, sur une section du moule (hypothèse de transfert thermique plan). Les températures obtenues seront comparées à celles mesurées sur l'un des deux capteurs de température centraux dont la mesure n'est pas perturbée par les échanges aux extrémités de l'insert.

5.3.2.1 Mise en données

Géométrie Le problème comporte deux domaines pour représenter le moule : l'insert d'un côté et la plaque fixe de l'autre (voir figure 5.63). Le reste de la carcasse du moule et de la presse est négligé. Le polymère est divisé en dix zones de forme carrée (sauf aux extrémités) en contact parfait pour éviter d'avoir des zones présentant un fort rapport de forme et pour d'autre part accélérer le calcul.

Le maillage du moule est assez grossier sauf sur la surface en contact avec le polymère (figure 5.64). La pièce est maillée plus finement. Chacun des dix domaines comporte 2 éléments sur chaque face et au moins 25 points internes (figure 5.65). Au total, le moule compte 160 éléments linéaires discontinus et 204 points internes. La pièce comporte 80 éléments linéaires discontinus et 254 points internes.

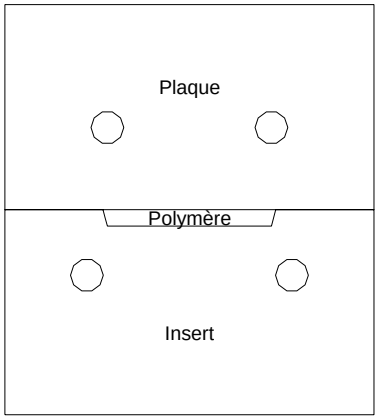


FIG. 5.63 – Domaines utilisés pour le calcul

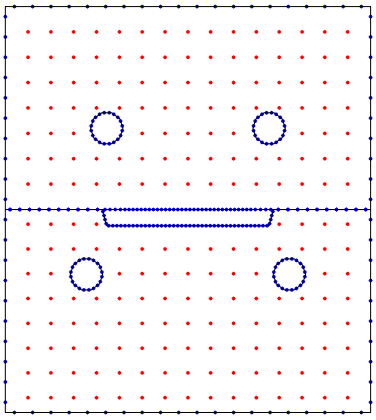


FIG. 5.64 – Maillage du moule

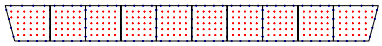


FIG. 5.65 – Maillage de la pièce

Modèle Le modèle de calcul utilisé est celui décrit dans le chapitre 2 avec les valeurs numériques suivantes. Les propriétés des matériaux (moule et polymère) sont rapportées dans le tableau 5.12 et les propriétés des fluides de refroidissement sont résumées dans le tableau 5.13.

On utilise un pas de temps de 0,5s et une fonction radiale linéaire pour les calculs. Le temps de cycle est de 35s à 30°C et 50s à 50°C. Pour obtenir un cycle quasi-stationnaire, on simule 20 cycles consécutifs lorsque le moule est à 30°C et 25 cycles à lorsqu'il est à 50°C. Le temps de calcul total est d'environ 1h30 à 2h (PC à 1,3GHz et 512Mo de RAM).

Estimation des pertes de charges Le débit de fluide dans le circuit de refroidissement n'est pas directement mesuré expérimentalement. La puissance de la pompe du régulateur étant connue (en supposant une efficacité parfaite), un calcul de pertes de charges dans le circuit permet de remonter à une estimation du débit. Les pertes de charges dans un tube circulaire droit s'écrivent :

$$\Delta P_F = \zeta \frac{L_C}{D_C} \frac{\rho v^2}{2} \tag{5.11}$$

Le coefficient de frottement ζ est égal à $\frac{64}{Re}$ pour un écoulement laminaire et vérifie l'équation suivante pour un écoulement turbulent : $\frac{1}{\sqrt{\zeta}} = 2\log(Re\sqrt{\zeta}) - 0,8$ [63]. Cette équation peut être approchée par la relation :

$$\zeta = 0.316 Re^{-0.25} \text{ pour } Re < 2.10^4 \tag{5.12}$$

En combinant les équations (5.11) et (5.12), on peut exprimer le débit en fonction de la perte de charges :

$$D_F = \left(\frac{\Delta P_F}{0,316 \times 4^{-0,25} \times 8 \rho_F^{0,75} \pi^{-1,75} \mu_F^{0,25} L_C D_C^{-4,75}} \right)^{\frac{1}{1,75}} \tag{5.13}$$

Ce calcul très approché permet d'avoir seulement une estimation du débit. Dans notre circuit, on considère deux sections : une de longueur totale de 20m et de diamètre 20mm et une de longueur 10m et de diamètre 8mm.

Dans ces conditions, pour de l'eau, le débit obtenu est de l'ordre de 2.10^{-4} $m^3.s^{-1}$. Pour de l'huile à 50°C, le débit est de l'ordre de 4.10^{-4} $m^3.s^{-1}$ (la pompe du régulateur utilisé est plus puissante). Ce calcul reste très approché mais permet d'obtenir une estimation du débit afin d'avoir un ordre de grandeur du coefficient d'échange dans les canaux en fonction de leur rayon.

Conditions initiales Le système de dosage et la régulation thermique de la vis par le fourreau sont réglés de manière à obtenir une température d'injection du polymère autour de 230°C pour l'ABS. Il n'est toutefois pas possible sur cette presse de vérifier la température du polymère au moment de l'injection.

5.3.2.2 Comparaison des températures dans le cas du moule massif régulé à 30°C

La figure 5.66 représente les évolutions des températures simulées et mesurées sur le thermocouple 3, lors d'un cycle quasi-stationnaire, avec l'insert massif original régulé à 30°C. On observe un écart de température presque constant pendant tout le refroidissement, jusqu'à l'ouverture du moule vers 620s (voir figure 5.67).

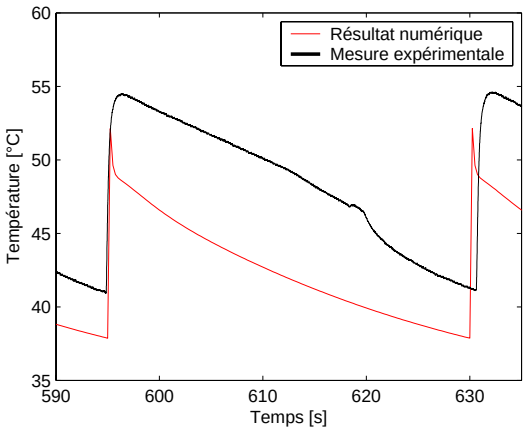


FIG. 5.66 – Comparaison des températures de moule simulée et mesurée (Insert massif original à 30°C)

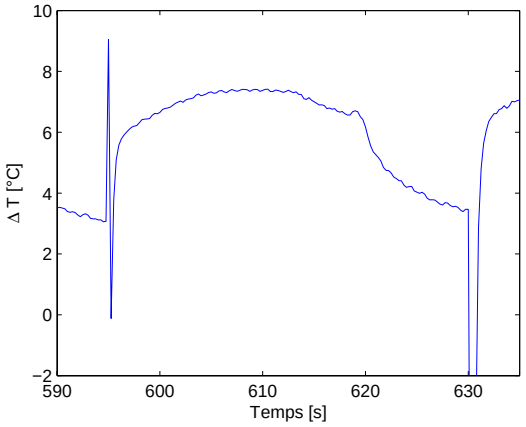


FIG. 5.67 – Évolution de l'écart entre les températures mesurées et simulées

La température du moule simulée se stabilise donc à une température en moyenne plus faible que celle mesurée, alors que pendant un cycle l'évolution de température est conforme à l'expérience. Pour tenter d'améliorer les résultats, l'effet de quelques paramètres mal connus expérimentalement va être étudié : l'effet des perçages du moule, de la température initiale du polymère, de la résistance thermique moule/polymère et de la résistance thermique entre les strates (pour les moules stratifiés).

5.3.2.3 Étude de l'effet du perçage du thermocouple

La mise en place des capteurs de température en surface nécessite un perçage de l'insert. Dans la section contenant le thermocouple, les transferts de chaleur sont donc probablement perturbés. Pour estimer cet effet, on réalise les calculs sur une géométrie modifiée de l'insert représentée sur la figure 5.68.

L'effet du perçage sur l'évolution de température à la surface du moule est présenté sur la figure 5.69 dans le cas de l'injection dans le moule massif original régulé à 30°C. La prise en compte du perçage conduit à un refroidissement moins rapide de la surface du moule et donc à une température globalement plus élevée se

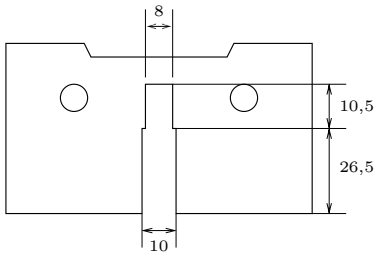


FIG. 5.68 – Géométrie modifiée pour prendre en compte le perçage du thermocouple

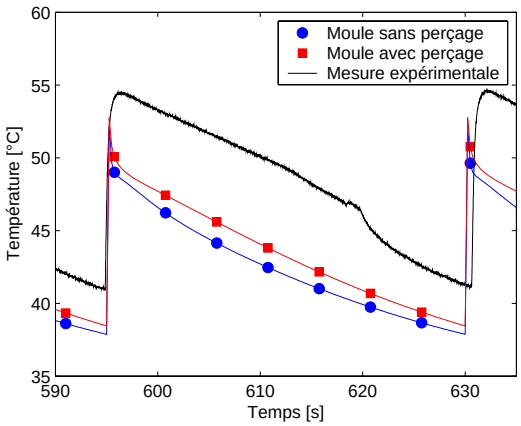


FIG. 5.69 – Comparaison de l'évolution de la température du moule en fonction du perçage du moule

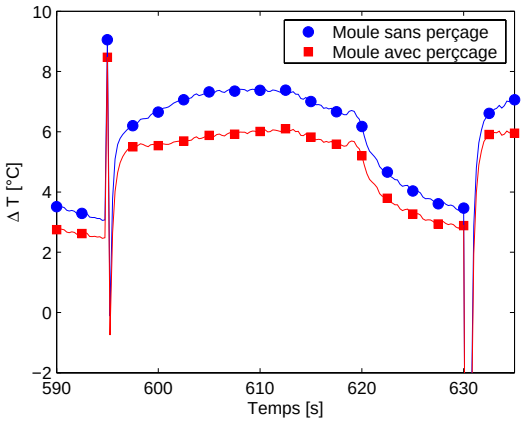


FIG. 5.70 – Évolution de l'écart entre les températures mesurées et simulées en fonction du perçage du moule

rapprochant de la mesure expérimentale (figure 5.70). La différence de température entre les deux cas reste toutefois inférieure à 2°C. La vitesse de refroidissement est plus régulière dans le cas où l'on considère le perçage, ce qui semble plus conforme à la mesure expérimentale. La géométrie modifiée avec le perçage est donc conservée pour la suite des comparaisons.

5.3.2.4 Étude de l'effet de la température initiale du polymère

La température du polymère à la fin du remplissage est considérée uniforme, égale à la température d'injection supposée. La valeur de la température n'est pas contrôlée directement et n'est pas vérifiée pendant les essais. De plus, on néglige toutes les variations de température du polymère pendant le remplissage. Pour estimer l'effet de la température initiale du polymère, trois calculs sont réalisés avec des températures initiales de 230, 240 et 250°C. Les évolutions de la température de moule obtenues sont reportées sur la figure 5.71.

Une température de polymère plus élevée entraîne logiquement une température de moule plus grande et l'effet est quasiment linéaire. L'augmentation est plus importante au début du refroidissement mais est atténuée à la fin du refroidissement. Utiliser une température initiale de polymère plus élevée permet donc de se rapprocher de la température mesurée (figure 5.72), mais il est difficile de vérifier expérimentalement cette hypothèse. On peut toutefois supposer que l'échauffement pendant l'écoulement est faible car la pièce est épaisse (4mm). Une température initiale de 230°C est donc conservée pour la suite des comparaisons.

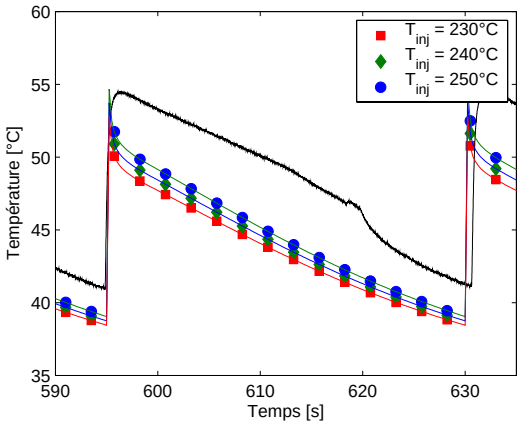


FIG. 5.71 – Comparaison de l'évolution de la température du moule en fonction de la température initiale du polymère

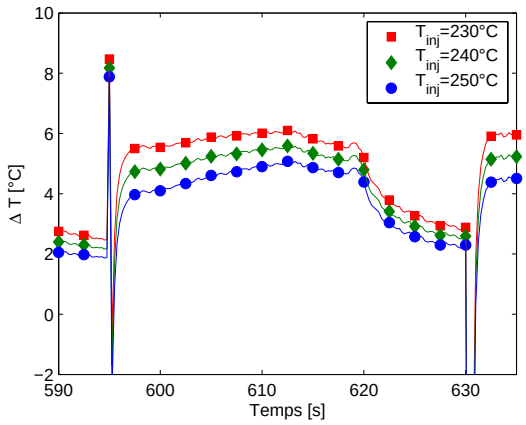


FIG. 5.72 – Évolution de l'écart entre les températures mesurées et simulées en fonction de la température initiale du polymère

5.3.2.5 Étude de l'effet de la résistance thermique de contact entre le moule et le polymère

La résistance thermique de contact imposée au niveau de l'interface entre le moule et le polymère est inconnue. Pour estimer son effet, on fait varier cette valeur entre 10^{-5}m^2.K.W^{-1} et 10^{-3}m^2.K.W^{-1}. Les évolutions correspondantes de la température sont représentées sur la figure 5.73 et l'écart par rapport à la mesure expérimentale est indiquée sur la figure 5.74.

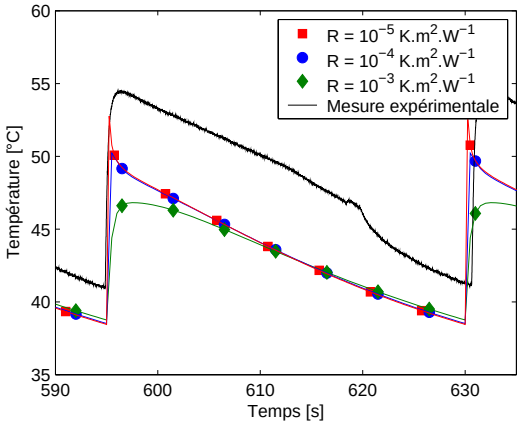


FIG. 5.73 – Comparaison de l'évolution de la température du moule en fonction de la résistance thermique de contact imposée sur l'interface moule/polymère

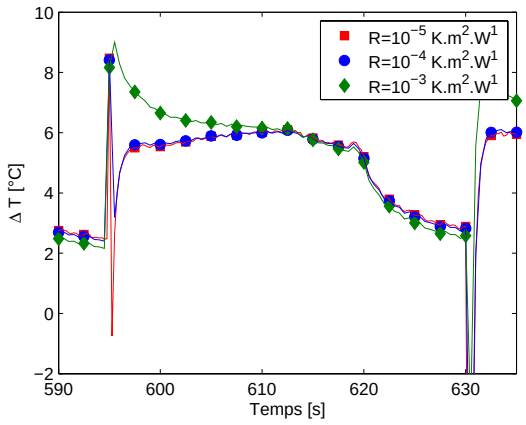


FIG. 5.74 – Évolution de l'écart entre les températures mesurées et simulées en fonction de la résistance thermique de contact imposée sur l'interface moule/polymère

La résistance thermique a surtout une influence sur le pic de température lors des premiers instants du refroidissement. Plus la résistance est faible et plus le choc thermique est important. La température du moule présente donc une plus forte augmentation. Au contraire, si la résistance est plus grande, le pic de température s'atténue et on se rapproche de la forme obtenue expérimentalement. Toutefois, le temps de réaction du thermocouple est inconnu et le dispositif expérimental ne permet peut être pas de mesurer des variations de températures très rapides.

Dans tous les cas, les valeurs de température retrouvent la même valeur après environ 10s de refroidissement. La résistance thermique de contact ne semble donc pas avoir d'influence sur les valeurs globales de températures mais uniquement sur la forme du pic de température lors des premières secondes du cycle. Pour la suite des comparaisons, nous conserverons donc une valeur de résistance thermique de 10^{-5}m^2.K.W^{-1}.

5.3.2.6 Étude de l'influence de la stratification

L'assemblage des strates est réalisé par brasage. Le matériau de brasage est un alliage argent-cuivre dont la conductivité est environ 415W.m^{-1}.K^{-1}. L'épaisseur de brasure est assez irrégulière selon les interfaces. L'épaisseur maximale de la brasure est 10μm. Les plaques d'acier ont une épaisseur de 6mm (sauf les deux plaques extrêmes). Selon le modèle présenté dans le chapitre 2, la résistance d'interface estimée est donc $\mathcal{R} = \frac{e}{\lambda} = 2.10^{-8}$K.m^2.W^{-1}.

Pour estimer l'effet de l'assemblage sur le moule stratifié, le calcul est réalisé sur un moule stratifié représenté sur la figure 5.75. L'insert est divisé en 14 domaines en contact réel. La plaque et le polymère restent inchangés.

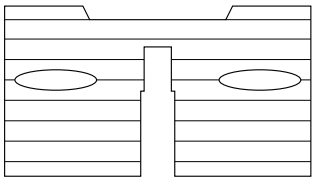


FIG. 5.75 – Division de l'insert en strates

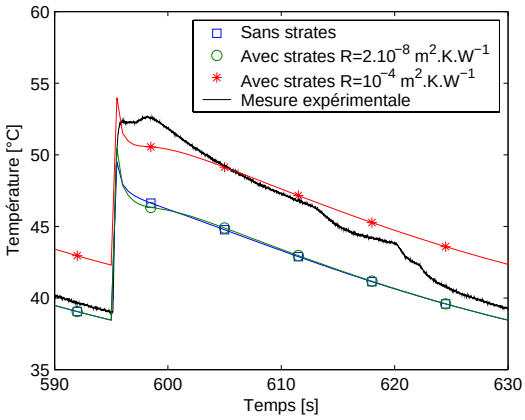


FIG. 5.76 – Comparaison de l'évolution de la température du moule en fonction de la stratification du moule

Lorsque la résistance est faible comme dans notre cas, l'évolution de température (représentées sur la figure 5.76) est quasiment identique à celle obtenue avec un insert massif. On observe une oscillation plus importante de la température au début du cycle, mais le domaine comporte un nombre de points internes plus faibles. Le choc thermique à la surface est donc mal représenté, ce qui explique la plus grande amplitude d'oscillation.

Si, au contraire, on avait considéré un moule collé, la résistance thermique aux interfaces aurait été plus élevée (de l'ordre de 10^{-4}K.m^2.W^{-1}. Dans ce cas, l'influence sur l'évolution de la température du moule est beaucoup plus visible.

Une résistance thermique de contact plus élevée entre les strates permet de se rapprocher de la mesure expérimentale mais cette hypothèse n'est pas du tout réaliste dans le cas d'un moule brasé. Avec une résistance faible, le découpage en strates n'a pas d'influence donc, pour faciliter la mise en données, le découpage en strates n'est pas nécessaire.

5.3.2.7 Comparaison des températures du moule

Les évolutions de température numériques et expérimentales obtenues pour les différents inserts régulés à 30 et 50°C sont représentées sur les figures 5.77 à 5.82. Toutes les courbes présentent l'évolution de température lors d'un cycle quasi-stationnaire.

Dans tous les cas, la température simulée est inférieure à la température mesurée. L'écart maximal est de l'ordre de 5 à 6°C. Toutefois l'évolution de température semble conforme à la mesure expérimentale jusqu'à l'ouverture du moule.

La différence de température peut s'expliquer de plusieurs façons :
- le modèle numérique néglige la phase de remplissage. Or celle-ci est assez longue et le remplissage du moule n'est pas instantané. Le remplissage peut donc conduire à une petite période de temps (jusqu'à plusieurs secondes) pendant laquelle le polymère en contact avec le thermocouple ne se refroidit pas.
- la température du polymère lors de l'injection est mal connue. Même si les phénomènes d'échauffement lors de l'écoulement du polymère peuvent être négligés dans ce cas, la température réelle du polymère à la sortie de la vis d'injection est inconnue.
- l'écoulement dans les canaux de refroidissement est mal connu. Le coefficient d'échange est estimé très grossièrement dans notre modèle. Une meilleure connaissance du débit et de l'écoulement pourrait permettre, par des mesures, d'affiner la valeur utilisée.
- les échanges du moule avec l'extérieur ont été totalement négligés dans le modèle numérique, en particulier pendant la phase où le moule est ouvert.

La modification du modèle pour prendre en compte une phase de remplissage et la phase d'ouverture du moule devrait donc permettre d'améliorer ces résultats.

5.3.2.8 Comparaison des géométries d'inserts

Les évolutions de température comparées selon les différents inserts sont représentées sur les figures 5.83 et 5.84. On retrouve bien les mêmes tendances qu'avec les mesures expérimentales (figures 5.59 et 5.60) : l'insert massif modifié permet d'obtenir des températures plus faibles que l'insert original mais avec globalement la même évolution. L'insert stratifié conduit à une température intermédiaire à 30°C avec une vitesse de refroidissement plus faible. A 50°C, la température obtenue avec le moule stratifié est plus élevée.

La géométrie du moule a été optimisée de manière à diminuer la température moyenne à la surface du moule, ce qui devrait se traduire par des temps de refroidissement plus faibles. Les mesures expérimentales ne nous donnent pas accès à la température du polymère mais uniquement à la température en surface du moule. Pour estimer l'effet de la géométrie sur la température de la pièce, nous utiliserons donc les températures obtenues par simulation numérique. Elles permettent en particulier de déterminer un temps de refroidissement théorique et les répartitions de température dans la pièce au moment de l'éjection théorique (pour les comparer en fonction des géométries de moule).

La température d'éjection conseillée est de 80°C. On cherche, à partir des résultats numériques, le temps au bout duquel la température dans la pièce est inférieure partout à la température d'éjection. La température la plus chaude de la pièce se situe toujours au centre de la pièce. Les temps de refroidissement obtenus sont rassemblés dans le tableau 5.14.

Le moule massif modifié permet d'obtenir des temps de refroidissement plus courts que le moule original. La pièce ne présentant pas de difficultés particulières pour le refroidissement à part sa grande épaisseur, la diminution reste toutefois faible (de 1 à 2 secondes). Les canaux de refroidissement situés sur la carcasse n'ont pas été modifiés. Une amélioration plus grande aurait pu être obtenue en les incluant dans l'optimisation. Le moule stratifié qui n'a pas été optimisé pour le même objectif ne permet pas de réduire le temps de refroidissement.

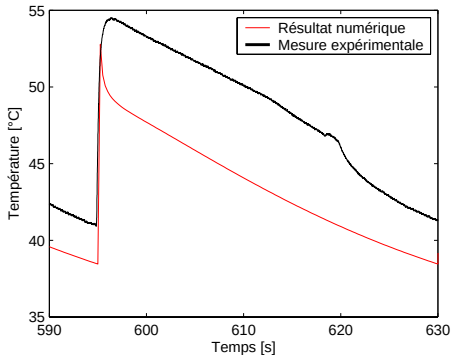


FIG. 5.77 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule massif original (30°C)

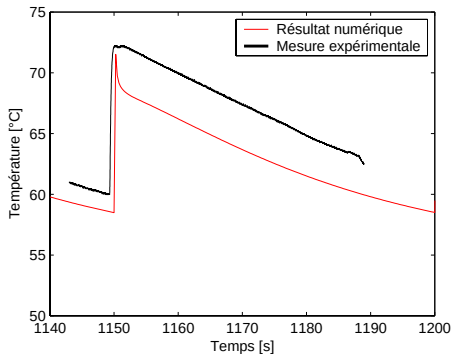


FIG. 5.78 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule massif original (50°C)

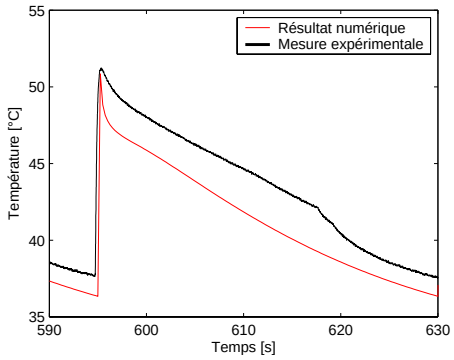


FIG. 5.79 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule massif modifié (30°C)

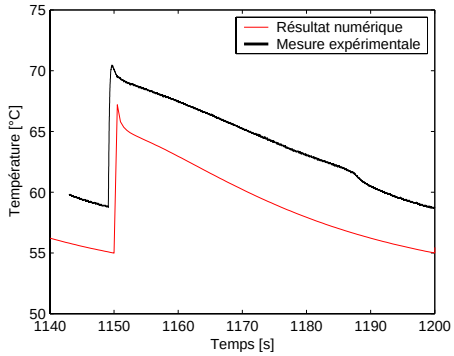


FIG. 5.80 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule massif modifié (50°C)

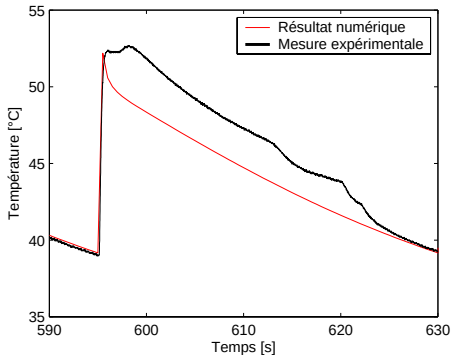


FIG. 5.81 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule stratifié (30°C)

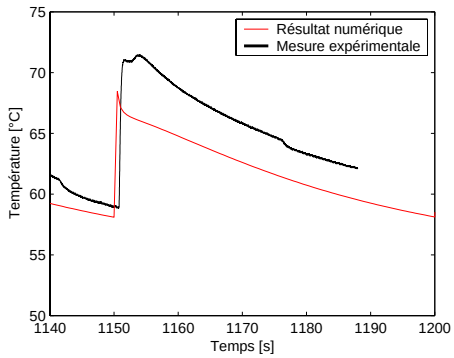


FIG. 5.82 – Comparaison des températures expérimentale et numérique à la surface du moule stratifié (50°C)

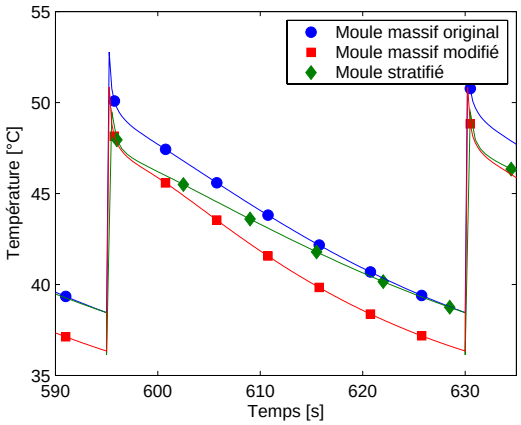


FIG. 5.83 – Comparaison des températures des inserts régulés par de l'eau à 30°C

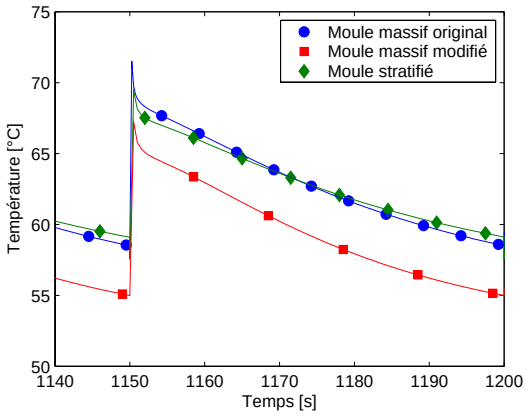


FIG. 5.84 – Comparaison des températures des inserts régulés par de l'huile à 50°C

Température du Moule	Massif original	Massif modifié	Stratifié
30°C	33,9s	33,5s	33,9s
50°C	43,1s	41,9s	44s

TAB. 5.14 – Temps de refroidissement calculés selon le moule utilisé

Les figures 5.85 et 5.86 représentent la température sur la face inférieure de la cavité après 10s de refroidissement pour les différents inserts. On constate ici que dans le cas de l'insert stratifié régulé à 30°C, l'amplitude de variation est légèrement plus faible que pour les autres inserts. Toutefois, comme expliqué précédemment, la pièce étant simple, l'amélioration est très faible. Pour les inserts régulés à 50°C, l'amélioration est encore plus faible. L'optimisation ayant été réalisée avec de l'eau à 30 °C, il est probable que l'optimum dans le cas de l'huile à 50°C soit différent. En effet, la taille de l'ellipse a une influence importante sur l'écoulement de l'huile qui est plus visqueuse que l'eau.

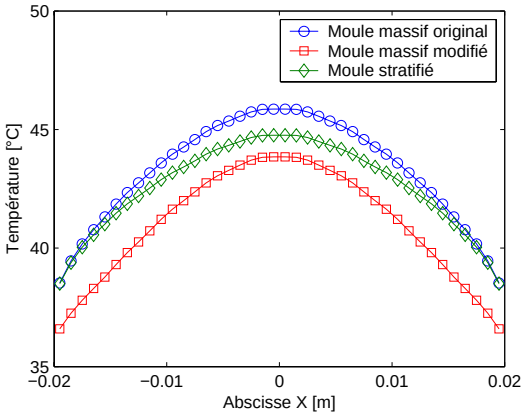


FIG. 5.85 – Répartition de la température à la surface du moule régulé à 30°C après 10s de refroidissement

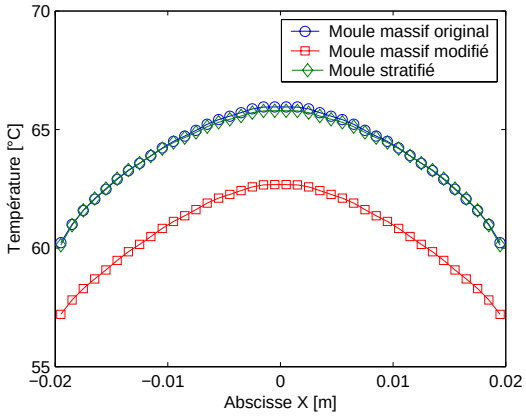


FIG. 5.86 – Répartition de la température à la surface du moule régulé à 50°C après 10s de refroidissement

En conclusion, la comparaison des résultats de simulation aux mesures expérimentales montre un assez bon accord. Les écarts constatés sont de l'ordre de 5°C maximum mais ils pourraient sans doute être diminués en améliorant le modèle pour prendre en compte plus fidèlement le cycle d'injection.

L'optimisation appliquée à ce moule simple permet effectivement de réduire le temps de refroidissement. Pour mieux valider le modèle d'optimisation expérimentalement, il serait toutefois préférable de l'appliquer à une géométrie plus complexe présentant des zones difficiles à refroidir.

Conclusion

La procédure d'optimisation a été appliquée à des exemples stationnaires et transitoires. Le premier exemple a permis de retrouver des tendances semblables à celles obtenues dans la littérature. Le deuxième exemple présente en plus une optimisation transitoire totalement réalisée par éléments frontières en 2D.

Ces exemples ont permis de montrer l'importance du modèle (par exemple le choix du coefficient d'échange) et de l'objectif sur les résultats. La prise en compte des contraintes a également été étudiée. Les résultats montrent que la méthode d'optimisation est plus adaptée aux contraintes linéaires qu'aux contraintes non linéaires mais ces dernières sont plus simples à mettre en œuvre pour des géométries complexes.

Le problème des minimums locaux a également été abordé. La méthode d'optimisation choisie est peu fiable lorsque la fonction présente plusieurs optimums. La seule solution (autre que de changer de méthode) pour essayer de trouver l'optimum global consiste à répéter la procédure avec plusieurs points initiaux.

Enfin, la comparaison des résultats de simulation avec des mesures expérimentales sur une géométrie simple a montré des résultats encourageants (avec une différence maximale de température en surface du moule de l'ordre de 5°C). Une amélioration de leur précision pourrait sans doute être obtenue en modifiant les modèles thermiques utilisés.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion

La phase de conception des moules d'injection est particulièrement importante pour la production en grande série de pièces injectées de qualité avec un temps de cycle le plus court possible. Dans ce travail, nous nous sommes plus particulièrement intéressés à l'optimisation de la régulation thermique des moules. L'objectif de la thèse était donc de disposer d'un outil de simulation des transferts thermiques lors de l'injection et de l'utiliser pour mettre en place une procédure d'optimisation de la géométrie du système de refroidissement.

L'application actuelle permet l'optimisation de la géométrie des canaux de refroidissement sur des sections 2D du moule. Cette optimisation peut être basée sur un calcul stationnaire ou transitoire, plus long mais plus réaliste, des transferts thermiques lors de l'injection. Elle permet de déterminer les valeurs optimales de la taille et de la position des canaux de refroidissement dans le moule mais également des paramètres de la régulation thermique comme la température du réfrigérant.

Une étude bibliographique a permis de faire un bilan des modèles thermiques relatifs à l'injection plastique disponibles dans la littérature. Cette analyse a permis d'établir les équations des problèmes de transfert thermique stationnaire et transitoire lors du refroidissement. Le modèle stationnaire permet de déterminer les performances d'un moule lors d'un cycle quasi-stationnaire. Le modèle transitoire permet au contraire d'évaluer les évolutions de température dans le moule et le polymère au fur et à mesure des cycles d'injection. Des hypothèses simplificatrices sur les comportements thermiques des matériaux, les phénomènes de transfert par convection à la surface des canaux et les échanges à l'interface moule/polymère ont permis de se ramener à la résolution de problèmes thermiques linéaires. La comparaison des résultats numériques aux mesures expérimentales fait apparaître un écart d'environ 5°C sur les températures en surface du moule. Les évolutions de température simulées pourraient être plus précises en modifiant certaines hypothèses simplificatrices des modèles, comme la prise en compte du remplissage ou des sources de chaleur dues à la solidification du polymère. Ces modèles simplifiés permettent néanmoins de retrouver les mêmes effets de la géométrie des canaux de refroidissement ou de la température de régulation.

La résolution des problèmes thermiques par la méthode des éléments frontières, associée à la méthode de la réciprocité duale pour la résolution des problèmes transitoires, a été programmée dans l'environnement Matlab® de manière à permettre un couplage facile avec une méthode d'optimisation. La géométrie du moule a donc été paramétrée pour permettre un remaillage automatique en fonction des paramètres d'optimisation géométriques. La méthode de calcul stationnaire a montré une bonne précision des résultats sur les frontières du domaine même pour un maillage grossier de la frontière. Ce résultat est intéressant pour une application en optimisation pour laquelle seuls les résultats sur la frontière sont utilisés. Il est alors possible de réaliser très rapidement un grand nombre de calculs pour des géométries différentes.

La méthode de la réciprocité duale multi-domaines a été utilisée avec succès pour simuler les transferts thermiques transitoires couplés dans le moule et le polymère, alors que jusqu'ici elle n'avait été appliquée que dans le moule. Toutefois, cette méthode est plus délicate à mettre en place pour résoudre les problèmes tran-

sitoires. Des maillages plus fins et des points internes en nombre suffisant sont nécessaires pour obtenir une convergence du calcul et une bonne précision, ce qui se traduit par des temps de calcul beaucoup plus longs. Des problèmes surgissent également lors du choix des paramètres de résolution, comme le pas de temps ou les fonctions d'interpolation radiale. Selon la géométrie et les propriétés thermiques des matériaux, des ajustements peuvent s'avérer nécessaires. Cette méthode conserve toutefois l'avantage d'un remaillage simplifié par rapport à une méthode par éléments finis.

Le couplage avec la méthode d'optimisation a nécessité la définition des objectifs, des paramètres et des contraintes liées au procédé d'injection. Des objectifs influant sur le temps de refroidissement et les répartitions de température dans la pièce et le moule ont donc été retenus. La prise en compte des contraintes géométriques est assez délicate. Des contraintes linéaires permettent une optimisation plus rapide et fiable mais imposent des restrictions importantes sur les solutions possibles. Au contraire, des contraintes non linéaires sont plus faciles à définir et permettent plus de liberté sur les paramètres mais la méthode d'optimisation est alors moins efficace et conduit à un nombre d'itérations plus grand et des résultats moins fiables. Enfin, deux méthodes d'analyse de sensibilité ont été intégrées. La méthode par différences finies, même si elle est un peu moins précise, s'est montrée plus rapide que la méthode par différentiation pour des problèmes présentant un grand nombre d'éléments.

Les premières applications de la procédure ont permis de retrouver des résultats de la littérature pour les problèmes stationnaires et de réaliser des optimisations transitoires semblables à celles de la littérature (mais utilisant la méthode des éléments finis). Bien que plus longue, l'optimisation peut alors être basée directement sur les évolutions de température de la pièce.

Perspectives

Cette étude a constitué une première approche du problème et de nombreux axes d'évolution sont possibles pour poursuivre ce travail, en particulier, sur la modélisation des transferts thermiques lors de l'injection, la méthode de résolution par la méthode des éléments frontières ou encore sur l'optimisation.

Modélisation

En ce qui concerne la modélisation transitoire des transferts thermiques lors de l'injection, il est certain que les modèles proposés ici peuvent être améliorés. On pourrait en particulier envisager de mesurer expérimentalement la valeur de la résistance thermique de contact entre le moule et le polymère lors de l'injection. Les valeurs mesurées pourraient alors être utilisées numériquement. D'autre part, l'utilisation de Moldflow®, par exemple, pourrait être envisagée pour déterminer la distribution de température dans la pièce à la fin du remplissage et utiliser cette donnée comme condition initiale du calcul thermique. Enfin, le retrait pourrait également être calculé, dans un premier temps de manière analytique en considérant les variations de température dans l'épaisseur de la pièce de manière à remonter au retrait et aux variations de la résistance thermique de contact due à la lame d'air entre le moule et le polymère. Un calcul thermo-mécanique complet dans le moule et le polymère pourrait enfin être envisagé pour prendre en compte le plus fidèlement possible les variations de volume de la pièce et les évolutions du contact entre le moule et le polymère.

L'utilisation de propriétés thermiques variables, en particulier pour le polymère, pourrait permettre d'affiner également la modélisation. Plus particulièrement, la prise en compte des sources de chaleur dues à la solidification et à la cristallisation éventuelle aurait certainement de l'influence sur l'évolution de température dans la pièce. La prise en compte de ces hypothèses nécessiterait l'adaptation du logiciel pour résoudre des problèmes non linéaires et prendre en compte ces sources de chaleur aux points internes.

Enfin, la prise en compte de la convection à la surface des canaux de refroidissement pourrait également être améliorée par un calcul d'écoulement dans les canaux de refroidissement dans le cas d'un calcul 3D. Le calcul thermique couplé pourrait alors permettre de prendre en compte les variations de température le long du circuit mais surtout les variations des transferts de chaleur selon l'écoulement plus précisément qu'avec les corrélations utilisées.

Résolution numérique

L'évolution à une résolution 3D semble nécessaire pour une véritable application industrielle de l'optimisation afin de pouvoir gérer des géométries complexes. Le passage à une dimension supplémentaire pour le calcul stationnaire semble assez simple à réaliser, puisque les solutions fondamentales du problème sont connues. Dans le cas d'une résolution transitoire, l'application de la méthode de la réciprocité duale pourrait être plus délicate, notamment pour le choix des points d'intégration à l'intérieur du domaine. Dans les deux cas, on doit toutefois s'attendre à des temps de calcul longs du fait de l'assemblage des matrices pleines.

Pour le couplage avec une méthode d'optimisation, le passage en 3D nécessitera également le remaillage automatique des surfaces. Même s'il est plus simple qu'un remaillage complet du volume, il est nécessaire de disposer d'un outil de maillage de surfaces d'une géométrie 3D à partir de paramètres géométriques.

Optimisation

La méthode d'optimisation utilisée (SQP) s'est montrée efficace pour les cas simples traités en prenant quelques précautions, en particulier pour les choix des paramètres initiaux. Toutefois, dans le cas d'une application à problème industriel, éventuellement en 3D, comportant de nombreux paramètres et probablement des contraintes non linéaires dues à la géométrie complexe, la probabilité d'obtenir un optimum global est plus faible.

Le choix d'une méthode d'optimisation est alors difficile car elle doit pouvoir garantir l'obtention d'un optimum global mais avec un nombre de calculs limités. L'utilisation de méthodes hybrides combinant une méthode aléatoire, comme les algorithmes génétiques, pour s'approcher de l'optimum et une méthode mathématique pour affiner le résultat semble la plus appropriée dans ce cas.

En ce qui concerne la prise en compte des contraintes, l'utilisation de la distance entre les différentes frontières du moule comme proposé dans cette étude semble le moyen le plus simple de s'adapter à des géométries complexes. Toutefois, la méthode d'optimisation actuelle est peu adaptée à cette forme de contraintes. L'utilisation de méthodes hybrides pourrait encore permettre de résoudre ce problème plus efficacement.

Un première étape dans l'adaptation de l'optimisation aux problèmes 3D pourrait consister à réaliser le calcul sur un moule infini, ce que permet la méthode des éléments frontières : seules les surfaces des canaux et de la cavité moulante sont modélisées. A chaque étape de l'optimisation, seules les surfaces des canaux doivent être remaillées, alors que la surface de la cavité moulante n'est pas modifiée.

Enfin, avant d'envisager une optimisation de la géométrie en 3D pour des pièces complexes, une optimisation par tranches sur plusieurs sections du moule pourrait aujourd'hui facilement être réalisée à partir du logiciel actuel.

Un des paramètres non pris en compte dans l'optimisation, bien que très important, est le nombre de canaux de refroidissement. Le changement du nombre de canaux implique en effet une modification du modèle de calcul assez simple à mettre en place (en particulier des domaines de calcul et du nombre de frontières, élément important pour la résolution par la méthode des éléments frontières) mais également une modification du nombre de paramètres d'optimisation, l'apparition ou la disparition de contraintes et surtout l'utilisation d'un paramètre entier (le nombre de canaux). La prise en compte de ce paramètre est donc impossible avec la

méthode d'optimisation utilisée actuellement et nécessiterait une méthode d'optimisation en nombres entiers ou une méthode aléatoire.

Validations expérimentales

La validation expérimentale des calculs thermiques devrait elle aussi être améliorée. Les mesures de température dans le polymère pendant ou après l'injection semblent difficiles à effectuer. On pourrait toutefois prévoir une mesure de température en surface de la pièce au moment de l'ouverture de moule ou juste après l'éjection.

En ce qui concerne le moule, il serait judicieux de combiner les mesures en surface du moule à des mesures en profondeur pour valider pleinement la simulation de la conduction dans le moule. Il pourrait également être intéressant d'utiliser un capteur de flux qui permettrait de vérifier l'hypothèse de densité de flux imposée pour le calcul stationnaire. Un capteur de flux serait également un autre moyen de comparer les géométries de moules, non plus en terme de température à la surface du moule mais en terme de flux extrait du polymère.

Enfin, pour valider l'optimisation, l'application de la procédure à une géométrie complexe industrielle serait intéressante, éventuellement en utilisant la méthode par tranches évoquée précédemment.

Bibliographie

[1] J-P. Trotignon, J. Verdu, A. Dobracginsky, and M. Piperaud. *Précis de Matières plastiques : Structures-Propriétés, Mise en œuvre, Normalisation*. AFNOR, 1996.

[2] J-F. Agassant, P. Avenas, J-P. Sergent, B. Vergnes, and M. Vincent. *La mise en forme des matières plastiques*. Technique & Documentation, 3e edition edition, 1996.

[3] P. Devos. L'injection sous haute pression des polymères thermoplastiques. Cours Ecole des Mines d'Albi, 2000.

[4] T.A. Osswald. *Polymer processing fundamentals*. Hanser, 1998.

[5] S.W. Opolski and T.W. Kwon. Injection molding cooling system design. In *Annual Technical Conference and Exhibition, Society of Plastics Engineers*, pages 264–268, 1987.

[6] Y. Lu, D. Li, and J. Xiao. Simulation of cooling process of injection molding. *Progress in Natural Science*, 6(2) :227–234, 1996.

[7] S. Rahmati and P. Dickens. Stereolithography for injection mould tooling. *Rapid Prototyping Journal*, 3(2) :53–60, 1997.

[8] J. Moller, M. Carlson, R. Alterovitz, and J. Swartz. Post-ejection cooling behavior of injection molded parts. In *Proceeding of the 56th Annual Technical Conference ANTEC 98*, volume 1, pages 525–527, 1998.

[9] X. Lu and L.S. Khim. A statistical experimental study of the injection molding of optical lenses. *Journal of Materials Processing Technology*, 113(1-3) :189–185, 2001.

[10] S.Y. Yang and L. Lien. Effects of cooling time and mold temperature on quality of moldings with precision contour. *Advances in Polymer Technology*, 15(4) :289–295, 1996.

[11] X. Chen, Y.C. Lam, and D.Q. Li. Analysis of thermal residual stress in plastic injection molding. *Journal of Materials Processing Technology*, 101(1-3) :275–280, 2000.

[12] J-F. Pichon. *Aide mémoire Injection des matières plastiques*. Dunod, 2001.

[13] Y. Kurosaki and I. Satoh. Effects of packing-holding pressure of an injection molding process on the size and location of sink-marks appearing on a polymer strip molded under the asymmetrical cooling condition. In *Heat transfer effects in materials processing, ASME Winter Annual Meeting*, volume 223, pages 61–66, 1992.

[14] G. Kansal, S.K. Atreya, and P.N. Rao. Thermal and stress analysis of an injection-molded polystyrene ring. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 39(1) :61–81, 2000.

[15] S. Kang, C.A. Hieber, and K.K. Wang. Optimum design of process conditions to minimize residual stresses in injection-molded parts. *Journal of Thermal Stresses*, 21(2) :141–155, 1998.

[16] M-F. Lacrampe and J. Pabiot. Défauts d'aspect des pièces injectées. *Caoutchoucs & Plastiques*, (797) :30–37, 2001.

[17] J.X. Li and W.L. Cheung. Effect of mould temperature on the formation of α/β polypropylene blends in injection moulding. *Journal of Materials Processing Technology*, 63(1-3) :472–475, 1997.

[18] G. Menges and P. Mohren. *How to make injection molds*. Hanser Publishers, 1993.

[19] D.Q. Chenou and L. Cadiou. Les aciers pour moules d'injection plastique : une évolution permanente. *La Revue de Métallurgie*, 95 :833–843, 1998.

[20] F. Catteau, A. Fourray, C. Jaquerod, and B. Marandet. *Les moules de plasturgie en aluminium*. CETIM, 2003.

[21] B. Dowler and L. Coppari. How long can you go ? Optimizing the cooling of small injection molded parts. *Plastics Engineering*, 53(6) :29–32, 1997.

[22] B. Saint-Denis. Caloducs pour moules d'injection. Techniques de l'Ingénieur A3672, 1992.

[23] D.T. Pham and R.S. Gault. A comparison of rapid prototyping technologies. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 38(10-11) :1257–1287, 1998.

[24] T. Dormal. Comparative study of the rapid tooling techniques (the RAPTEC project). *Revue Internationale de CFAO et d'Informatique Graphique*, 15(2-4) :295–307, 2000.

[25] J.S. Colton and J.S. Le Baut. Thermal effects on stereolithography injection mold inserts. *Polymer Engineering and Science*, 40(6) :1360–1368, 2000.

[26] R. Aluru, M. Keefe, and S. Advani. Simulation of injection molding into rapid-prototyped molds. *Rapid Prototyping Journal*, 7(1) :42–51, 2001.

[27] E. Sachs, E. Wylonis, S. Allen, M. Cima, and H. Guo. Production of injection molding tooling with conformal cooling channels using the three dimensional printing process. *Polymer Engineering and Science*, 40(5) :1232–1247, 2000.

[28] Y.P. Kathuria. Microstructuring by selective laser sintering of metallic powder. *Surface and Coatings Technology*, 116-119 :643–647, 1999.

[29] P. Dubois, A. Aoussat, and R. Duchamp. Protoypage rapide, généralités. Techniques de l'Ingénieur BM7017, 2000.

[30] F. Klocke, T. Celiker, and Y.A. Song. Rapid metal tooling. *Rapid Prototyping Journal*, 1(3) :32–42, 1995.

[31] D. King and T. Tansey. Alternative materials for rapid tooling. *Journal of Materials Processing Technology*, 121(2-3) :313–317, 2002.

[32] L.A. Killander. Rapid mould : epoxy-infiltrated, laser-sintered inserts. *Rapid Prototyping Journal*, 2(1) :34–40, 1996.

[33] B.G. Bryden and I.R. Pashby. Sequential laminated tooling, joined by brazing, for injection moulding. *Rapid Prototyping Journal*, 5(2) :89–93, 1999.

[34] T. Himmer, T. Nakagawa, and M. Anzai. Lamination of metal sheet. *Computers in Industry*, 39(1) :27–33, 1999.

[35] G.R. Glozer and J.R. Brevick. Laminate tooling for injection moulding. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B, Journal of Engineering Manufacture*, 207(1) :9–14, 1993.

[36] C. Barlier. Procédé de réalisation de pièces mécaniques, en particulier de prototypes, par décomposition en strates, strates élémentaires obtenues selon le procédé et pièces mécaniques ainsi obtenues. Brevet FR9814687, 1998.

[37] C. Barlier. Procédé de réalisation de pièces mécaniques, en particulier de prototypes, par décomposition en strates avec retournement, strates élémentatires obtenues selon le procédé et pièces mécaniques ainsi obtenues. Brevet FR9814688, 1998.

[38] C. Pelaingre, C. Barlier, G. Denis, and C. Levaillant. Moule d'extrusion-soufflage, réalisation d'outillage en Stratoconception : application à l'extrusion-soufflage. In *EURO RP 2001*, 2001.

[39] C. Pelaingre, J. Thabourey, C. Barlier, and C. Levaillant. A simulation of heat transfer in injection molds considering innovating cooling channels system. In *LUXFEM*, 2003.

[40] J. Gley, C. Barlier, D. Cunin, and L. Velnom. "From design to rapid tooling" an application of Stratoconception : rapid tooling for foam casting. In *EURO RP 2001*, 2001.

[41] R. Soar and P. Dickens. Design limits of unbonded laminate tooling for pressure die-casting. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B, Journal of Engineering Manufacture*, 215(4) :531–543, 2001.

[42] M. Knights. Rapid tooling is ready for prime time. *Plastics Technology*, 47(1) :46–53, 2001.

[43] E. Sachs, S. Allen, H. Guo, J. Banos, M. Cima, J. Serdy, and D. Brancazio. Progress on tooling by 3D printing ; conformal cooling, dimensional control, surface finish and hardness. In *Solid Freeform Fabrication Proceedings*, 1997.

[44] W.R. Schmidt, R.D. White, C.E. Bird, and J.V. Bak. Conformal cooling versus conventional cooling : an injection molding case study with P-20 and 3DPTM-processed tooling. In *Materials Research Symposia Proceedings*, volume 625, pages 51–56, 2000.

[45] D.I. Wimpenny, B. Bryden, and I.R. Pashby. Rapid laminated tooling. *Journal of Materials Processing Technology*, 138(1-3) :214–218, 2003.

[46] M. Janczyk, R. McLaughlin, and S.P. McCarthy. Rapid stereolithography tooling for injection molding : the effect of cooling channel. *Journal of Injection Molding Technology*, 1(1) :72–78, 1997.

[47] B.G. Bryden, I.R. Pashby, D.I. Wimpenny, and C. Adams. Laminated steel tooling in the aerospace industry. *Materials & Design*, 21(4) :403–408, 2000.

[48] R. Leveque. Données numériques sur les aciers à outils. Techniques de l'Ingénieur M332, 1995.

[49] F. Catteau. La mise en forme moulée de matériaux thermoplastiques : une solution nouvelle, l'aluminium. *Matériaux et Techniques*, (Hors Série) :73–78, 2000.

[50] D. Arnaud, J. Barbery, R. Biais, B. Fargette, and P. Naudot. Propriétés du cuivre et de ses alliages. Techniques de l'Ingénieur M430, 1985.

[51] V. Gervasi, C.J. Urban, and S.E. Gerritsma. Cooling configurations for rapid tooling, a comparison study. In *Solid Freeform Fabrication Proceedings*, pages 553–562, 1999.

[52] R. A. Harris, H. A. Newlyn, R. J. M. Hague, and P. M. Dickens. Part shrinkage anomalies from stereolithography injection mould tooling. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 43(9) :879–887, 2003.

[53] J.C. Ferreira and A. Mateus. Studies of rapid soft tooling with conformal cooling channels for plastic injection moulding. *Journal of Materials Processing Technology*, 142(2) :508–516, 2003.

[54] N. Hopkinson and P. Dickens. A comparison between stereolithography and aluminium injection moulding tooling. *Rapid Prototyping Journal*, 6(4) :253–258, 2000.

[55] R.A. Harris, R.J.M. Hague, and P.M. Dickens. The structure of parts produced by stereolithography injection mould tools and the effect on part shrinkage. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 44(1) :59–64, 2004.

[56] J.C. Lin. Optimum cooling system design of a free-form injection mold using an abductive network. *Journal of Materials Processing Technology*, 120(1-3) :226–236, 2002.

[57] *Le moulage sous pression des alliages d'aluminium.* Editions Techniques des Industries de la Fonderie, 2000.

[58] N.S. Rao, G. Schumacher, N.R. Schott, and K.T. O'Brien. Optimization of cooling systems in injection molds by an easily applicable analytical model. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, 21(5) :451–459, 2002.

[59] J.M. Maucotel. Moule, calculez son refroidissement. *Plastiques modernes et élastomères*, 32(1) :58–64, 1980.

[60] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger. *Conduction of heat in solids.* Clarendon Press, Oxford, 1959.

[61] J.Z. Liang and J.N. Ness. The calculation of cooling time in injection moulding. *Journal of Materials Processing Technology*, 57(1-2) :62–64, 1996.

[62] M. Chatain and A. Dobraczynski. Injection des thermoplastiques : les moules. Techniques de l'Ingénieur A3680, 1995.

[63] M.N. Özişik. *Heat transfer, a basic approach.* McGraw Hill, 1985.

[64] Y. Caratini, C. Gerometta, and C. Rigaut. Etude du refroidissement forcé dans les moules métalliques, détermination des coefficients de transfert thermique pour la simulation numérique. *Hommes et Fonderie*, (263) :55–61, 1996.

[65] H.H. Chiang, C.A. Hieber, and K.K. Wang. A unified simulation of the filling and postfilling stages in injection molding. Part 1 : Formulation. *Polymer Engineering and Science*, 31(2) :116–124, 1991.

[66] H.H. Chiang, C.A. Hieber, N. Santhanam, and K.K. Wang. Integrated simulation of fluid flow and heat transfer in injection molding for the predicition of shrinkage and warpage. In *Heat and Mass Transfer in Solidification Processing, ASME*, volume 175, pages 133–146, 1991.

[67] W-Y. Chiu, L-W. Chen, C. Wang, and D-C. Wang. Analysis of filling, packing, and cooling stages in injction molding of disks cavities. *Journal of Applied Polymer Science*, 43(1) :39–48, 1991.

[68] R. Dubay and A.C. Bell. An experimental comparison of cooling time for cylindrical plastic components using heat conduction models in the non-conservative and conservative forms. *Polymer Engineering and Science*, 38(7) :1048–1059, 1998.

[69] L. Sridhar and K.A. Narh. The effect of temperature dependent thermal properties on process parameter prediction in injection molding. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 27(3) :325–332, 2000.

[70] L. Sridhar, W. Yin, and K.A. Narh. The effect of shrinkage induced interface gap on the thermal contact resistance between the mold and the plastic in injection molding. *Journal of Injection Molding Technology*, 4(1) :44–49, 2000.

[71] K. Park and J-H. Ahn. Design of experiment considering two-way interactions and its application to injection molding processes with numerical analysis. *Journal of Materials Processing Technology*, 146(2) :221–227, 2004.

[72] P. Engelmann, E. Dawkins, J. Shoemaker, and M. Monroe. Applying copper alloys using new mold cooling software. In *Proceedings of the 54th Annual Technical Conference ANTEC 96*, volume 1, pages 1041–1045, 1996.

[73] A. Bikas and A. Kanarachos. The dependence of cooling channels system geometry parameters on product quality as a result of uniform mold cooling. In *Proceedings of the 57th Annual Technical Conference ANTEC 99*, pages 578–583, 1999.

[74] S. Batkam, J-F. Agassant, and T. Coupez. Couplage thermique/polymère en remplissage 3D. In XV*ème Congrès Français de Mécanique*, pages 515–521, 2001.

[75] L.S. Turng and L.S. Wang. A computer-aided cooling-line design system for injection molds. *Journal of Engineering for Industry*, 112 :161–190, 1990.

[76] T. Matsumoto, M. Tanaka, M. Miyagawa, and N. Ishii. Optimum design of cooling lines in injection moulds by using boundary element design sensitivity analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 14(2-3) :177–185, 1993.

[77] H. Zhou, D. Li, and S. Cui. Three-dimensional optimum design of the cooling lines of injection moulds based on boundary element design sensitivity analysis. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B, Journal of Engineering Manufacture*, 216(7) :1067–1071, 2002.

[78] S.J. Park and T.H. Kwon. Optimization method for steady conduction in special geometry using a boundary element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43 :1109–1126, 1998.

[79] S.J. Park and T.H. Kwon. Optimal cooling system design for the injection molding process. *Polymer Engineering and Science*, 38(9) :1450–1462, 1998.

[80] K. Himasekhar, J. Lottey, and K.K. Wang. CAE of mold cooling in injection molding using a three-dimensional numerical solution. *Journal of Engineering for Industry*, 114 :213–221, 1992.

[81] S.C. Chen and Y.C. Chung. Simulations of cyclic transient mold cavity surface temperatures in injection mold-cooling process. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 19(4) :559–568, 1992.

[82] I.O. Pandelidis and T.J. Lingard. Optimization of cooling systems for injection molding. *International Polymer Processing*, 5 :100–108, 1990.

[83] S.Y. Hu, N.T. Cheng, and S.C. Chen. Effect of cooling system design and process parameters on cyclic variation of mold temperatures - simulation by DRBEM. *Plastics, Rubber and Composites Processing and Applications*, 23(4) :221–232, 1995.

[84] L.Q. Tang, C. Chassapis, and S. Manoochehri. Optimal cooling system design for multi-cavity injection molding. *Finite Elements Analysis and Design*, 26(3) :229–251, 1997.

[85] L.Q. Tang, K. Pochiraju, C. Chassapis, and S. Manoochehri. A computer-aided optimization approach for the design of injection mold cooling systems. *Journal of Mechanical Design*, 120 :165–174, 1998.

[86] J. Huang and G.M. Fadel. Bi-objective optimization design of heterogeneous injection mold cooling systems. *Journal of Mechanical Design*, Vol. 123(2) :226–239, 2001.

[87] I. Manceau and D. Delaunay. Etude expérimentale et simulation des transferts de chaleur dans un moule d'injection de thermoplastiques. In *Actes du colloque annuel de la société française des thermiciens*, pages 90–95, 1993.

[88] I. Manceau. *Analyse et modélisation des transferts thermiques dans les moules d'injection de thermoplastiques*. PhD thesis, Université de Nantes, 1994.

[89] E. Boillat, R. Glardon, and D. Paraschivescu. Optimisation thermique de moules d'injection construits par des processus génératifs. *Journal de Physique IV*, 102 :27–38, 2002.

[90] I. Catic, A. Abadzic, and M. Rujnic-Sokele. Determining the optimum position of temperature sensors in molds for injection molding of polymers. *Journal of Injection Molding Technology*, 3(4) :194–200, 1999.

[91] A. Caruso. *Application de la méthode des éléments de frontière à la modélisation des transferts de chaleur par diffusion thermique*. PhD thesis, Université de Provence, 1998.

[92] C. Le Niliot. *Méthode des éléments de frontière pour la résolution des problèmes inverses en diffusion thermique*. PhD thesis, Université de Provence, 1991.

[93] S. Kenig and M.R. Kamal. Cooling molded parts, a rigorous analysis. *SPE Journal*, 26 :50–57, 1970.

[94] S. Quilliet. *Transferts thermiques à l'interface polymère-métal dans le procédé d'injection des thermoplastiques*. PhD thesis, Université de Nantes, 1998.

[95] N. Sombatsompop, D. Chonniyom, and A.K. Wood. Temperature gradients in molten polymers during the cooling process. *Journal of Applied Polymer Science*, 74 :3268–3274, 1999.

[96] L. Sridhar and K.A. Narh. Computer simulation of the effect of thermal contact resistance on cooling time in injection molding. *Simulation*, 73(3) :144–148, 1999.

[97] C.J. Yu, J.E. Sunderland, and C. Poli. Thermal contact resistance in injection molding. *Polymer Engineering and Science*, 30(24) :1599–1606, 1990.

[98] D. Delaunay, Ph. Le Bot, R. Fulchiron, J.F. Luye, and G. Régnier. Nature of convection between polymer and mold in injection molding. Part 1 : Influence of a non-perfect thermal contact. *Polymer Engineering and Science*, 40(7) :1682–1691, 2000.

[99] H. Massé, E. Arquis, D. Delaunay, S. Quilliet, and Ph. Le Bot. Heat transfer with mechanically driven thermal contact resistance at the polymer-mold interface in injection molding of polymers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(8-9) :2015–2027, 2004.

[100] L. Sridhar, B.M. Sedlak, and K.A. Narh. Parametric study of heat transfer in injection molding _ Effect of thermal contact resistance. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 122 :598–705, 2000.

[101] A. Lahrmann and C. Haberland. Comparative application of finite element and boundary element methods to heat transfer in structure. In *7th International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, pages 5–16, Juillet 1991.

[102] E. Perchat. Développement d'un solveur 3D par éléments frontières pour les équations de l'élasticité linéaire. Technical report, Ecole des Mines d'Albi, 2000.

[103] C.A. Brebbia and J. Dominguez. *Boundary elements, an introductory course*. WIT Press/Computational Mechanics Publications, 1992.

[104] F. París and J. Cañas. *Boundary element method, fundamentals and applications*. Oxford University Press, 1997.

[105] The MathWorks. *Matlab® Function Reference*, 2002. Version 6.

[106] J.C. Mätzig. The dual reciprocity method for heat transfer in polymer processing. Master's thesis, University of Wisconsin-Madison, 1991.

[107] R. Pasquetti and D. Petit. Inverse diffusion by boundary elements. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 15 :197–205, 1995.

[108] K. Davey and S. Hinduja. Modelling the transient thermal behaviour of the pressure die-casting process with the BEM. *Applied Mathematical Modelling*, 14(8) :394–409, 1990.

[109] S.J. DeSilva, C.L. Chan, A. Chandra, and J. Lim. Boundary element method analysis for the transient conduction - convection in 2-D with spatially variable convective velocity. *Applied Mathematical Modelling*, 81(1-2) :81–112, 1998.

[110] P. Skerget and C.A. Brebbia. Time dependent non-linear potential problems. *Topics in Boundary Element Research*, 2 :63–86, 1984.

[111] J.A.M. Carrer and W.J. Mansur. A time-domain boundary element formulation with fundamental solution generated by Heaviside function source : initial conditions contribution. *Electronic Journal of Boundary Elements*, BETEQ 2001(1) :20–30, 2002.

[112] T. Matsumoto and M. Tanaka. A boundary integral treatment of domain integral term for initial condition in time-domain boundary element method for diffusion equation. *Electronic Journal of Boundary Elements*, BETEQ 2001(3) :377–385, 2002.

[113] M. Zerroukat. A fast boundary element algorithm for time-dependant potential problems. *Applied Mathematical Modelling*, 22(3) :183–196, 1998.

[114] P. Satravaha and S. Zhu. An application of the LTDRM to transient diffusion problems with nonlinear material properties and nonlinear boundary conditions. *Apllied Mathematics and Computation*, 87(2-3) :127–160, 1997.

[115] S-P. Zhu. Solving transient diffusion problems : time-dependent fundamental solution approaches versus LTDRM approaches. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 21(1) :87–90, 1998.

[116] A. Sutradhar, G.H. Paulino, and L.J. Gray. Transient heat conduction in homogeneous and non-homogeneous materials by the Laplace transform Galerkin boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26(2) :119–132, 2002.

[117] L. Godinho, A. Tadeu, and N. Simoes. Study of transient heat conduction in 2.5D domains using the boundary element method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28(6) :593–606, 2004.

[118] V. Roures and E. Alarcon. Transient heat conduction problems using BIEM. *Computers & Structures*, 16(6) :717–730, 1983.

[119] M. Tanaka, T. Matsumoto, and Q.F. Yang. Time stepping boundary element method applied to 2D transient heat conduction problems. *Applied Mathematical Modelling*, 18(10) :569–576, 1994.

[120] P.W. Partridge, C.A. Brebbia, and L.C. Wrobel. *The Dual Reciprocity Boundary Element Method*. Computational Mechanics Publications, 1992.

[121] A.J. Nowak and A.C. Neves, editors. *The Multiple Reciprocity Boundary Element Method*. Computational Mechanics Publications, 1994.

[122] V. Popov and H. Power. A domain decomposition on the dual reciprocity approach. *Boundary Elements Communications*, 7 :1–5, 1996.

[123] M. Tanaka, T. Matsumoto, and Y. Suda. A dual reciprocity boundary element method applied to the steady state heat conduction problem of functionally gradient materials. *Electronic Journal of Boundary Elements*, BETEQ 2001(1) :128–135, 2002.

[124] C.P. Rahaim, A.J. Kassab, and R.J. Cavalleri. Coupled dual reciprocity boundary element/finite volume method for transient conjugate heat transfer. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 14(1) :27–38, 2000.

[125] K. Wang. *BEM simulation for glass parisons*. PhD thesis, Eindhoven University of Technology, 2002.

[126] L.C. Wrobel and C.A. Brebbia. The dual reciprocity boundary element formulation for nonlinear diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 65(2) :147–164, 1987.

[127] W.F. Florez. *Multidomain dual reciprocity method for the solution of nonlinear flow problems*. PhD thesis, University of Wales, 2000.

[128] S.Y. Hu, Y.P. Chang, W.R. Jong, and S.C. Chen. Effect of mold heat transfer on the curing reaction of epoxy molding compound during transfer molding. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 23(6) :779–788, 1996.

[129] B.A. Davis, P.J. Gramann, J.C. Mätzig, and T.A. Osswald. The dual-reciprocity method for heat transfer in polymer processing. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 13(3) :249–261, 1994.

[130] I. Busuladzic. *Modélisation des éléments de mélange en extrusion par la méthode des éléments frontières*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2004.

[131] M.K. Singh and M.S. Kalra. Time integration in the dual reciprocity boundary element analysis of transient diffusion. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 18(2) :73–102, 1996.

[132] M.K. Singh and M. Tanaka. Dual reciprocity boundary element analysis of nonlinear diffusion : temporal discretisation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 23(5-6) :419–433, 1999.

[133] M.K. Singh and M. Tanaka. Dual reciprocity boundary element analysis of inverse heat conduction problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 190(40-41) :5283–5295, 2001.

[134] V. Popov and H. Power. The DRM-MD integral equation method : an efficient approach for the numerical solution of domain dominant problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44 :327–353, 1999.

[135] P.W. Partridge. Towards criteria for selecting approximation functions in the dual reciprocity method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 24(7-8) :519–529, 2000.

[136] S.R. Karur and P.A. Ramachandran. Radial basis function approximation in the dual reciprocity method. *Mathematical and Computer Modelling*, 20(7) :59–70, 1994.

[137] D. Frayce, R.E. Khayat, and A. Derdouri. A dual reciprocity boundary element approach to three-dimensional transient heat conduction as applied to materials processing. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 29(3) :243–264, 1996.

[138] J.J. Rodriguez and H. Power. An adaptive dual reciprocity scheme for the numerical solution of the Poisson equation. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26(4) :283–300, 2002.

[139] N. Neirmarlija, L. Skerget, and M. Delic. The BEM analysis of heat transfer in technological process of drawing wire. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 20(3) :261–267, 1997.

[140] K. Shanazari and K. Chen. An overlapping domain decomposition dual reciprocity method. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 27(10) :945–953, 2003.

[141] M. Pillet. *Les plans d'expériences par la méthode Taguchi*. Les Editions d'Organisation, 1997.

[142] M.N. Özişik. *Heat conduction*. Wiley, 1993.

[143] D. Bigio and B. Xie. Development of cooling process window for injection molding. In *Proceedings of the 52nd Annual Technical Conference ANTEC 94*, volume 1, pages 813–816, 1994.

[144] L. Fradette, P.A. Tanguy, F. Thibault, P. Sheehy, D. Blouin, and P. Hurez. Optimal design in profile extrusion calibration. *Journal of Polymer Engineering*, 14(4) :295–322, 1995.

[145] G.S. Dulikravich and T.J. Martin. Geometrical inverse problems in three-dimensional non-linear steady heat conduction. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 15 :161–169, 1995.

[146] M. Minoux. *Programmation mathématique - Théorie et algorithmes*. Dunod, 1983.

[147] R. Fletcher. *Practical methods of optimization*. Wiley, 1987.

[148] J-M. Renders. *Algorithmes génétiques et réseaux de neurones*. Hermès, 1995.

[149] P.T. Boggs and J.W. Tolle. Sequential quadratic programming. *Acta Numerica*, 4 :1–51, 1995.

[150] J. Dreo, A. Petrowski, P. Siarry, and E. Taillard. *Métaheuristique pour l'optimisation difficile*. Hermès, 2003.

[151] D.A. Tortorelli and P. Michaleris. Design sensitivity analysis : overview and review. *Inverse Problems in Engineering*, 1 :71–105, 1994.

[152] T.J. Martin and G.S. Dulikravich. An implicit and explicit BEM sensitivity approach for thermo-structural optimization. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 28(3) :257–265, 2004.

[153] K.G. Prasad and J.H. Kane. Three dimensional boundary element thermal shape sensitivity analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 35(6) :1427–1439, 1992.

[154] S.J. Park and T.H. Kwon. Sensitivity analysis formulation for three-dimensional conduction heat transfer with complex geometries using a boundary element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39 :2837–2862, 1996.

[155] S.J. Park and T.H. Kwon. Thermal and design sensitivity analyses for cooling system of injection mold, part 2 : design sensitivity analysis. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 120 :296–305, 1998.

[156] R.A. Meric and R.H. Kul. Differential and integral sensitivity analyses for optimal heating of solids by the BEM. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 13(3) :263–271, 1994.

[157] C.W. Park and Y.M. Yoo. Shape design sensitivity analysis of a two-dimensional heat transfer system using the boundary element method. *Computers & Structures*, 28(4) :543–550, 1988.

[158] R. Aithal and S. Saigal. Shape sensitivity analysis in thermal problems using BEM. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 15(2) :115–120, 1995.

[159] D.A. Tortorelli and R.B. Haber. First-order design sensitivities for transient conduction problems by an adjoint method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 28(4) :733–752, 1989.

[160] R.T. Haftka. Techniques for thermal sensitivity analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17 :71–80, 1981.

[161] Q. Zou. Injection molding cooling optimization. In *Annual Technical Conference and Exhibition, Society of Plastics Engineers*, pages 1614–1620, 1992.

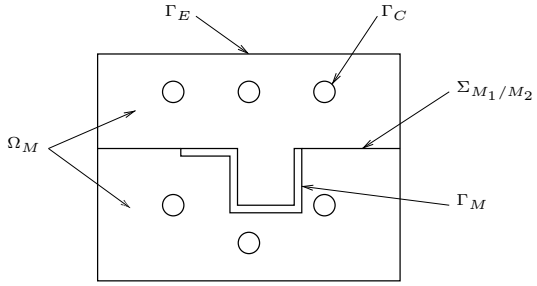
[162] The MathWorks. *Optimization Toolbox For Use With Matlab®*, 2003. User's Guide, Version 2.

[163] G. Saint Martin. *Étude typologique des défauts structuraux générés au cours de la mise en forme par injection de composites à matrice polymère thermostable renforcés par fibres de verre courtes*. PhD thesis, Ecole des Mines de Paris, 2003.

Annexe A

Récapitulatif des modèles thermiques utilisés

Calcul Stationnaire



Équation de la chaleur :

$\forall M \in \Omega_M,\ \vec{\nabla} T(M) = 0$

Conditions aux limites :

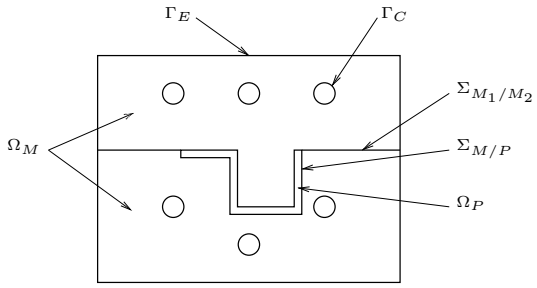
$\forall M \in \Gamma_C,\ \lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h_F\,(T(M) - T_F)$

$\forall M \in \Gamma_E,\ \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = 0$

$$\forall M \in \Sigma_{M_1/M_2},\ \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2.\vec{n_2} \\ T_1 - T_2 = \lambda_1 \mathcal{R}_{M_1/M_2} \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} \end{cases}$$

$\forall M \in \Gamma_M,\ \lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = \phi_P$

Calcul Transitoire



Équation de la chaleur :

$\forall M \in \Omega_M,\ \rho_M C_{PM} \frac{\partial T(M)}{\partial t} = \lambda_M \vec{\nabla}^2 T(M)$

$\forall M \in \Omega_P,\ \rho_P C_{PP} \frac{\partial T(M)}{\partial t} = \lambda_P \vec{\nabla}^2 T(M)$

Conditions aux limites :

$\forall M \in \Gamma_C,\ \lambda_M \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = h\,(T - T\infty)$

$\forall M \in \Gamma_E,\ \vec{\nabla} T(M).\vec{n} = 0$

$$\forall M \in \Sigma_{M_1/M_2},\ \begin{cases} -\lambda_1 \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} = \lambda_2 \vec{\nabla} T_2.\vec{n_2} \\ T_1 - T_2 = \lambda_1 \mathcal{R}_{M_1/M_2} \vec{\nabla} T_1.\vec{n_1} \end{cases}$$

$$\forall M \in \Sigma_{M/P},\ \begin{cases} -\lambda_M \vec{\nabla} T_M.\vec{n_M} = \lambda_P \vec{\nabla} T_P.\vec{n_P} \\ T_M - T_P = -\lambda_M \mathcal{R}_{M/P} \vec{\nabla} T_M.\vec{n_M} \end{cases}$$

Conditions initiales :

$\forall M \in \Omega_P,\ T(M, t_i^n) = T_{inj}$

$$\forall M \in \Omega_M,\quad \begin{cases} T(M, t_i^1) = T_\infty \\ \forall n = 2, 3 \cdots N, \quad T(M, t_i^n) = T(M, t_f^{n-1}) \end{cases}$$

Annexe B

Principe du passage de l'équation intégrale frontière au système d'équations de la méthode des éléments frontières

L'équation de la chaleur sous sa forme intégrale frontière s'écrit :

$$c_i T_i + \int_\Gamma T q^* \, d\Gamma = \int_\Gamma q T^* \, d\Gamma \tag{B.1}$$

Après division de la frontière en N_e éléments, on obtient donc l'équation intégrale discrétisée suivante :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} T q^* d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} q T^* d\Gamma \tag{B.2}$$

Cette équation appliquée à tous les points de collocation de la frontière conduit à un système d'équations linéaires. Selon le degré d'interpolation des éléments, le principe de passage à ce système varie légèrement.

Éléments constants La frontière Γ est discrétisée à l'aide de N_e éléments constants Γ_j. Le point de collocation i est placé successivement en chaque nœud de la frontière. Le facteur de forme c_i est dans ce cas toujours égal à $\frac{1}{2}$. L'équation intégrale frontière (B.2) peut se mettre sous la forme discrétisée :

$$\frac{1}{2} T_i + \sum_{j=1}^{N_e} T_j \int_{\Gamma_j} q^* \, d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_e} q_j \int_{\Gamma_j} T^* \, d\Gamma \tag{B.3}$$

En notant $G_{ij} = \int_{\Gamma_j} T^* \, d\Gamma$ et $H_{ij} = \frac{1}{2}\delta_{ij} + \int_{\Gamma_j} q^* \, d\Gamma = \frac{1}{2}\delta_{ij} + \hat{H}_{ij}$, l'équation peut se mettre sous la forme :

$$\sum_{j=1}^{N_e} T_j H_{ij} = \sum_{j=1}^{N_e} q_j G_{ij} \tag{B.4}$$

soit sous forme matricielle :

$$[H] \{T\} = [G] \{q\} \tag{B.5}$$

où $[G]$ et $[H]$ sont des matrices de taille $N_e \times N_e$.

Sur chaque élément Γ_j, on connaît soit la température T, soit le gradient de température selon la normale q. Il est possible de mettre le système d'équations linéaires (B.4) à N_e inconnues sous la forme (B.6) en regroupant les inconnues dans un vecteur $\{X\}$ et les conditions aux limites connues dans le second membre F.

$$[A]\{X\} = \{F\} \tag{B.6}$$

N_1 valeurs de T sont connues sur les éléments $j_1 \in \Gamma_T$ et N_2 valeurs de q sont connues sur les éléments $j_2 \in \Gamma_q$. Le système (B.4) s'écrit donc :

$$\begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & H_{ij1} & \cdots & H_{ij2} & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ T_{j_1} \\ \vdots \\ T_{j_2} \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & G_{ij1} & \cdots & G_{ij2} & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ q_{j_1} \\ \vdots \\ q_{j_2} \\ \vdots \end{Bmatrix} \tag{B.7}$$

En regroupant les inconnues dans le premier terme et les conditions limites connues dans le second terme, on obtient :

$$\begin{bmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & -G_{ij1} & \cdots & H_{ij2} & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ q_{j_1} \\ \vdots \\ T_{j_2} \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ \cdots - H_{ij1}T_{j_1} + G_{ij2}q_{j2} \\ \vdots \\ \vdots \end{Bmatrix} \tag{B.8}$$

On obtient donc la forme (B.6) avec :

$$\begin{aligned} A_{ij1} &= -G_{ij1} & A_{ij2} &= H_{ij2} \\ x_{j1} &= q_{j1} & x_{j2} &= T_{j2} \\ F_i &= -H_{ij1}T_{j1} + G_{ij2}q_{j2} \end{aligned}$$

La résolution de ce système d'équations linéaires permet alors d'obtenir les températures et gradients de température sur la frontière du domaine. Le calcul des flux selon les directions du plan est obtenu par projection du gradient de température q et multiplication par la conductivité thermique λ.

Éléments linéaires On discrétise la frontière Γ en N_e éléments linéaires (continus ou discontinus) Γ_j. L'équation intégrale frontière (B.1) peut se mettre sous la forme :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} T q^* \, d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} q T^* \, d\Gamma \tag{B.9}$$

Les intégrales sont calculées en se ramenant à une intégrale sur un élément de référence (défini entre $\xi = -1$ et $\xi = 1$) par l'équation (B.10) où J_j est la matrice Jacobienne de passage de l'élément j à l'élément de référence.

$$\int_{\Gamma_j} f \, d\Gamma = \int_{\xi=-1}^{\xi=1} \det(J_j) f(\xi) \, d\xi \tag{B.10}$$

Pour les éléments 1D considérés, on a $\det(J_j) = \frac{L_j}{2}$ où L_j est la longueur de l'élément j. L'équation précédente peut donc se mettre sous la forme :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} T(\xi) q^*(\xi)\, d\xi = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} q(\xi) T^*(\xi)\, d\xi \tag{B.11}$$

Pour les éléments linéaires (continus ou discontinus), les températures et gradients s'expriment à partir des températures et gradients aux nœuds sous la forme (B.12) où les fonctions N_1 et N_2 sont les fonctions d'interpolation continues ou discontinues et T_1^j, T_2^j, q_1^j et q_2^j sont les températures et gradients de température aux points d'interpolation de l'élément j.

$$\begin{aligned} T(\xi) &= N_1(\xi) T_1^j + N_2(\xi) T_2^j \\ q(\xi) &= N_1(\xi) q_1^j + N_2(\xi) q_2^j \end{aligned} \tag{B.12}$$

On note alors :

$$\begin{aligned} H_{ij}^1 &= \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} N_1(\xi) q^*(\xi)\, d\xi \qquad & G_{ij}^1 &= \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} N_1(\xi) T^*(\xi)\, d\xi \\ H_{ij}^2 &= \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} N_2(\xi) q^*(\xi)\, d\xi \qquad & G_{ij}^2 &= \frac{L_j}{2} \int_{-1}^{1} N_2(\xi) T^*(\xi)\, d\xi \end{aligned} \tag{B.13}$$

L'équation intégrale discrétisée s'écrit finalement pour les éléments linéaires :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{N_e} \left\langle H_{ij}^1 \; H_{ij}^2 \right\rangle \left\{ \begin{array}{c} T_1^j \\ T_2^j \end{array} \right\} = \sum_{j=1}^{N_e} \left\langle G_{ij}^1 \; G_{ij}^2 \right\rangle \left\{ \begin{array}{c} q_1^j \\ q_2^j \end{array} \right\} \tag{B.14}$$

Éléments linéaires continus Dans le cas des éléments linéaires continus, $T_1^j = T_j^j$ et $T_2^j = T_{j+1}^j$ et de même, $q_1^j = q_j^j$ et $q_2^j = q_{j+1}^j$. Pour chaque nœud, une température unique est définie mais un gradient de température est défini selon la normale à chaque élément (figure B.1) :

$$T_j^{j-1} = T_j^j = T_j \text{ mais } q_j^{j-1} \neq q_j^j \tag{B.15}$$

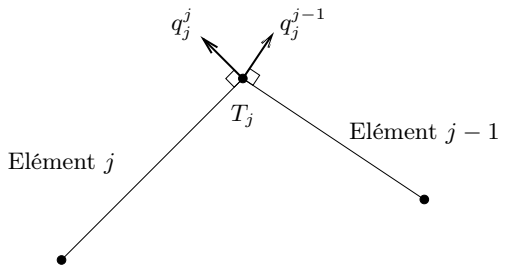


FIG. B.1 – Définition des degrés de liberté du nœud j dans le cas d'éléments linéaires continus

On obtient donc le système matriciel (B.16) où $[H]$ est de taille $N_e \times N_e$ et $[G]$ est de taille $N_e \times 2N_e$.

$$[H]\,\{T\} = [G]\,\{q\} \tag{B.16}$$

Ce système est équivalent a celui obtenu avec des éléments constants mais avec une matrice G de taille différente.

Toutefois un certain nombre de difficultés peuvent apparaître :

- il est nécessaire de calculer le facteur de forme c_i pour chaque point i où la frontière n'est pas régulière ;
- si deux éléments consécutifs ont une condition limite en température de valeur différente, il est impossible d'imposer deux températures au nœud commun à ces deux éléments ;
- si deux éléments consécutifs ont une condition limite en température et la frontière n'est pas régulière, il est impossible de déterminer les gradients de température normaux aux deux éléments sur le nœud commun (pour une frontière régulière, les normales aux éléments j et $j-1$ au nœud j sont identiques donc $q_j^{j-1} = q_j^j$).

Une adaptation peut donc être nécessaire pour résoudre les problèmes comportant des conditions aux limites en température. L'utilisation d'éléments linéaires discontinus est une des méthodes pour s'affranchir des ces inconvénients. Pour tous les autres cas (flux imposé sur au moins un des deux éléments consécutifs ou frontière régulière), on se ramène à un système (B.17) à N_e inconnues et N_e équations par regroupement des inconnues et conditions limites.

$$[A]\{X\} = \{F\} \tag{B.17}$$

Condition limite de Neumann : le gradient de température est connu sur les deux éléments entourant le nœud j. La seule inconnue au nœud j est la température T_j.

$$\begin{aligned} X_j &= T_j \\ A_{ij} &= H_{ij}^1 + H_{ij}^2 + \delta_{ij} c_i \\ F_j &= \cdots + G_{ij}^1 q_j^j + G_{ij-1}^2 q_j^{j-1} + \cdots \end{aligned} \tag{B.18}$$

Condition limite mixte :

Cas 1 : La température (T_j) et le gradient selon la normale à l'élément j (q_j^j) sont connus au nœud j. L'inconnue est le gradient selon la normale à l'élément $j-1$ (q_j^{j-1}).

$$\begin{aligned} X_j &= q_j^{j-1} \\ A_{ij} &= -G_{ij-1}^2 \\ F_i &= \cdots - (H_{ij}^1 + H_{ij}^2 + \delta_{ij} c_i) T_j + G_{ij}^1 q_j^j + \cdots \end{aligned} \tag{B.19}$$

Cas 2 : La température (T_j) et le gradient selon la normale à l'élément $j-1$ (q_j^{j-1}) sont connus au nœud j. L'inconnue est le gradient selon la normale à l'élément $j-1$ (q_j^j).

$$\begin{aligned} X_j &= q_j^j \\ A_{ij} &= -G_{ij}^1 \\ F_i &= \cdots - (H_{ij}^1 + H_{ij}^2 + \delta_{ij} c_i) T_j + G_{ij-1}^2 q_j^{j-1} + \cdots \end{aligned} \tag{B.20}$$

Eléments linéaires discontinus Le cas des éléments linéaires discontinus est semblable à celui des éléments constants. $c_i = \frac{1}{2}$ pour tous les points de collocation i de la frontière. On se ramène directement à la forme matricielle (B.21) où $[G]$ et $[H]$ sont des matrices de taille $2N_e \times 2N_e$.

$$[H]\{T\} = [G]\{q\} \tag{B.21}$$

En introduisant les conditions aux limites et en regroupant les inconnues dans le vecteur $\{X\}$, on obtient le système linéaire de $2N_e$ équations à $2N_e$ inconnues :

$$[A]\{X\} = \{F\} \tag{B.22}$$

Calcul numérique des intégrales Pour calculer les intégrales sur un élément 1D, on se ramène au calcul sur un élément de référence 1D ($\xi = -1$ à $\xi = 1$). L'intégrale d'une fonction f s'écrit alors :

$$\int_{\Gamma_j} f \, d\Gamma = \int_{-1}^{1} \det(J_j) f(\xi) \, d\xi \tag{B.23}$$

J_j est la matrice jacobienne de la transformation. Pour les éléments 1D, le déterminant de la matrice jacobienne est $\det(J_j) = \frac{L_j}{2}$.

L'intégrale est alors calculée sur l'élément de référence par une quadrature de Gauss :

$$\int_{-1}^{1} \det(J_j) f(\xi) \, d\xi = \det(J_j) \sum_{k=1}^{N_G} \omega_k f(\xi_k) \tag{B.24}$$

ξ_k	-0,8611363	-0,339981	0,339981	0,8611363
ω_k	0,3478548	0,6521451	0,6521451	0,3478548

TAB. B.1 – Poids et abscisses pour $N_G = 4$

Lorsque le point de collocation appartient à l'élément, le calcul numérique des intégrales G et H conduit à une erreur importante. La distance r tend en effet vers 0, ce qui conduit à une singularité. Dans ce cas, le calcul peut être effectué analytiquement comme l'ont montré Brebbia [103] et Paris [104].

Pour des éléments constants, on a :

$$G_{ii} = \frac{L_i}{2\pi} \left[\ln\left(\frac{2}{L_i}\right) + 1 \right] \quad \text{et} \quad H_{ii} = \frac{1}{2} \tag{B.25}$$

Pour des éléments linéaires continus, un nœud appartient à deux éléments. On a donc :

$$G^1_{ii-1} = \frac{L_{i-1}}{2\pi} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{L_{i-1}} \right) \qquad G^2_{ii-1} = \frac{L_{i-1}}{2\pi} \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{L_{i-1}} \right) \tag{B.26}$$

$$G^1_{ii} = \frac{L_i}{2\pi} \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{L_i} \right) \qquad G^2_{ii} = \frac{L_i}{2\pi} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{L_i} \right) \tag{B.27}$$

En supposant un domaine de température uniforme dont toutes les frontières sont soumises à un flux nul, on peut écrire $[H]\,[I] = 0$ d'où :

$$H_{ii} = c_i + H^1_{ii} + H^2_{ii} = -\sum_{j \neq i} H_{ij} \tag{B.28}$$

Cette formulation de plus permet de ne pas avoir à calculer le facteur de forme c pour chaque point de collocation.

Pour des éléments linéaires discontinus, on a deux nœuds ($i = 2j - 1$ et $i = 2j$) par élément j. Les termes des matrices G et H correspondant s'écrivent :

$$\begin{aligned} G^1_{2j-1,j} = \frac{-L_j}{2\pi(1 - f_1 - f_2)} \Big(& (1 - f_1 - f_2) \left(f_1 \ln(f_1 L_j) + (1 - f_1) \ln((1 - f_1) L_j) - 1 \right) \\ & + \frac{1}{2} \left(f_1^2 \ln(f_1 L_j) - (1 - f_1)^2 \ln((1 - f_1) L_j) + \frac{1}{2}(1 - 2 f_1) \right) \Big) \end{aligned} \tag{B.29}$$

$$G^2_{2j-1,j} = \frac{-L_j}{4\pi(1-f_1-f_2)}\left((1-f_1)^2\ln((1-f_1)L_j) - f_1^2\ln(f_1L) - \frac{1}{2}(1-2f_1)\right) \tag{B.30}$$

$$G^1_{2j,j} = \frac{-L_j}{4\pi(1-f_1-f_2)}\left((1-f_2)^2\ln((1-f_2)L_j) - f_2^2\ln(f_2L) - \frac{1}{2}(1-2f_2)\right) \tag{B.31}$$

$$\begin{aligned} G^2_{2j,j} = \frac{-L_j}{2\pi(1-f_1-f_2)}\Big((1-f_1-f_2)\left(f_2\ln(f_2L_j) + (1-f_2)\ln((1-f_2)L_j) - 1\right) \\ +\frac{1}{2}\left(f_2^2\ln(f_2L_j) - (1-f_2)^2\ln((1-f_2)L_j) + \frac{1}{2}(1-2f_2)\right)\Big) \end{aligned} \tag{B.32}$$

$$H^1_{2j-1,j} = H^2_{2j-1,j} = H^1_{2j,j} = H^2_{2j,j} = 0 \tag{B.33}$$

Annexe C

Calcul des solutions à l'intérieur des domaines par la méthode des éléments frontières

Après la résolution sur les frontières, on cherche à calculer les solutions (températures et gradients de température) à l'intérieur du domaine. Pour cela, on applique l'équation intégrale discrétisée (C.1) à chacun des points internes où la solution est cherchée.

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} T q^* d\Gamma = \sum_{j=1}^{N_e} \int_{\Gamma_j} q T^* d\Gamma \tag{C.1}$$

Le détail des calculs pour chaque type d'élément est présenté ci-dessous.

Éléments constants En utilisant la même discrétisation que pour le calcul sur la frontière, on a directement la température d'un point interne :

$$T_i = -\sum_{j=1}^{N_e} H_{ij} T_j + \sum_{j=1}^{N_e} G_{ij} q_j \tag{C.2}$$

Les températures T_j et gradients q_j sont désormais tous connus sur la frontière et il ne reste donc à évaluer que les termes $\hat{H}_{ij}$ et G_{ij} pour chaque point de calcul i intérieur au domaine.

T et q sont constants sur un élément donc $\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial q}{\partial x} = 0$ pour tout point de la frontière. Le gradient de température dans les directions x et y s'écrit donc :

$$q_{xi} = \sum_{j=1}^{N_e} q_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial T^*}{\partial x}\, d\Gamma - \sum_{j=1}^{N_e} T_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial q^*}{\partial x}\, d\Gamma \tag{C.3}$$

$$q_{yi} = \sum_{j=1}^{N_e} q_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial T^*}{\partial y}\, d\Gamma - \sum_{j=1}^{N_e} T_j \int_{\Gamma_j} \frac{\partial q^*}{\partial y}\, d\Gamma \tag{C.4}$$

n_x et n_y sont les composantes selon x et y de la normale sortante à l'élément, $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{r_x}{r}$ où r_x est la composante selon x de r, $\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{r_y}{r}$ où r_y est la composante selon y de r.

Les dérivées de T^* et q^* par rapport aux directions du plan sont facilement calculables analytiquement :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T^*}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2\pi}\ln\frac{1}{r}\right) = \frac{1}{2\pi r}\frac{\partial r}{\partial x} \\
\frac{\partial q^*}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{2\pi}\frac{d}{r^2}\right) = \frac{-1}{2\pi r^2}\left(\left[2\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)^2 - 1\right]n_x + 2\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial r}{\partial y}n_y\right)
\end{aligned} \tag{C.5}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T^*}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{2\pi}\ln\frac{1}{r}\right) = \frac{1}{2\pi r}\frac{\partial r}{\partial y} \\
\frac{\partial q^*}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{2\pi}\frac{d}{r^2}\right) = \frac{-1}{2\pi r^2}\left(\left[2\left(\frac{\partial r}{\partial y}\right)^2 - 1\right]n_y + 2\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial r}{\partial y}n_x\right)
\end{aligned} \tag{C.6}$$

Il reste donc à calculer numériquement les intégrales sur tous les éléments pour chaque point interne.

Eléments linéaires Pour les éléments linéaires, l'équation (C.1) discrétisée s'écrit :

$$T_i = -\sum_{j=1}^{N_e}\left\langle H_{ij}^1\ H_{ij}^2\right\rangle\left\{\begin{array}{c} T_1^j \\ T_2^j \end{array}\right\} + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle G_{ij}^1\ G_{ij}^2\right\rangle\left\{\begin{array}{c} q_1^j \\ q_2^j \end{array}\right\} \tag{C.7}$$

Les températures T^j et les gradients q^j étant connus sur tous les éléments j de la frontière, il reste à évaluer les termes G_{ij}^1, G_{ij}^2, H_{ij}^1, H_{ij}^2 pour chaque point interne i où l'on désire obtenir les résultats.

Le calcul des flux aux points internes se fait directement par dérivation de l'équation précédente selon les deux directions du plan :

$$\begin{aligned}
q_{ix} &= -\sum_{j=1}^{N_e}\left\langle dq_{ij}^{1x}\ dq_{ij}^{2x}\right\rangle\left\{\begin{array}{c} T_1^j \\ T_2^j \end{array}\right\} + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle dT_{ij}^{1x}\ dT_{ij}^{2x}\right\rangle\left\{\begin{array}{c} q_1^j \\ q_2^j \end{array}\right\} \\
q_{iy} &= -\sum_{j=1}^{N_e}\left\langle dq_{ij}^{1y}\ dq_{ij}^{2y}\right\rangle\left\{\begin{array}{c} T_1^j \\ T_2^j \end{array}\right\} + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle dT_{ij}^{1y}\ dT_{ij}^{2y}\right\rangle\left\{\begin{array}{c} q_1^j \\ q_2^j \end{array}\right\}
\end{aligned} \tag{C.8}$$

avec pour $m = x$ ou y :

$$dT_{ij}^{1m} = \frac{L_j}{2}\int_{\xi=-1}^{\xi=1} N_1(\xi)\frac{\partial T^*(\xi)}{\partial m}\,d\xi \qquad dT_{ij}^{2m} = \frac{L_j}{2}\int_{\xi=-1}^{\xi=1} N_2(\xi)\frac{\partial T^*(\xi)}{\partial m}\,d\xi$$

$$dq_{ij}^{1m} = \frac{L_j}{2}\int_{\xi=-1}^{\xi=1} N_1(\xi)\frac{\partial q^*(\xi)}{\partial m}\,d\xi \qquad dq_{ij}^{2m} = \frac{L_j}{2}\int_{\xi=-1}^{\xi=1} N_2(\xi)\frac{\partial q^*(\xi)}{\partial m}\,d\xi$$

Annexe D

Discrétisation de l'équation intégrale pour la méthode de la réciprocité duale

L'équation intégrale obtenue par application de la méthode de la réciprocité duale à l'équation de la chaleur en transitoire s'écrit :

$$c_i T_i + \int_\Gamma T q^* \, d\Gamma - \int_\Gamma q T^* \, d\Gamma = \sum_{k=1}^{Nn+Ni} \alpha_k \left(c_i \hat{T}_{ik} + \int_\Gamma \hat{T}_k q^* \, d\Gamma - \int_\Gamma \hat{q}_k T^* \, d\Gamma \right) \tag{D.1}$$

En discrétisant la frontière en N_e éléments, l'équation intégrale (D.1) devient :

$$c_i T_i + \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} T q^* \, d\Gamma - \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} q T^* \, d\Gamma = \sum_{k=1}^{Nn+Ni} \alpha_k \left(c_i \hat{T}_{ik} + \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} \hat{T}_k q^* \, d\Gamma - \sum_{j=1}^{Ne} \int_{\Gamma_j} \hat{q}_k T^* \, d\Gamma \right) \tag{D.2}$$

Éléments constants Si l'on utilise des éléments constants sur la frontière, le nombre de nœuds est égal au nombre d'éléments $N_e = N_n$, $c_i = \frac{1}{2}$ pour un point i de la frontière et T et q sont constants sur Γ_j. Les fonctions $\hat{T}$ et $\hat{q}$ sont connues mais pour faciliter le calcul du second membre, on les considère également constantes par éléments (ce qui permet de réutiliser les intégrales H_{ij} et G_{ij} calculées pour le premier terme). On note toujours $H_{ij} = \frac{1}{2}\delta_{ij} + \int_{\Gamma_j} q^* \, d\Gamma$ et $G_{ij} = \int_{\Gamma_j} T^* \, d\Gamma$, on a donc pour un point i sur la frontière :

$$\sum_{j=1}^{Ne} H_{ij} T_j - \sum_{j=1}^{Ne} G_{ij} q_j = \sum_{k=1}^{Ne+Ni} \left(\sum_{j=1}^{Ne} H_{ij} \hat{T}_{jk} - \sum_{j=1}^{Ne} G_{ij} \hat{q}_{jk} \right) \alpha_k \tag{D.3}$$

Pour un point i à l'intérieur du domaine, $c_i = 1$. L'équation intégrale s'écrit alors :

$$T_i + \sum_{j=1}^{Ne} H_{ij} T_j - \sum_{j=1}^{Ne} G_{ij} q_j = \sum_{k=1}^{Ne+Ni} \left(\hat{T}_{ik} + \sum_{j=1}^{Ne} H_{ij} \hat{T}_{jk} - \sum_{j=1}^{Ne} G_{ij} \hat{q}_{jk} \right) \alpha_k \tag{D.4}$$

En regroupant les systèmes obtenus pour les N_e points de collocation sur la frontière et les N_i points de collocation à l'intérieur du domaine, on obtient finalement un système de taille $(N_e + N_i)$ que l'on peut mettre

sous la forme :

$$\left[\begin{array}{c|c} \underset{(N_e\times N_e)}{H_f} & \underset{(N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times N_e)}{H_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{I} \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} \underset{(N_e)}{T^f} \\ \hline \underset{(N_i)}{T^i} \end{array}\right\} - \left[\begin{array}{c|c} \underset{(N_e\times N_e)}{G_f} & \underset{(N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times N_e)}{G_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{0} \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} \underset{(N_e)}{q^f} \\ \hline \underset{(N_i)}{0} \end{array}\right\} =$$

$$\left(\left[\begin{array}{c|c} \underset{(N_e\times N_e)}{H_f} & \underset{(N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times N_e)}{H_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{I} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \underset{(N_e\times(N_e+N_i))}{\hat{T}^f} \\ \hline \underset{(N_i\times(N_e+N_i))}{\hat{T}^i} \end{array}\right] - \right.$$

$$\left. \left[\begin{array}{c|c} \underset{(N_e\times N_e)}{G_f} & \underset{(N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times N_e)}{G_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{0} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \underset{(N_e\times(N_e+N_i))}{\hat{Q}^f} \\ \hline \underset{(N_i\times(N_e+N_i))}{0} \end{array}\right]\right) \left\{\begin{array}{c} \underset{(N_e)}{\alpha} \\ \hline \underset{(N_i)}{\alpha} \end{array}\right\} \tag{D.5}$$

ce qui s'écrit plus simplement :

$$[H]\{T\} - [G]\{q\} = \left([H]\left[\hat{T}\right] - [G]\left[\hat{Q}\right]\right)\{\alpha\} \tag{D.6}$$

Éléments linéaires discontinus Le passage aux éléments linéaires se fait comme pour le calcul stationnaire. Les fonctions $\hat{T}$ et $\hat{q}$ sont également interpolées linéairement sur les éléments pour utiliser les mêmes intégrales H^1_{ij} , H^2_{ij} , G^1_{ij} et G^2_{ij} dans le premier et le deuxième terme.

Pour un point de collocation i de la frontière,

$$\frac{1}{2}T_i + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle H^1_{ij}\ H^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} T_{2j-1} \\ T_{2j} \end{array}\right\} - \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle G^1_{ij}\ G^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} q_{2j-1} \\ q_{2j} \end{array}\right\} =$$
$$\sum_{k=1}^{2N_e+N_i}\alpha_k\left(\frac{1}{2}\hat{T}_{ik} + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle H^1_{ij}\ H^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} \hat{T}_{2j-1k} \\ \hat{T}_{2jk} \end{array}\right\} - \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle G^1_{ij}\ G^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} \hat{q}_{2j-1k} \\ \hat{q}_{2jk} \end{array}\right\}\right) \tag{D.7}$$

Pour un point de collocation i à l'intérieur du domaine,

$$T_i + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle H^1_{ij}\ H^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} T_{2j-1} \\ T_{2j} \end{array}\right\} - \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle G^1_{ij}\ G^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} q_{2j-1} \\ q_{2j} \end{array}\right\} =$$
$$\sum_{k=1}^{2N_e+N_i}\alpha_k\left(\hat{T}_{ik} + \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle H^1_{ij}\ H^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} \hat{T}_{2j-1k} \\ \hat{T}_{2jk} \end{array}\right\} - \sum_{j=1}^{N_e}\left\langle G^1_{ij}\ G^2_{ij}\right\rangle \left\{\begin{array}{c} \hat{q}_{jk} \\ \hat{q}_{2j-1k} \end{array}\right\}\right) \tag{D.8}$$

En regroupant les systèmes obtenus pour les $2N_e$ points de collocation de la frontière et les N_i points de collocation à l'intérieur du domaine,

$$\left[\begin{array}{c|c} \underset{(2N_e\times 2N_e)}{H_f} & \underset{(2N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times 2N_e)}{H_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{I} \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} \underset{(2N_e)}{T^f} \\ \hline \underset{(N_i)}{T^i} \end{array}\right\} - \left[\begin{array}{c|c} \underset{(2N_e\times 2N_e)}{G_f} & \underset{(2N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times 2N_e)}{G_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{0} \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} \underset{(2N_e)}{q^f} \\ \hline \underset{(N_i)}{0} \end{array}\right\} =$$

$$\left(\left[\begin{array}{c|c} \underset{(2N_e\times 2N_e)}{H_f} & \underset{(2N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times 2N_e)}{H_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{I} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \underset{(2N_e\times(2N_e+N_i))}{\hat{T}^f} \\ \hline \underset{(N_i\times(2N_e+N_i))}{\hat{T}^i} \end{array}\right] - \right.$$

$$\left. \left[\begin{array}{c|c} \underset{(2N_e\times 2N_e)}{G_f} & \underset{(2N_e\times N_i)}{0} \\ \hline \underset{(N_i\times 2N_e)}{G_i} & \underset{(N_i\times N_i)}{0} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} \underset{(2N_e\times(2N_e+N_i))}{\hat{Q}^f} \\ \hline \underset{(N_i\times(2N_e+N_i))}{0} \end{array}\right] \right) \left\{\begin{array}{c} \underset{(2N_e)}{\alpha} \\ \hline \underset{(N_i)}{\alpha} \end{array}\right\} \tag{D.9}$$

Ce système se met sous la même forme qu'avec des éléments constants :

$$[H]\{T\} - [G]\{q\} = \left([H]\left[\hat{T}\right] - [G]\left[\hat{Q}\right]\right)\{\alpha\} \tag{D.10}$$

Annexe E

Méthodes d'optimisation non linéaires sous contraintes

On cherche à résoudre un problème de minimisation non linéaire sous contraintes non linéaires. D'une manière générale, ce type de problèmes peut se mettre sous la forme (E.1) où f est la fonction objectif, g sont les contraintes inégalités et h les contraintes égalités. Les fonctions f, g et h sont supposées non linéaires.

$$\begin{cases} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, m_g\} \\ h_j(x) = 0 \quad \forall j \in J = \{1, 2, \cdots, m_h\} \end{cases} \tag{E.1}$$

Selon les propriétés des fonctions f, g et h, différentes méthodes sont envisageables pour résoudre ce problème :

- les méthodes déterministes de programmation mathématique qui comprennent :
  - les méthodes de programmation mathématique utilisant les dérivées des fonctions f, g et h,
  - les méthodes de programmation mathématique n'utilisant pas les dérivées,
- les méthodes non déterministes basées sur une exploration plus ou moins aléatoire de l'espace des solutions.

E.1 Optimisation par programmation mathématique

Étant donné le type de problèmes que l'on cherche à résoudre (a priori non linéaires), seules les méthodes d'optimisation non linéaire sans et avec contraintes seront détaillées ici. De plus, on suppose que la fonction et les contraintes sont différentiables (si les dérivées analytiques ne sont pas connues, on les calculera par différences finies). On ne s'intéressera donc qu'aux méthodes utilisant les informations sur les gradients. Ces méthodes permettent d'utiliser plus d'informations sur les fonctions à optimiser et sont donc généralement plus efficaces. Pour plus de détails sur les autres méthodes, on pourra se reporter par exemple aux ouvrages de Minoux [146] ou Fletcher [147].

E.1.1 Méthodes d'optimisation non linéaire sans contraintes

La compréhension des méthodes d'optimisation non linéaire sans contrainte est nécessaire à l'étude des méthodes d'optimisation non linéaire sous contraintes. Certaines méthodes utilisent en effet les mêmes algorithmes de base, la méthode globale étant modifiée pour prendre en compte les contraintes.

On cherche donc dans un premier temps à résoudre le problème (E.2) où la fonction f est non linéaire.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{E.2}$$

Après un rappel des conditions d'optimalité, on présentera rapidement les méthodes de gradient (méthodes du premier ordre) et les méthodes du second ordre.

E.1.1.1 Rappel des conditions d'optimalité

Conditions nécessaires d'optimalité locale Si $f(x)$ est une fonction deux fois continûment différentiable de $\mathbb{R}^n$, une condition nécessaire pour que x^* soit un minimum **local** de f est :
- $\nabla f(x^*) = 0$ (x^* est un point stationnaire)
- le Hessien $\nabla^2 f(x^*) = \left[\frac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_i \partial x_j}\right]$ est une matrice semi-définie positive.

Conditions suffisantes d'optimalité locale Si $f(x)$ est une fonction deux fois continûment différentiable de $\mathbb{R}^n$, une condition suffisante pour que x^* soit un minimum **local** de f est :
- $\nabla f(x^*) = 0$ (point stationnaire)
- le Hessien $\nabla^2 f(x^*)$ est une matrice définie positive

Fonctions convexes La fonction $f(x)$ de $\mathbb{R}^n$ deux fois continûment différentiable est convexe si le Hessien $\nabla^2 f(x)$ est semi-défini positif quel que soit $x \in \mathbb{R}^n$. Dans ce cas, une condition nécessaire et suffisante pour que x^* soit un optimum **global** de f sur $\mathbb{R}^n$ est que $\nabla f(x^*) = 0$.

E.1.1.2 Méthodes de gradient

Les méthodes de gradient utilisent les informations fournies par les dérivées premières de la fonction objectif. On considère donc une fonction f continue, à dérivées premières continues. Ces méthodes consistent à chercher un point stationnaire x^* ($\nabla f(x^*) = 0$) par des procédures itératives. A chaque itération k, on calcule $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$, où d_k est la direction de déplacement choisie.

Le gradient $\nabla f(x^k)$ étant la direction de la plus grande augmentation de f, on se déplace dans la direction opposée :

$$x^{k+1} = x^k - \alpha_k \frac{\nabla f(x^k)}{\|\nabla f(x^k)\|} \text{ avec } \alpha_k > 0 \tag{E.3}$$

Plusieurs méthodes se distinguent selon le choix de la distance parcourue α_k.

Gradient à pas prédéterminé La suite des α_k peut être choisie a priori. On montre que la suite des x^k converge vers x^* sous certaines conditions ($\lim_{k\to\infty} \alpha_k = 0$ et $\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k = +\infty$). Par exemple, on peut utiliser $\alpha_k = \frac{1}{k}$ mais la convergence de la méthode est très lente.

Méthode de la plus forte pente A chaque itération k, α_k est choisi de manière à minimiser $f(x^k - \alpha \nabla f(x^k))$ sur l'ensemble des $\alpha \geq 0$ (par une méthode de minimisation unidimensionnelle). Les directions de descente consécutives sont orthogonales et la vitesse de convergence peut donc être très faible pour des fonctions mal conditionnées (vallées étroites et allongées).

Méthode de la plus forte pente accélérée A chaque itération k, on réalise p étapes de la méthode de la plus forte pente pour obtenir un point y^k. On réalise alors une minimisation unidimensionnelle dans la direction $d^k = y^k - x^k$. La convergence de la méthode est accélérée par rapport à la méthode précédente en particulier pour la minimisation de fonctions mal conditionnées mais elle est plus coûteuse en nombre d'évaluations de la fonction et des gradients.

E.1.1.3 Méthodes de second ordre

Les méthodes de second ordre utilisent en plus les informations fournies par les dérivées secondes de la fonction f ou leurs approximations. On suppose que f est deux fois continûment dérivable et que l'on sait calculer le gradient $\nabla f(x)$ et le Hessien $\nabla^2 f(x)$.

Méthodes de directions conjuguées Un développement en série de Taylor au voisinage d'un optimum local x^* permet d'écrire :

$$f(x) \approx f(x^*) + \frac{1}{2}(x - x^*)^T \nabla^2 f(x^*)(x - x^*) \tag{E.4}$$

avec $\nabla^2 f(x^*)$ défini positif en x^* si f, $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ et $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$ sont continues. Au voisinage de x^*, la fonction f se comporte alors comme une fonction quadratique strictement convexe. Les méthodes de directions conjuguées permettent de déterminer l'optimum de ce type de fonction de n variables en au plus n étapes.

Soit $q(x) = \frac{1}{2}x^T Ax + b^T x + c$ une fonction quadratique quelconque. A partir d'un point initial x^0, on minimise $q(x)$ successivement suivant n directions linéairement indépendantes d_0, d_1, ... , d_{n-1} mutuellement conjuguées par rapport à la forme quadratique $q(x)$. A chaque itération k, $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$ où α_k minimise $q(x^k + \alpha d_k)$. L'optimum du problème est alors :

$$x^n = x^0 + \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j d_j \tag{E.5}$$

Méthode du gradient conjugué pour les fonctions quadratiques Les directions successives sont obtenues par combinaison linéaire du gradient $\nabla q(x^k)$ et des directions précédentes : $d_{k+1} = -\nabla q(x^{k+1}) + \beta_k d_k$ avec $\beta_k = \frac{\nabla q(x^{k+1})^T A d_k}{d_k^T A d_k}$, la direction initiale étant l'opposé du gradient au point initial $d_0 = -\nabla q(x^0)$. Le pas à chaque itération est déterminé par $\alpha_k = -\frac{\nabla q(x^k)^T d_k}{d_k^T A d_k}$.

Méthode de Fletcher et Reeves pour les fonctions quelconques La méthode est identique à la méthode du gradient conjugué mais est applicable aux fonctions f quelconques. Les directions successives sont déterminées à partir des gradients de f et des directions précédentes $d_{k+1} = -\nabla f(x^{k+1}) + \beta_k d_k$ avec $\beta_k = \frac{\|\nabla f(x^{k+1})\|^2}{\|\nabla f(x^k)\|^2}$. Le pas $\alpha_k = \min f(x^k + \alpha d_k)$ est obtenu par optimisation unidimensionnelle. La convergence de la méthode n'est assurée que si l'on procède périodiquement à une réinitialisation de la direction de déplacement à partir du gradient.

Méthodes de Newton Au voisinage de x^k, on remplace f par l'approximation quadratique $q(x) = f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k) + \frac{1}{2}(x - x^k)^T \nabla^2 f(x^k)(x - x^k)$. x^{k+1} est alors le minimum de $q(x)$ si $\nabla q(x^{k+1}) = 0$ soit $x^{k+1} = x^k - \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k)$.

La convergence est obtenue en une itération lorsque la méthode est appliquée à une fonction quadratique strictement convexe mais elle n'est pas assurée pour une fonction quelconque. Pour améliorer la convergence, on peut introduire un pas α_k : $x^{k+1} = x^k - \alpha_k \left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1} \nabla f(x^k)$.

Si le Hessien $\nabla^2 f(x^k)$ est non défini positif, la direction de déplacement n'est pas forcément une direction de descente. La convergence globale n'est donc pas assurée mais on peut perturber le Hessien pour obtenir une matrice définie positive (voir [146] pour plus de détails).

Méthodes quasi-Newton (ou méthodes à métrique variable) Ces méthodes sont des généralisations de la formule itérative de Newton. On remplace l'inverse du Hessien $\left[\nabla^2 f(x^k)\right]^{-1}$ par une matrice approchée $\mathcal{H}_k$ définie positive.

A chaque itération k, $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$. On calcule donc une direction de déplacement $d_k = -\mathcal{H}_k \nabla f(x^k)$ et un pas $\alpha_k = \min f(x^k + \alpha d_k)$ et on met à jour la matrice H pour l'itération suivante. La suite des matrices $\mathcal{H}_k$ converge l'inverse du Hessien.

On note $\delta_k = x^{k+1} - x^k$ et $\gamma_k = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$. Plusieurs formules sont possibles pour approcher la matrice $\mathcal{H}$. En particulier, on pourra utiliser :

– l'algorithme de Davidon, Fletcher, Powell (DFP)

$$\mathcal{H}_{k+1} = \mathcal{H}_k + \frac{\delta_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{\mathcal{H}_k \gamma_k \gamma_k^T \mathcal{H}_k}{\gamma_k^T \mathcal{H}_k \gamma_k} \tag{E.6}$$

– l'algorithme de Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno (BFGS)

$$\mathcal{H}_{k+1} = \mathcal{H}_k + \left[1 + \frac{\gamma_k^T \mathcal{H}_k \gamma_k}{\delta_k^T \gamma_k}\right] \frac{\delta_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{\delta_k \gamma_k^T \mathcal{H}_k + \mathcal{H}_k \gamma_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k} \tag{E.7}$$

La matrice $\mathcal{H}$ est initialisée avec une matrice définie positive (matrice identité par exemple). Des matrices successives définies positives (ce qui est assuré si $\delta_k^T \gamma_k > 0$) permettent de garantir des directions successives de descente. De plus, la convergence globale peut-être assurée en réinitialisant périodiquement la matrice $\mathcal{H}$. Enfin, l'algorithme BFGS est moins sensible que l'algorithme DFP à l'étape de minimisation unidimensionnelle pour déterminer α_k et permet donc d'utiliser des méthodes moins précises et moins coûteuses.

E.1.2 Méthodes d'optimisation non linéaire sous contraintes non linéaires

On cherche maintenant à résoudre le même problème mais soumis à un certain nombre de contraintes (équation E.8) qui peuvent être linéaires ou non et se présenter sous la forme d'égalités (fonctions h) ou d'inégalités (fonctions g). On suppose que f, g et h sont des fonctions continûment différentiables.

$$\begin{cases} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, m_g\} \\ h_j(x) = 0 \quad \forall j \in J = \{1, 2, \cdots, m_h\} \end{cases} \tag{E.8}$$

On note X l'ensemble des solutions possibles (c'est-à-dire vérifiant les contraintes) :

$$X = \{x \in \mathbb{R}^n / g_i(x) \leq 0 \quad \forall i \in I \quad \text{et} \quad h_j(x) = 0 \quad \forall j \in J\} \tag{E.9}$$

Une contrainte active (ou saturée) est une contrainte inégalité pour laquelle l'égalité est vérifiée. On note $I^0(x)$ l'ensemble des indices des contraintes actives :

$$I^0(x) = \{i / i \in I \quad g_i(x) = 0\} \cup J \tag{E.10}$$

E.1.2.1 Rappel des conditions d'optimalité

Sous certaines conditions de qualification des contraintes qui ne sont pas détaillées ici (voir [146]), on peut déterminer des conditions nécessaires d'optimalité.

Conditions de Kuhn-Tucker pour des contraintes inégalités Une condition nécessaire pour que x^* soit un optimum local du problème (E.8) avec $J = \emptyset$ est qu'il existe des $\kappa_i \geq 0$ ($\forall i \in I$) tels que :

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) + \sum_{i \in I} \kappa_i \nabla g_i(x^*) = 0 \\ \kappa_i g_i(x^*) = 0 \quad \forall i \in I \end{cases} \tag{E.11}$$

Conditions de Lagrange pour des contraintes quelconques Une condition nécessaire pour que x^* soit un optimum local du problème (E.8) est qu'il existe des $\kappa_i \geq 0$ ($\forall i \in I$) et des κ_j quelconques ($\forall j \in J$) tels que :

$$\begin{cases} \nabla f(x^*) + \sum_{i \in I} \kappa_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j \in J} \kappa_j h_j(x^*) = 0 \\ \kappa_i g_i(x^*) = 0 \quad \forall i \in I \end{cases} \tag{E.12}$$

Les κ sont appelés mutliplicateurs de Lagrange. On note $\mathcal{L}(x, \kappa)$ la fonction de Lagrange : $\mathcal{L}(x, \kappa) = f(x) + \sum_{i \in I} \kappa_i g_i(x) + \sum_{j \in J} \kappa_j h_j(x)$. La condition de Lagrange s'écrit alors :

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x^*, \kappa) = 0 \\ \kappa_i g_i(x^*) = 0 \quad \forall i \in I \end{cases} \tag{E.13}$$

E.1.2.2 Méthodes de directions réalisables

A partir d'un point de départ x^0 satisfaisant les contraintes, on cherche une direction de déplacement d réalisable telle que :
- un petit déplacement dans cette direction ne fait pas sortir de l'ensemble des solutions,
- $f(x)$ diminue strictement.

Méthode du gradient projeté La méthode du gradient projeté est directement adaptée du cas sans contraintes par projection sur la frontière des solutions réalisables. On progresse alors le long de la frontière en suivant la direction de la plus forte pente projetée.

La direction de déplacement d^k est calculée par projection de $-\nabla f(x)$ sur le sous-espace vectoriel tangent à la surface définie par les contraintes saturées : $d = \frac{\bar{d}}{\|\bar{d}\|}$ avec $\bar{d} = -P\nabla f(x)$. L'opérateur de projection est $P = I - \left[\frac{\partial g^0}{\partial x}\right]^T \left[\frac{\partial g^0}{\partial x} \frac{\partial g^0}{\partial x}^T\right]^{-1} \left[\frac{\partial g^0}{\partial x}\right]$ où g^0 est le vecteur des contraintes saturées.

Le pas de déplacement dans la direction obtenue α_k est celui qui permet de minimiser $f(x^k + \alpha y^k)$ tout en restant dans le domaine des solutions : $\alpha_k = \min f(x^k + \alpha d^k)$.

La convergence globale de la méthode n'est théoriquement pas assurée mais pratiquement, on observe toujours une convergence dans le cas de contraintes linéaires.

Méthode du gradient réduit La méthode du gradient réduit est une généralisation de la méthode du simplexe en programmation linéaire aux problèmes non linéaires à contraintes linéaires (voir par exemple [146] pour des détails sur la méthode du simplexe). On considère le problème sous forme standard (équation (E.14)), c'est-à-dire uniquement avec des contraintes égalités (les contraintes inégalités sont éliminées en introduisant des variables d'écart).

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases} \tag{E.14}$$

Soit B une base extraite de A : $A = [BN]$. Le vecteur des paramètres peut s'écrire $x = [x_B\, x_N]$ et les contraintes $Bx_B + Nx_N = b$. Une variation de f pour un déplacement dx compatible avec les contraintes s'écrit $df = u_N dx_N$ avec $u_N = \frac{\partial f}{\partial x_N} - \frac{\partial f}{\partial x_B} B^{-1} N$ (gradient réduit relativement à B).

A partir d'un point réalisable $x = [x_B\, x_N]$, on se déplace dans une direction $d = [d_N\, d_B]$ avec :
- la direction de déplacement relative aux variables indépendantes d_N définie pour les indices hors base j par $\begin{cases} d_j = 0 \text{ si } d_j > 0 \text{ et } x_j = 0 \\ d_j = -u_j \text{ sinon} \end{cases}$,
- la direction de déplacement suivant les variables de base $d_B = -B^{-1} y_N$.

Si $d_N = 0$, les conditions de Kuhn Tucker sont vérifiées et on a atteint un optimum local (global si la fonction est convexe). Si $d_N \neq 0$, on cherche le pas α qui permet de minimiser $f(x + \alpha d)$.

Méthode du gradient réduit généralisé La méthode précédente peut être adaptée aux problèmes non linéaires (objectifs et contraintes non linéaires mais continûment différentiables). On utilise u_N gradient réduit généralisé tel que $df = u_N.dx_N = \left(\frac{\partial f}{\partial x_N} - \left(\frac{\partial f}{\partial x_B} \right) \left(\frac{\partial g}{\partial x_B} \right)^{-1} \left(\frac{\partial g}{\partial x_N} \right) \right) dx_N$.

Le déplacement suivant les variables de base est alors $d_B = -\left(\frac{\partial g}{\partial x_B} \right)^{-1} \frac{\partial g}{\partial x_N} y_N$.

E.1.2.3 Méthodes par résolution des conditions de Kuhn-Tucker

Les méthodes consistent à rechercher un point de Kuhn-Tucker (vérifiant les conditions nécessaires d'optimalité).

Méthode de Newton pour les problèmes à contraintes égalités Dans ce cas, le problème que l'on cherche à résoudre peut s'écrire selon l'équation (E.15).

$$\begin{cases} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ h_j(x) = 0 \quad \forall j \in J \end{cases} \iff \begin{cases} \nabla f(x) + \sum\limits_{j \in J} \kappa_j \nabla h_j(x) = 0 \\ h_j(x) = 0 \quad \forall j \in J \end{cases} \tag{E.15}$$

La méthode de Newton est une méthode itérative qui consiste à linéariser au voisinage de x^k le système précédent. (x^{k+1}, κ^{k+1}) est alors solution du système :

$$\begin{cases} \nabla f(x^k) + \sum\limits_{j \in J} \kappa_j^k \nabla h_j(x^k) + \left[\nabla^2 f(x^k) + \sum\limits_{j \in J} \kappa_j^k \nabla^2 h_j(x^k) \right] (x^{k+1} - x^k) + \sum\limits_{j \in J} (\kappa_j^{k+1} - \kappa_j^k) \nabla h_j(x^k) = 0 \\ h_j(x^k) + \nabla h_j^T(x^k)(x^{k+1} - x^k) = 0 \end{cases} \tag{E.16}$$

En notant :
- $\mathcal{H}^k = \nabla_x^2 \mathcal{L}(x^k, \kappa^k) = \nabla^2 f(x^k) + \sum_{j \in J} \kappa_j^k \nabla^2 h_j(x^k)$ le Hessien en x de le fonction de Lagrange $\mathcal{L}$ au point (x^k, κ^k),
- $\nabla h^k = \left[\nabla h_1(x^k)\, \nabla h_2(x^k) \cdots \nabla h_p(x^k) \right]^T$ le Jacobien de h au point x^k,

on obtient l'écriture matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}^k & (\nabla h^k)^T \\ \nabla h^k & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{k+1} - x^k \\ \kappa^{k+1} - \kappa^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f(x^k) - (\nabla h^k)^T \kappa^k \\ -h(x^k) \end{pmatrix} \tag{E.17}$$

Au voisinage de l'optimum (x^*, κ^*), la convergence de la méthode est quadratique mais la méthode présente certains inconvénients :

- le système est vérifié pour les minimums, les maximums et les points-cols ;
- la convergence n'est pas assurée pour un point de départ éloigné de l'optimum (la méthode est destinée à être utilisée en conjonction avec d'autres méthodes).

A chaque étape, il est nécessaire de calculer les gradients de f et h et le Hessien en x de la fonction Lagrangienne. Il est possible d'utiliser une méthode de quasi-Newton pour éviter le calcul exact du Hessien à chaque étape (paragraphe E.1.1.3).

Méthode de Wilson pour les problèmes à contraintes égalités ou inégalités La méthode est une extension de la méthode de Newton. En notant $d^k = x^{k+1} - x^k$, le système précédent se met sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \mathcal{H}^k d^k + (\nabla h^k)^T \kappa^{k+1} = -\nabla f(x^k) \\ \nabla h^k d^k = -h(x^k) \end{cases} \tag{E.18}$$

On montre que d^k est solution du problème quadratique suivant :

$$\begin{cases} \min \dfrac{1}{2} d^T \mathcal{H}^k d + \nabla f^T(x^k) d \\ \nabla h^k d + h(x^k) = 0 \end{cases} \tag{E.19}$$

La résolution de ce problème à chaque itération (par exemple par une méthode de gradient réduit) permet d'éviter les points stationnaires, contrairement à la méthode de Newton). La convergence est quadratique au voisinage de l'optimum (si H^k est définie positive).

Dans le cas de contraintes inégalités, on doit résoudre à chaque étape le sous problème quadratique :

$$\begin{cases} \min \dfrac{1}{2} d^T \mathcal{H}^k d + \nabla f^T(x^k) d \\ \nabla g^k d + g(x^k) \leq 0 \end{cases} \tag{E.20}$$

Des variantes existent selon la méthode de résolution du problème quadratique utilisée et l'introduction éventuelle d'un étape de minimisation unidimensionnelle pour déterminer un pas d'avancée dans la direction d (voir par exemple [149]). L'ensemble des variantes sont également désignées par l'appellation programmation quadratique séquentielle (SQP) ou méthodes de Lagrange-Newton.

E.1.2.4 Méthodes de pénalités

Les méthodes de pénalités consistent à transformer un problème sous contraintes en un problème pénalisé équivalent sans contrainte en introduisant une fonction de pénalisation des contraintes η.

$$\begin{cases} \min\limits_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad (i = 1, \cdots, m) \end{cases} \Longleftrightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) + \eta(x) \text{ avec } \eta(x) = \sum_{n=1}^{m} \bar{\eta}(g_i(x)) \tag{E.21}$$

Pénalités extérieures Le problème d'optimisation pénalisé est :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \phi(x, r) = f(x) + r\eta(x) \text{ avec } \eta(x) = \sum_{i=1}^{m} \left(\max\{0, g_i(x)\}\right)^2 \tag{E.22}$$

L'optimisation peut alors être effectuée à l'aide de méthodes non linéaires sans contraintes (gradient conjugué, quasi-Newton...). Le coefficient de pénalité $r > 0$ doit être suffisamment grand pour que le minimum de ϕ

soit proche de l'ensemble des solutions X mais suffisamment faible pour éviter un mauvais conditionnement du problème. En pratique, la résolution est réalisée par itérations en partant d'un r_1 faible et en générant la suite d'optimums $\bar{x}(r)$ avec par exemple $r_{n+1} = 10r_n$ jusqu'à ce que $\eta(\bar{x}(r))$ soit faible (x est proche de l'ensemble X). On montre que pour $r \to \infty$, la suite $\bar{x}(r)$ admet au moins un point d'accumulation et tout point d'accumulation de cette suite est une solution optimale du problème.

Pénalités intérieures La fonction d'optimisation pénalisée est :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \psi(x,t) = f(x) + t\eta(x) \text{ avec } \eta(x) = -\sum_{i=1}^{m} \frac{1}{g_i(x)} \tag{E.23}$$

Comme précédemment, la résolution est itérative à partir de $t_1 > 0$ en générant les optimums par une méthode d'optimisation sans contraintes et en diminuant progressivement t. On montre que, sous certaines conditions sur X et f, pour $t \to 0$, la suite des optimums $\bar{x}(t)$ admet au point d'accumulation et tout point d'accumulation de cette suite est un optimum global du problème.

Combinaison avec d'autres méthodes Les méthodes de pénalités ont une précision faible (problèmes numériques pour r élevé ou t faible) et peuvent donc être utilisées pour déterminer un point de départ pour des méthodes plus précises et à convergence plus rapide au voisinage de l'optimum (méthode de Newton).

E.1.2.5 Méthodes Lagrangiennes classiques

On cherche à résoudre le problème non linéaire suivant :

$$\begin{cases} \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \\ g_i(x) \leq 0 \quad \forall i \in I = \{1, 2, \cdots, m\} \end{cases} \tag{E.24}$$

La théorie de la dualité permet d'affirmer que le problème est résolu si l'on sait trouver un point col (x^*, κ^*) de le fonction de Lagrange $\mathcal{L}(x, \kappa)$, c'est-à-dire un point vérifiant :

$$\begin{cases} \mathcal{L}(x^*, \kappa^*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(x, \kappa^*) \\ g(x^*) \leq 0 \\ \kappa_i^* g_i(x^*) = 0 \quad \forall i \in I \end{cases} \tag{E.25}$$

La recherche d'un tel point col revient à résoudre le problème dual suivant où $\omega(\kappa)$ est la fonction duale :

$$\max_{\kappa \in \mathbb{R}^{m+}} \omega(\kappa) \text{ avec } \omega(\kappa) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(x, \kappa) \tag{E.26}$$

Si les fonctions f et g ne sont pas convexes, la fonction Lagrangienne $\mathcal{L}(x, \kappa)$ n'est pas convexe en x pour κ donné. Les méthodes présentées ne permettent donc que d'obtenir un minimum local de f.

Méthodes d'Uzawa & Arrow-Hurwicz L'algorithme d'Uzawa utilise une méthode de gradient pour résoudre le problème dual. A l'itération k, on calcule x^k minimum en x de $\mathcal{L}(x, \kappa_k)$ et on définit κ^{k+1} par $\kappa^{k+1} = \kappa^k + d^k \nabla\omega(\kappa^k)$, où d^k est le pas (voir les détails sur les méthodes de gradient au paragraphe E.1.1.2).

Dans l'algorithme d'Arrow-Hurwicz, x^k est obtenu par un déplacement dans la direction $-\nabla_x L(x^{k-1}, \kappa^k)$ et pas par minimisation de la fonction Lagrangienne.

Méthode de Dantzig A chaque itération, on résout un problème linéaire sous contraintes (E.27) qui est équivalent au problème dual.

$$\begin{cases} \max\limits_{\kappa,z} z \\ f(x^k) + \sum\limits_{i\in I} \kappa_i g_i(x^k) \leq z \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \\ \kappa \geq 0 \end{cases} \tag{E.27}$$

Lagrangiens augmentés La méthode des Lagrangiens augmentés permet de combiner les méthodes Lagrangiennes et les méthodes de pénalités pour palier au manque de précision de ces dernières.

Pour des contraintes égalités h, on définit la fonction Lagrangienne augmentée $\mathcal{L}(x, \kappa, r)$ que l'on cherche à minimiser (κ est de signe quelconque) :

$$\min_x \mathcal{L}(x, \kappa, r) = f(x) + \sum_{j\in J} \kappa_j h_j(x) + r \sum_{j\in J} (h_j(x))^2 \tag{E.28}$$

Dans le cas de contraintes inégalités g, on introduit des variables d'écart $s_i \geq 0$:

$$\min_x \mathcal{L}(x, \kappa, r) = f(x) + \sum_{i\in I} \kappa_i (g_i(x) + s_i) + r \sum_{i\in I} (g_i(x) + s_i)^2 \tag{E.29}$$

On se ramène donc à une séquence de minimisations sans contrainte. La méthode permet d'obtenir une meilleure précision que les méthodes de pénalités seules pour de plus faibles valeurs de coefficient de pénalité.

E.2 Optimisation non linéaire sous contraintes par des méthodes non-déterministes

Les méthodes non-déterministes font appel à des tirages de nombres aléatoires pour explorer l'espace des solutions. Ces méthodes sont souvent très faciles à mettre en œuvre puisqu'elles ne nécessitent que des calculs directs de la fonction objectif sans avoir besoin des informations sur les dérivées.

On distinguera les méthodes aléatoires (Monte-Carlo et recuit simulé) qui sont basées sur la génération de points successifs de manière aléatoire et les méthodes évolutionnaires (par exemple les algorithmes génétiques) qui font évoluer une population initiale selon des règles établies.

E.2.1 Méthode de Monte-Carlo

Les déplacements depuis un point donné sont effectués aléatoirement et seuls les déplacements permettant de diminuer la fonction objectif sont acceptés. Pour obtenir des résultats statistiquement fiables, il est nécessaire de réaliser un grand nombre d'évaluations de la fonction (à partir de nombreux points de départ) et ce nombre doit être d'autant plus grand que le nombre de paramètres est élevé. Une telle méthode est donc avantageuse par sa simplicité mais nécessite un temps de calcul pénalisant.

L'algorithme correspondant s'écrit donc simplement :

1. Générer un point initial x,
2. Générer un point x' par une opération aléatoire sur x,
3. Si $f(x')$ est meilleur que $f(x)$, alors $x = x'$ et retour en 1. Sinon retour en 2.

E.2.2 Méthode du recuit simulé

Cette méthode a été développée par analogie à la physique (en particulier aux procédés de recuit des matériaux) [150]. La probabilité pour un système physique à l'équilibre à la température T de posséder une énergie donnée E est proportionnelle à $e^{\frac{-E}{kT}}$ où k est la constante de Boltzmann.

Pour simuler l'évolution d'un système vers son équilibre, on effectue un déplacement élémentaire. Si ce déplacement provoque une diminution de l'énergie, il est accepté. Sinon, il est accepté avec une probabilité de $e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$ où ΔE est l'augmentation d'énergie provoquée. Plus la température T est élevée, et plus la probabilité que le déplacement soit accepté est grande. Lorsque l'équilibre est atteint pour une température, celle-ci est diminuée pour recommencer l'opération.

L'application à l'optimisation est directe et permet une bonne exploration de l'espace lors des premières itérations (lorsque la température T est élevée) ce qui augmente les chances d'obtenir un optimum absolu. La convergence de la méthode dépendra toutefois du choix de la température initiale, du critère de changement de température et de la loi d'évolution de la température.

L'algorithme du recuit simulé peut donc s'écrire ainsi :

1. Fixer une température initiale T élevée,
2. Générer un point initial x,
3. Générer un point x' par une opération aléatoire sur x,
4. Si $f(x')$ est meilleur que $f(x)$, alors $x = x'$ et retour en 3. Sinon x est remplacé par x' avec probabilité égale à $e^{\frac{-\Delta f}{T}}$ et retour en 3,
5. Réduire la température T et retour en 3.

La température T est donc un paramètre de contrôle de l'optimisation qui conditionne le nombre d'états accessibles. Si elle est diminuée rapidement, elle conduit à un optimum local (équivalent à une trempe). Si elle est diminuée lentement, il est possible d'atteindre l'équilibre à l'optimum.

E.2.3 Algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques font évoluer une population d'individus grâce aux effets combinés de la sélection, de la recombinaison avec croisement et de la mutation. Des exemples d'implantation et d'applications sont presentes pas exemple par Renders [148]. Ces méthodes permettent de rechercher les solutions dans un espace complexe en ayant un bon compromis entre l'exploitation des meilleures solutions disponibles à un moment donné (comme en programmation mathématique) et l'exploration de l'espace des solutions possibles (comme en recherche aléatoire).

L'algorithme permet l'optimisation globale d'une fonction (fonction d'adéquation) à partir d'une population initiale couvrant l'espace des solutions possibles. Chaque individu est composé d'un ensemble de caractéristiques pouvant prendre plusieurs valeurs et possède une valeur de fonction d'adéquation (avec l'environnement) indépendante des autres individus. On cherche alors la meilleure combinaison de ces valeurs pour obtenir le maximum d'adéquation.

A chaque génération, une nouvelle population du même nombre d'individus est créée par :

1. **évaluation** des individus (calcul de la valeur de la fonction d'adéquation de chaque individu),
2. **sélection** des individus les plus forts (dont la valeur de la fonction d'adéquation est la plus grande),
3. **reproduction** par croisement entre les individus les plus forts et **mutation** (modification aléatoire de certains paramètres).

Les difficultés d'utilisation en optimisation sont liées au choix d'un certain nombre de paramètres comme le codage des paramètres (la représentation des paramètres par un ensemble de gènes), le choix de la fonction d'adéquation, le choix des mécanismes de reproduction et de mutation, les probabilités de sélection et mutation. Les algorithmes génétiques peuvent également être utilisés sans codage des paramètres (Algorithmes Génétiques Codés Réels) ce qui les rend plus adaptés aux problèmes continus mais nécessite la création d'opérateurs de mutation et de croisement adaptés. Pour plus de détails sur ces aspects, on pourra se reporter aux références (par exemple [148]).

Annexe F

Surfaces de réponse des fonctions objectif

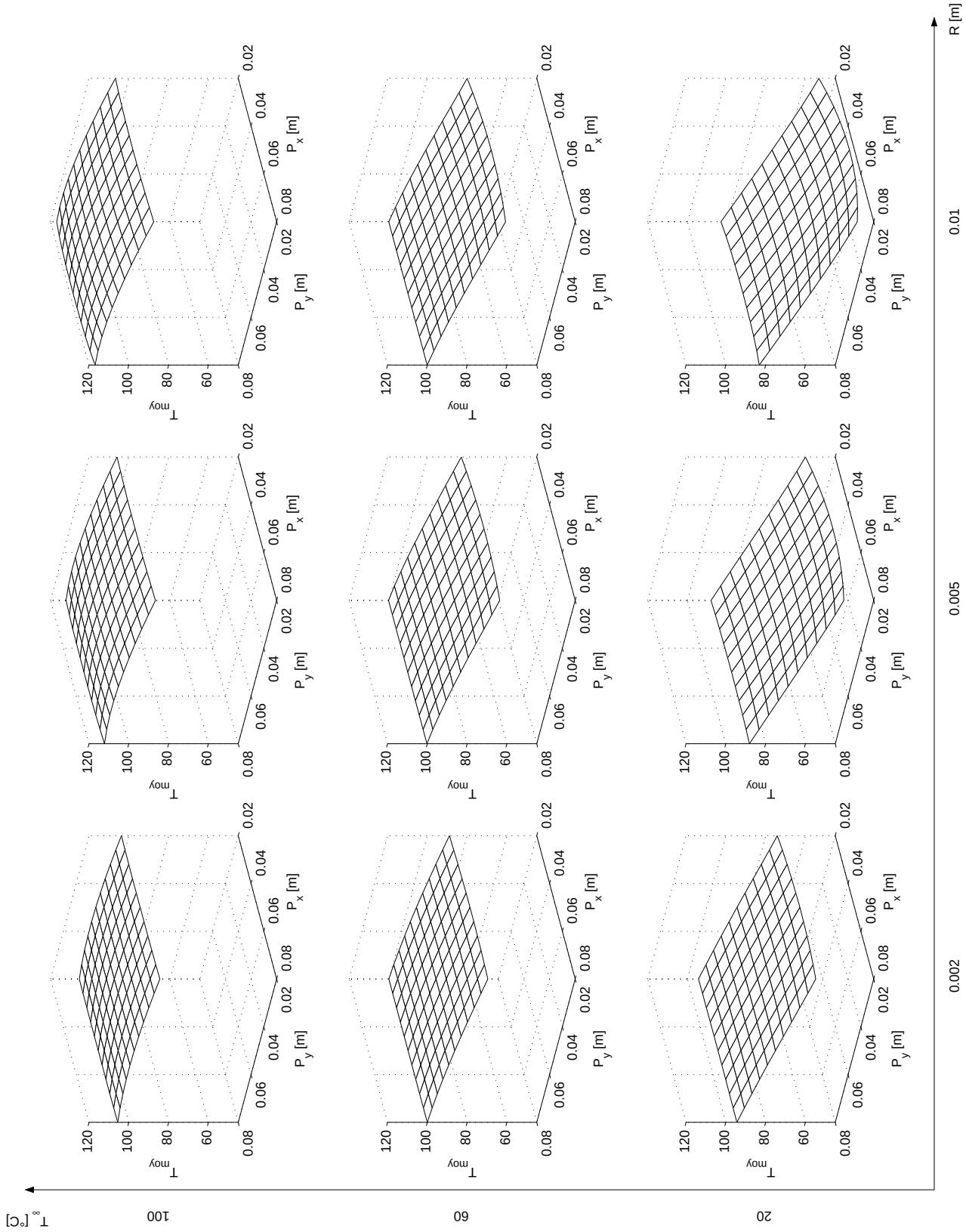


FIG. F.1 – Surfaces décrites par la température moyenne T_{moy} en fonction des paramètres

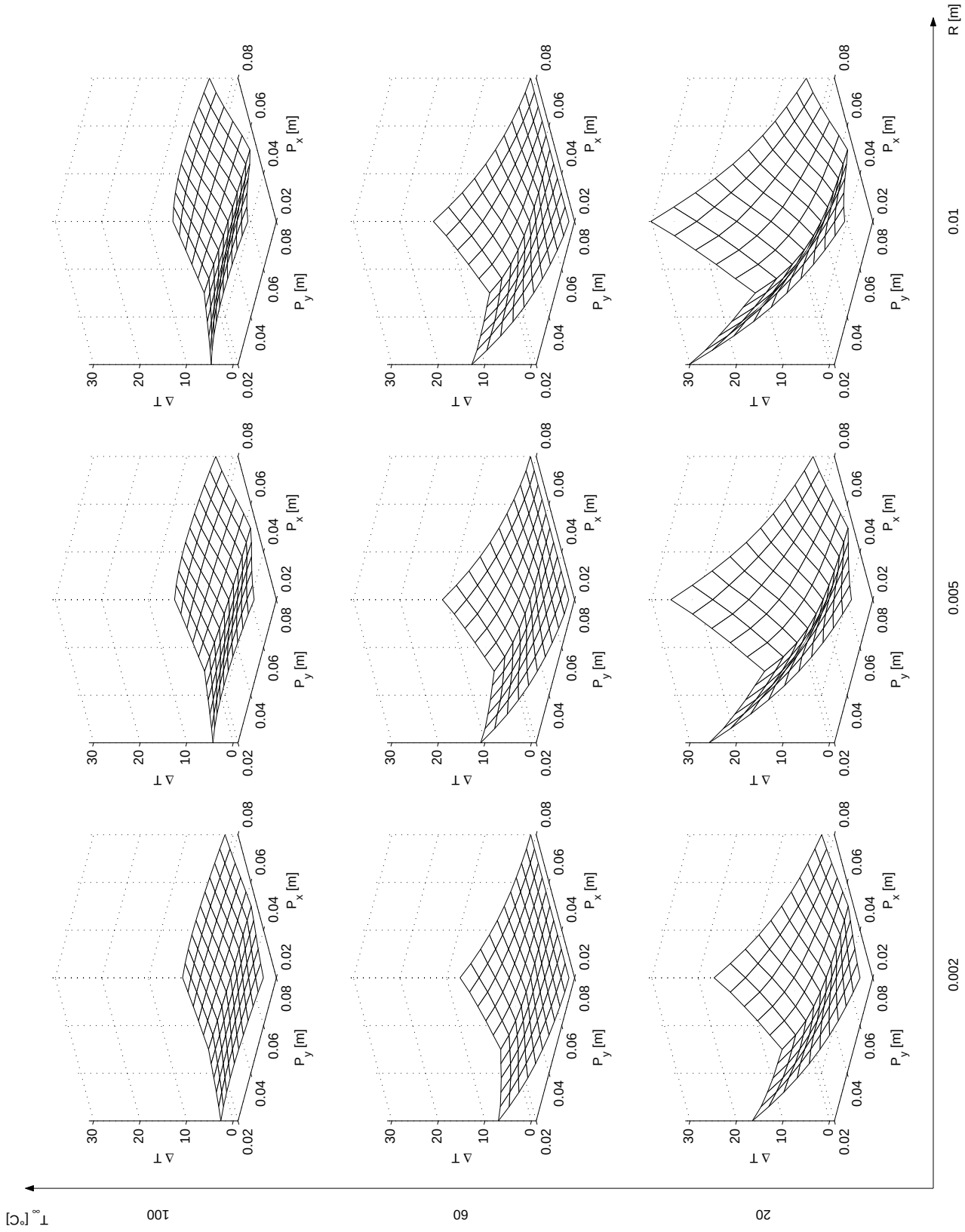


FIG. F.2 – Surfaces décrites par la différence maximale ΔT de température en fonction des paramètres

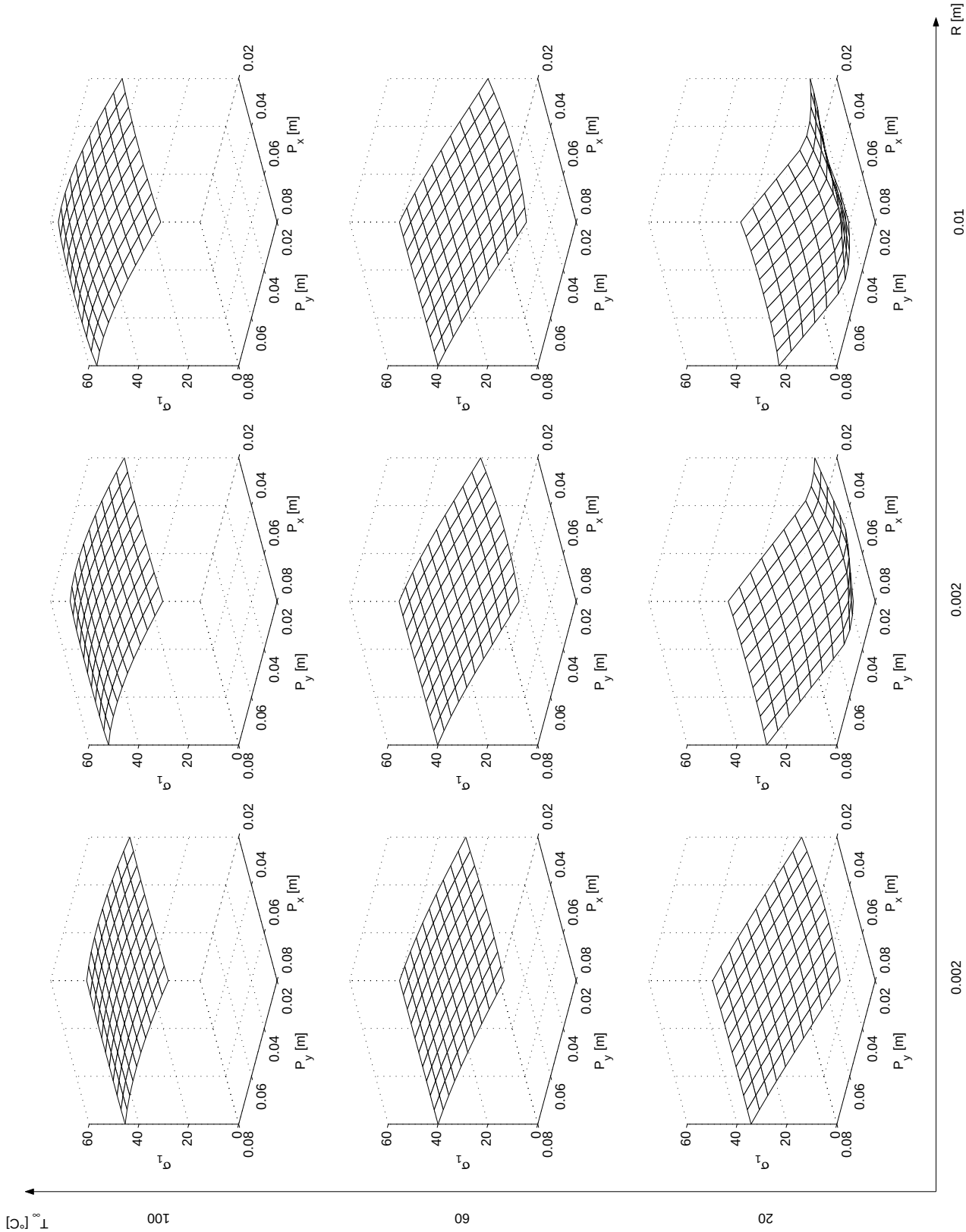


FIG. F.3 – Surfaces décrites par l'écart à la température objectif σ_1 en fonction des paramètres

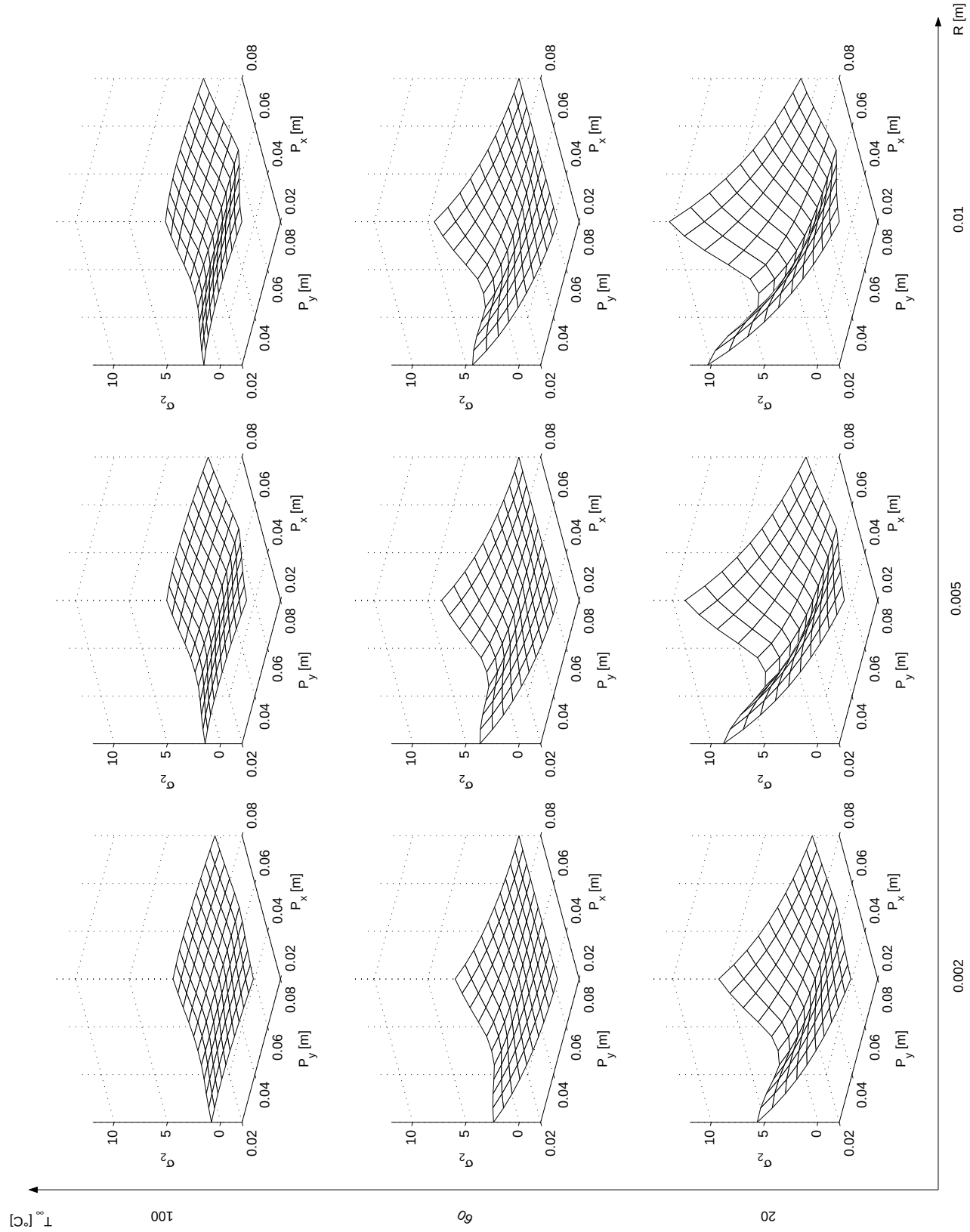


FIG. F.4 – Surfaces décrites par l'écart à la température moyenne σ_2 en fonction des paramètres

Annexe G

Dérivées des fonctions objectifs en fonction des paramètres

Ces équations présentent le principe du calcul des dérivées des fonctions objectifs par rapport à un paramètre d'optimisation dans le cas d'éléments constants. Le calcul pour les éléments linéaires est réalisé de la même manière. Pour chaque objectif, l'expression utilisée pour le calcul numérique est rappelée. L'expression de la dérivée est ensuite développée.

Température moyenne

$$\Phi = T_{moy} = \frac{\int_{\Gamma_M} T \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_e} L_i} \left(\sum_{i=1}^{N_e} T_i L_i \right) \tag{G.1}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\partial T_{moy}}{\partial p} \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^{N_e} L_i\right)^2} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\partial T_i}{\partial p} L_i + \sum_{i=1}^{N_e} T_i \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \sum_{i=1}^{N_e} L_i - \left(\sum_{i=1}^{N_e} T_i L_i \right) \left(\sum_{i=1}^{N_e} \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \right) \tag{G.2}$$

Écart à une température objectif

$$\Phi = \sigma_1 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{\text{obj}}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{\int_{\Gamma_M} \sqrt{(T - T_{obj})^2} \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_e} L_i} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \sqrt{(T_i - T_{obj})^2} L_i \right) \tag{G.3}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\partial \sigma_1}{\partial p} = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^{Ne} L_i\right)^2} \Bigg(\Bigg(\sum_{i=1}^{Ne} \left(\frac{\frac{\partial T_i}{\partial p} (T_i - T_{obj})}{\sqrt{(T_i - T_{obj})^2}} \right) L_i + \sum_{i=1}^{Ne} \left(\sqrt{(T_i - T_{obj})^2} \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \Bigg) \sum_{i=1}^{Ne} L_i \\ - \sum_{i=1}^{Ne} \left(\sqrt{(T_i - T_{obj})^2} \right) \sum_{i=1}^{Ne} \left(\frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \Bigg) \end{aligned} \tag{G.4}$$

Écart à la température moyenne

$$\Phi = \sigma_2 = \frac{\int_{\Gamma_M} \|T - T_{moy}\| \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{\int_{\Gamma_M} \sqrt{(T - T_{moy})^2} \, d\Gamma}{\Gamma_M} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_e} L_i} \left(\sum_{i=1}^{N_e} \sqrt{(T_i - T_{moy})^2} L_i \right) \tag{G.5}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial p} = \frac{\partial \sigma_2}{\partial p} = \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^{Ne} L_i\right)^2} \left(\left(\sum_{i=1}^{Ne} \left(\frac{\left(\frac{\partial T_i}{\partial p} - \frac{\partial T_{moy}}{\partial p}\right)(T_i - T_{moy})}{\sqrt{(T_i - T_{moy})^2}} \right) L_i + \sum_{i=1}^{Ne} \left(\sqrt{(T_i - T_{moy})^2} \frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \right) \sum_{i=1}^{Ne} L_i \right.$$
$$\left. - \sum_{i=1}^{Ne} \left(\sqrt{(T_i - T_{moy})^2} \right) \sum_{i=1}^{Ne} \left(\frac{\partial L_i}{\partial p} \right) \right) \quad \text{(G.6)}$$

Annexe H

Calculs intermédiaires nécessaires aux calculs des dérivées des matrices H et G par rapport aux paramètres d'optimisation

Les dérivées des termes des matrices G et H par rapport aux paramètres d'optimisation se ramènent aux dérivées des coordonnées du maillage $\frac{\partial x}{\partial p}$ et $\frac{\partial y}{\partial p}$. Les détails des calculs intermédiaires sont présentés ici. Pour chaque terme, les expressions à partir desquelles les dérivées sont calculées, sont également rappelées.

Termes G_{ij} et H_{ij} des matrices G et H

$$G_{ij} = \int_{\Gamma_j} \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r} \, d\Gamma = \frac{L_j}{4\pi} \int_{-1}^{1} \ln \frac{1}{r(\xi)} \, d\xi = \frac{L_j}{4\pi} \sum_{k=1}^{N_G} \omega_k \ln \frac{1}{r(\xi_k)}$$

$$H_{ij} = c_i \delta_{ij} + \int_{\Gamma_j} \frac{d}{2\pi r^2} \, d\Gamma = c_i \delta_{ij} + \frac{L_j}{4\pi} \int_{-1}^{1} \frac{d}{r^2(\xi)} \, d\xi = c_i \delta_{ij} + \frac{L_j}{4\pi} \sum_{k=1}^{N_G} \frac{d\omega_k}{r^2(\xi_k)}$$

$$\frac{\partial G_{ij}}{\partial p} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial L_j}{\partial p} \sum_{k=1}^{N_G} \omega_k \ln \frac{1}{r(\xi_k)} + L_j \sum_{k=1}^{N_G} \frac{-\omega_k}{r(\xi_k)} \frac{\partial r(\xi_k)}{\partial p} \right)$$

$$\frac{\partial H_{ij}}{\partial p} = \frac{\partial c_i}{\partial p} \delta_{ij} + \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\partial L_j}{\partial p} \sum_{k=1}^{N_G} \frac{d\omega_k}{r^2(\xi_k)} + L_j \sum_{k=1}^{N_G} \frac{\omega_k}{r^3(\xi_k)} \left(\frac{\partial d}{\partial p} r(\xi_k) - 2d \frac{\partial r(\xi_k)}{\partial p} \right) \right]$$

Longueur d'un élément L_j

$$L_j = \left((x_{j+1} - x_j)^2 + (y_{j+1} - y_j)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\partial L_j}{\partial p} = \frac{1}{L_j} \left[(x_{j+1} - x_j) \left(\frac{\partial x_{j+1}}{\partial p} - \frac{\partial x_j}{\partial p} \right) + (y_{j+1} - y_j) \left(\frac{\partial y_{j+1}}{\partial p} - \frac{\partial y_j}{\partial p} \right) \right] \tag{H.1}$$

Coordonnées x_k, y_k des points d'intégration sur un élément

$$x_k = x(\xi_k) = \frac{1+\xi_k}{2}x_{j+1} + \frac{1-\xi_k}{2}x_j \quad \text{et} \quad y_k = y(\xi_k) = \frac{1+\xi_k}{2}y_{j+1} + \frac{1-\xi_k}{2}y_j$$

$$\frac{\partial x_k}{\partial p} = \frac{1+\xi_k}{2}\frac{\partial x_{j+1}}{\partial p} + \frac{1-\xi_k}{2}\frac{\partial x_j}{\partial p} \quad \text{et} \quad \frac{\partial y_k}{\partial p} = \frac{1+\xi_k}{2}\frac{\partial y_{j+1}}{\partial p} + \frac{1-\xi_k}{2}\frac{\partial y_j}{\partial p} \tag{H.2}$$

Distance r du point de collocation i au point d'intégration k

$$r(\xi_k) = \left((x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{\partial r}{\partial p} = \frac{1}{r}\left[(x_i - x_k)\left(\frac{\partial x_i}{\partial p} - \frac{\partial x_k}{\partial p}\right) + (y_i - y_k)\left(\frac{\partial y_i}{\partial p} - \frac{\partial y_k}{\partial p}\right)\right] \tag{H.3}$$

Composantes r_x, r_y de la distance du point de collocation i au point d'intégration k

$$r_x = x_k - x_i \quad \text{et} \quad r_y = y_k - y_i$$

$$\frac{\partial r_x}{\partial p} = \frac{\partial x_k}{\partial p} - \frac{\partial x_i}{\partial p} \quad \text{et} \quad \frac{\partial r_y}{\partial p} = \frac{\partial y_k}{\partial p} - \frac{\partial y_i}{\partial p} \tag{H.4}$$

Projection d sur la normale de l'élément de la distance du point de collocation i au point d'intégration k

$$d = -\vec{r}.\vec{n} = -r_x n_x - r_y n_y$$

$$\frac{\partial d}{\partial p} = -\frac{\partial r_x}{\partial p}n_x - r_x\frac{\partial n_x}{\partial p} - \frac{\partial r_y}{\partial p}n_y - r_y\frac{\partial n_y}{\partial p} \tag{H.5}$$

Composantes n_x, n_y de la normale à l'élément j

$$n_x = \frac{y_{j+1} - y_j}{L_j} \quad \text{et} \quad n_y = -\frac{x_{j+1} - x_j}{L_j}$$

$$\frac{\partial n_x}{\partial p} = \frac{1}{L_j^2}\left[\left(\frac{\partial y_{j+1}}{\partial p} - \frac{\partial y_j}{\partial p}\right)L_j - (y_{j+1} - y_j)\frac{\partial L_j}{\partial p}\right] \tag{H.6}$$

$$\frac{\partial n_y}{\partial p} = -\frac{1}{L_j^2}\left[\left(\frac{\partial x_{j+1}}{\partial p} - \frac{\partial x_j}{\partial p}\right)L_j - (x_{j+1} - x_j)\frac{\partial L_j}{\partial p}\right] \tag{H.7}$$

Annexe I

Cartes de sensibilité de la température par rapport aux paramètres

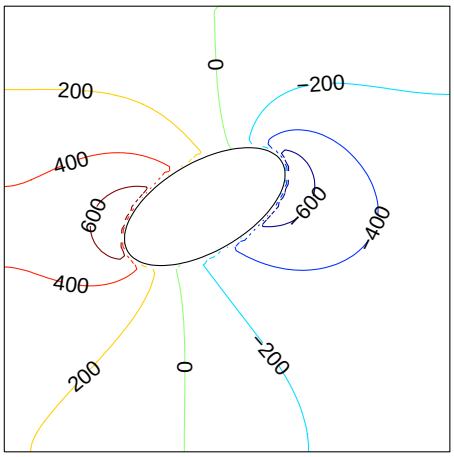


FIG. I.1 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à P_x calculée par différentiation

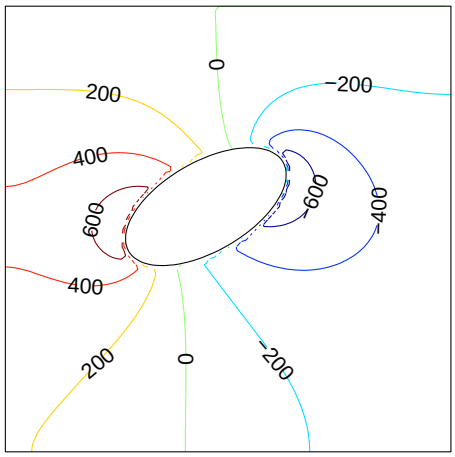


FIG. I.2 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à P_x calculée par différences finies avec $\Delta P_x = 10^{-8}$m

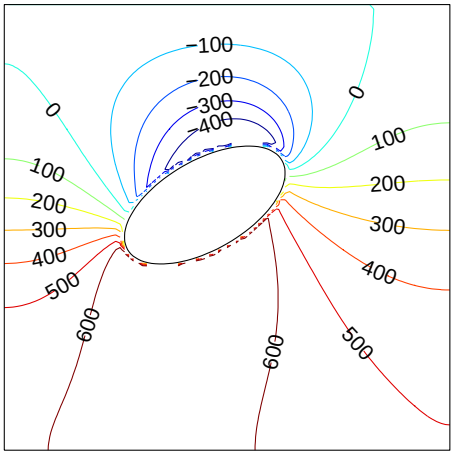


FIG. I.3 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à P_y calculée par différentiation

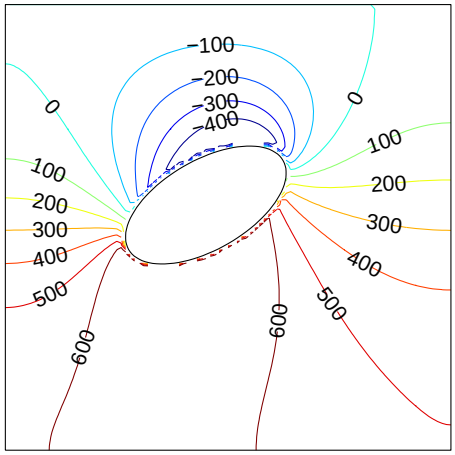


FIG. I.4 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à P_y calculée par différences finies avec $\Delta P_y = 10^{-8}$m

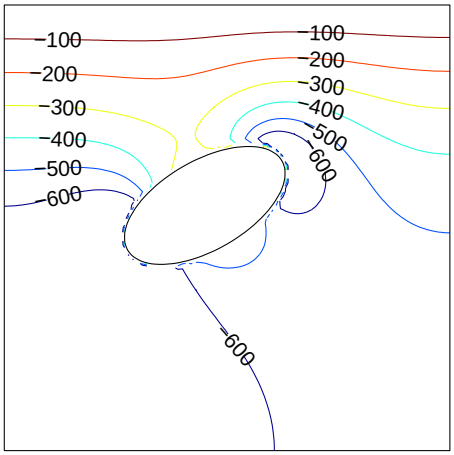


FIG. I.5 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à R_1 calculée par différentiation

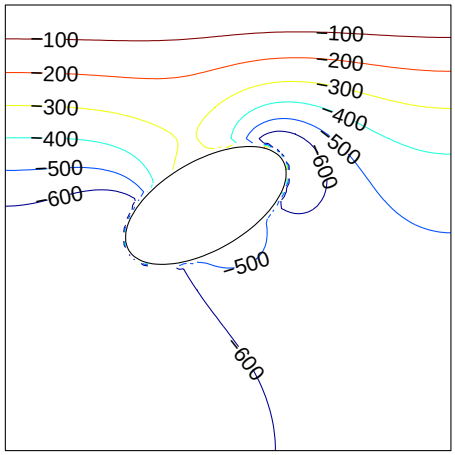


FIG. I.6 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à R_1 calculée par différences finies avec $\Delta R_1 = 10^{-8}$m

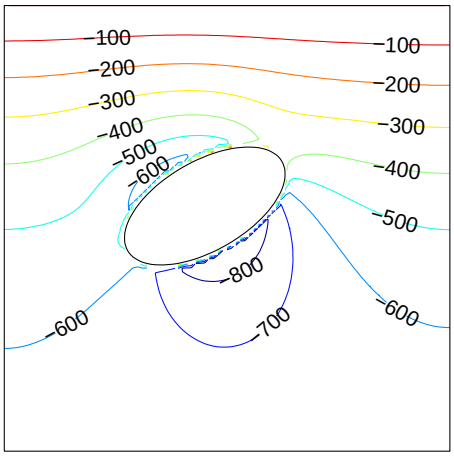


FIG. I.7 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à R_2 calculée par différentiation

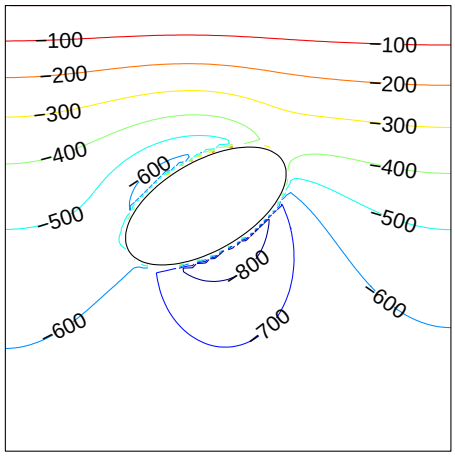


FIG. I.8 – Sensibilité [°C.m^{-1}] de la température par rapport à R_2 calculée par différences finies avec $\Delta R_2 = 10^{-8}$m

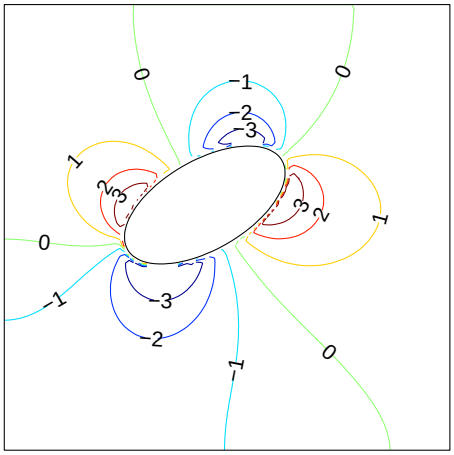


FIG. I.9 – Sensibilité [°C.rad^{-1}] de la température par rapport à α_C calculée par différentiation

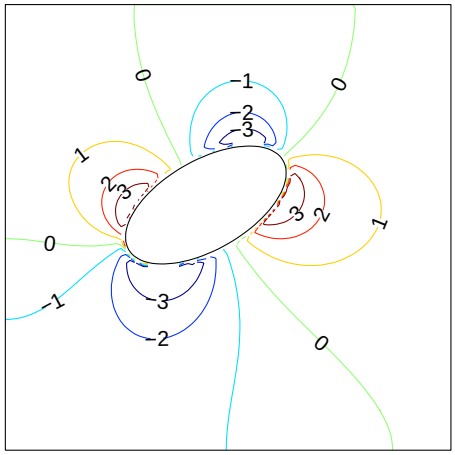


FIG. I.10 – Sensibilité [°C.rad^{-1}] de la température par rapport à α_C calculée par différences finies avec $\Delta\alpha_C = 10^{-8}$rad

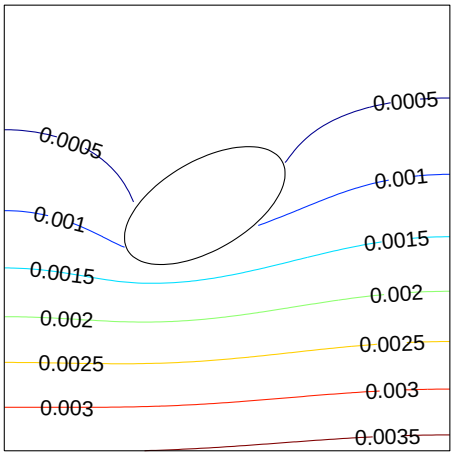


FIG. I.11 – Sensibilité [°C.m^2.W^{-1}] de la température par rapport à ϕ_0 calculée par différentiation

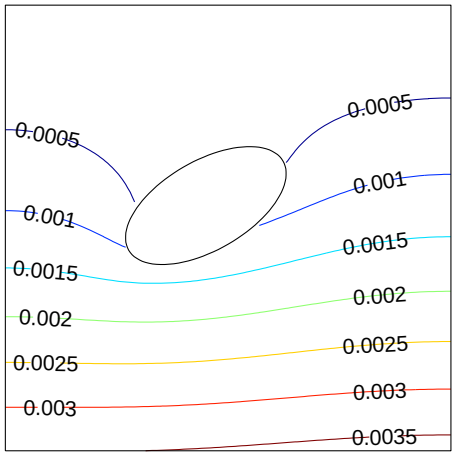


FIG. I.12 – Sensibilité [°C.m^2.W^{-1}] de la température par rapport à ϕ_0 calculée par différences finies avec $\Delta\phi_0 = 1$W.m^{-2}

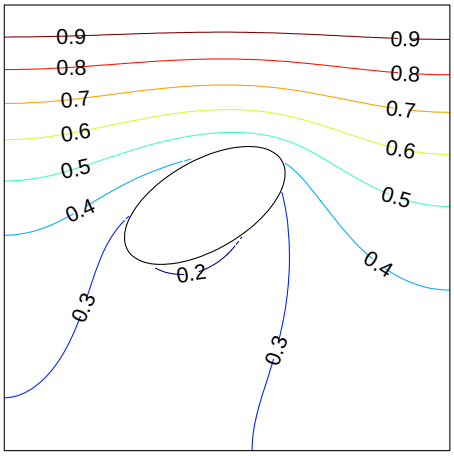


FIG. I.13 – Sensibilité [°C.°C^{-1}] de la température par rapport à T_0 calculée par différentiation

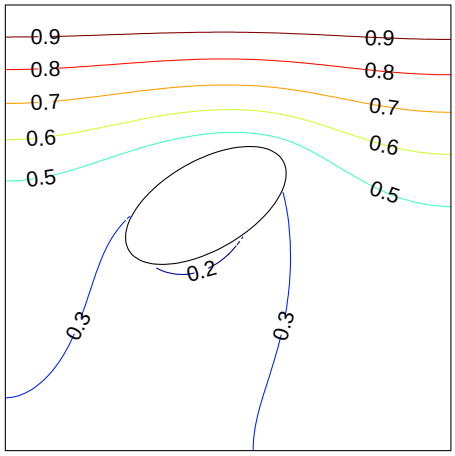


FIG. I.14 – Sensibilité [°C.°C^{-1}] de la température par rapport à T_0 calculée par différences finies avec $\Delta T_0 = 10^{-2}$°C

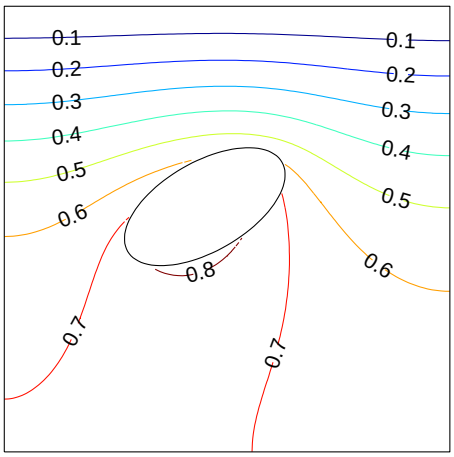


FIG. I.15 – Sensibilité [°C.°C^{-1}] de la température par rapport à T_∞ calculée par différentiation

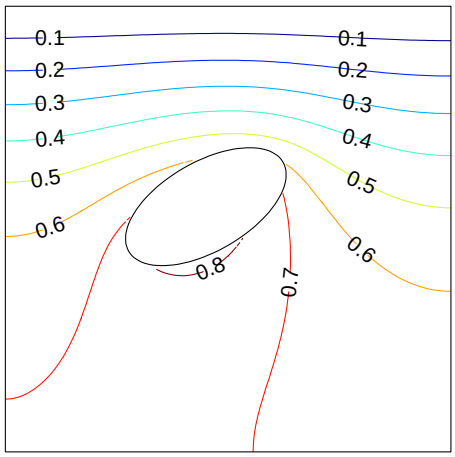


FIG. I.16 – Sensibilité [°C.°C^{-1}] de la température par rapport à T_∞ calculée par différences finies avec $\Delta T_\infty = 10^{-2}$°C

Annexe J

Erreur maximale lors du calcul de la sensibilité de température par rapport aux paramètres d'optimisation par différences finies et différentiation

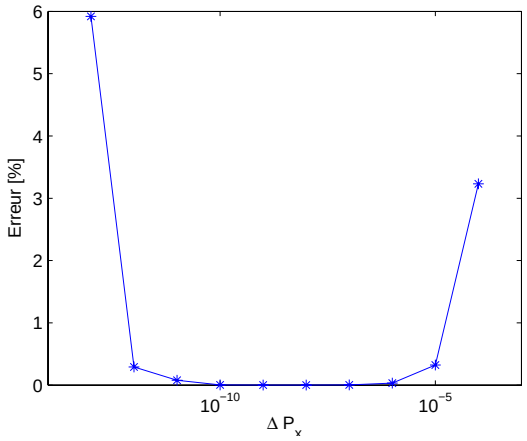


FIG. J.1 – Sensibilité par rapport à P_x

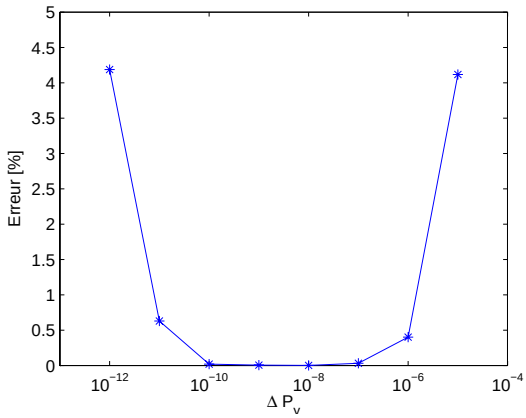


FIG. J.2 – Sensibilité par rapport à P_y

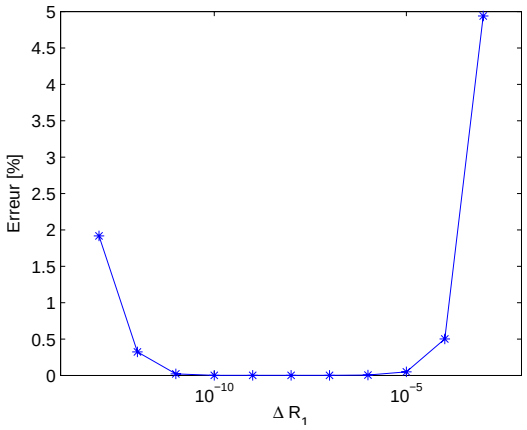


FIG. J.3 – Sensibilité par rapport à R_1

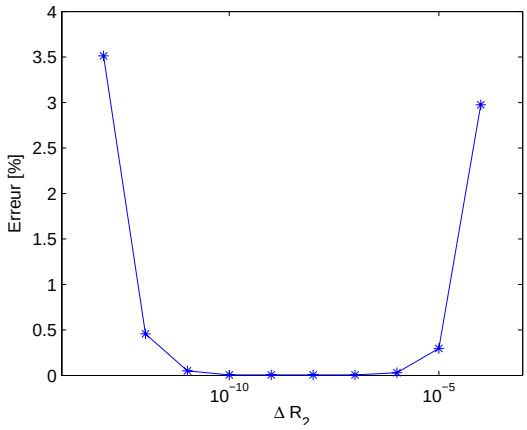


FIG. J.4 – Sensibilité par rapport à R_2

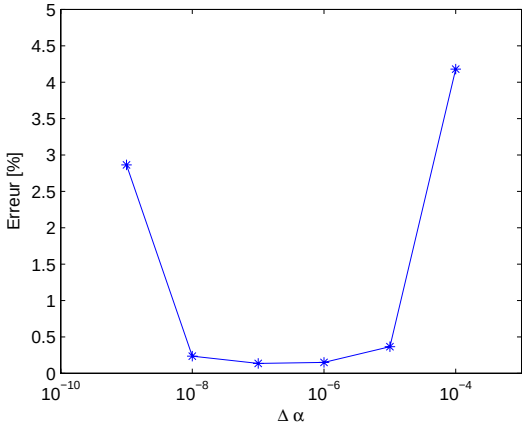


FIG. J.5 – Sensibilité par rapport à α_C

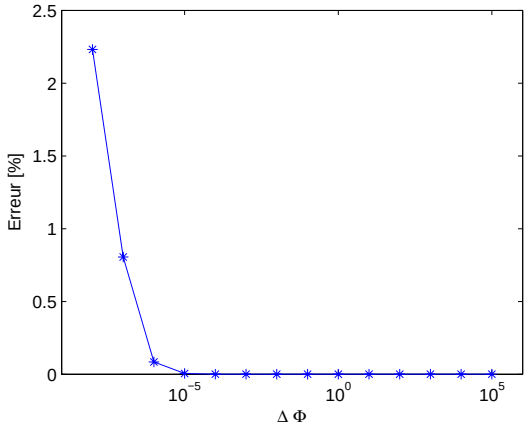


FIG. J.6 – Sensibilité par rapport à ϕ_0

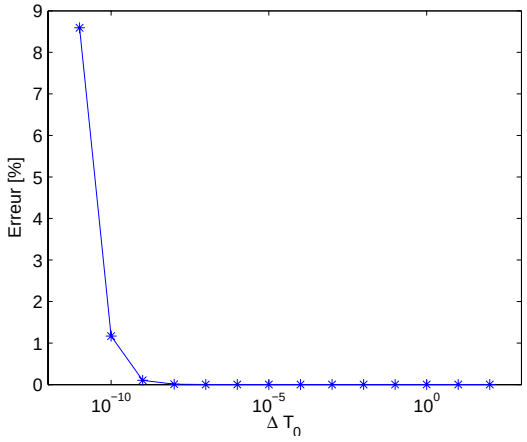


FIG. J.7 – Sensibilité par rapport à T_0

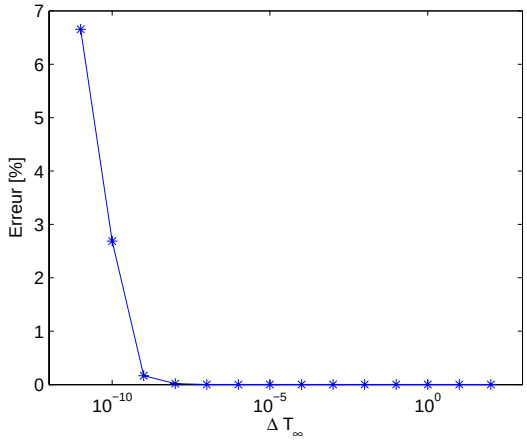
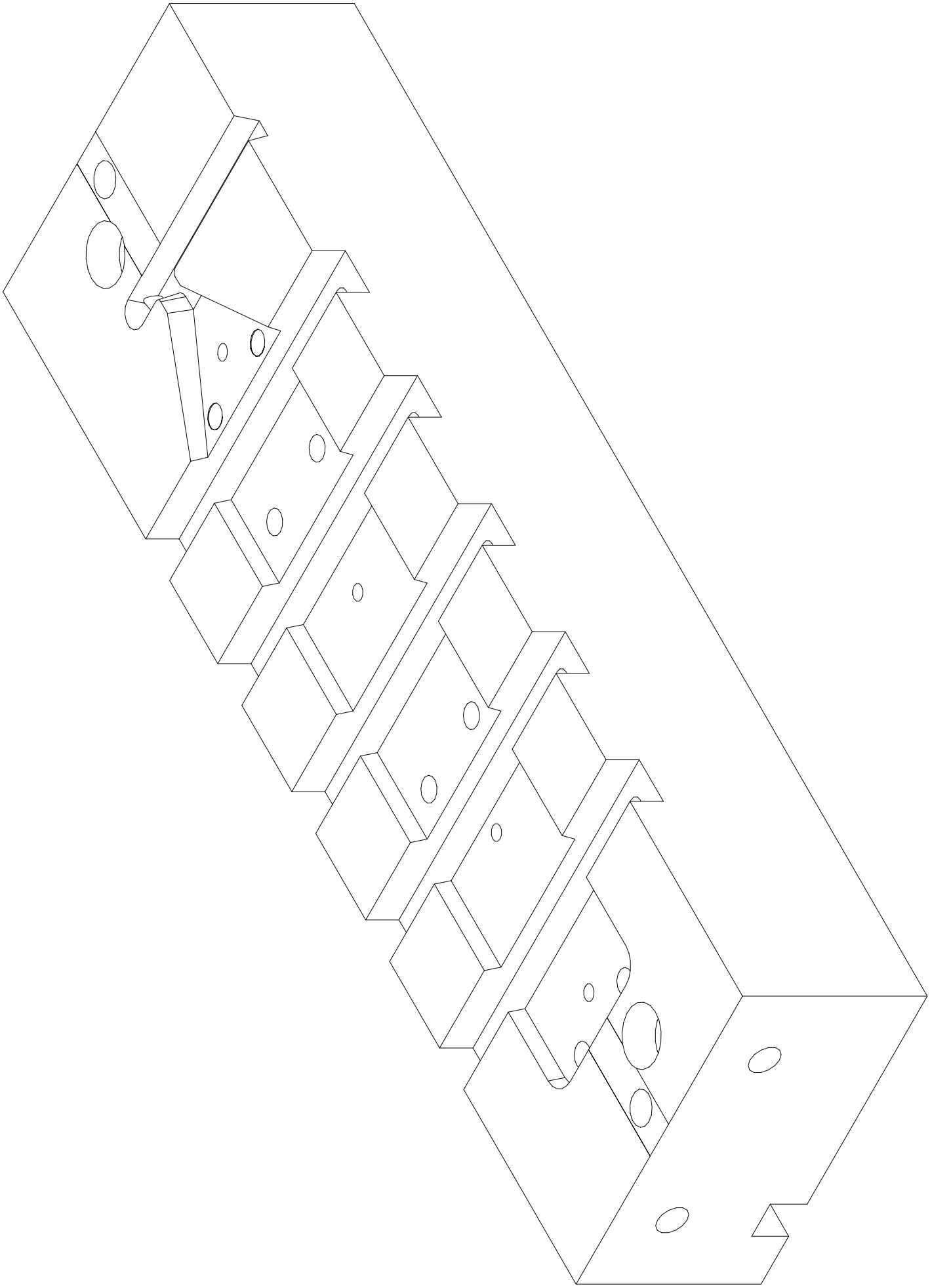


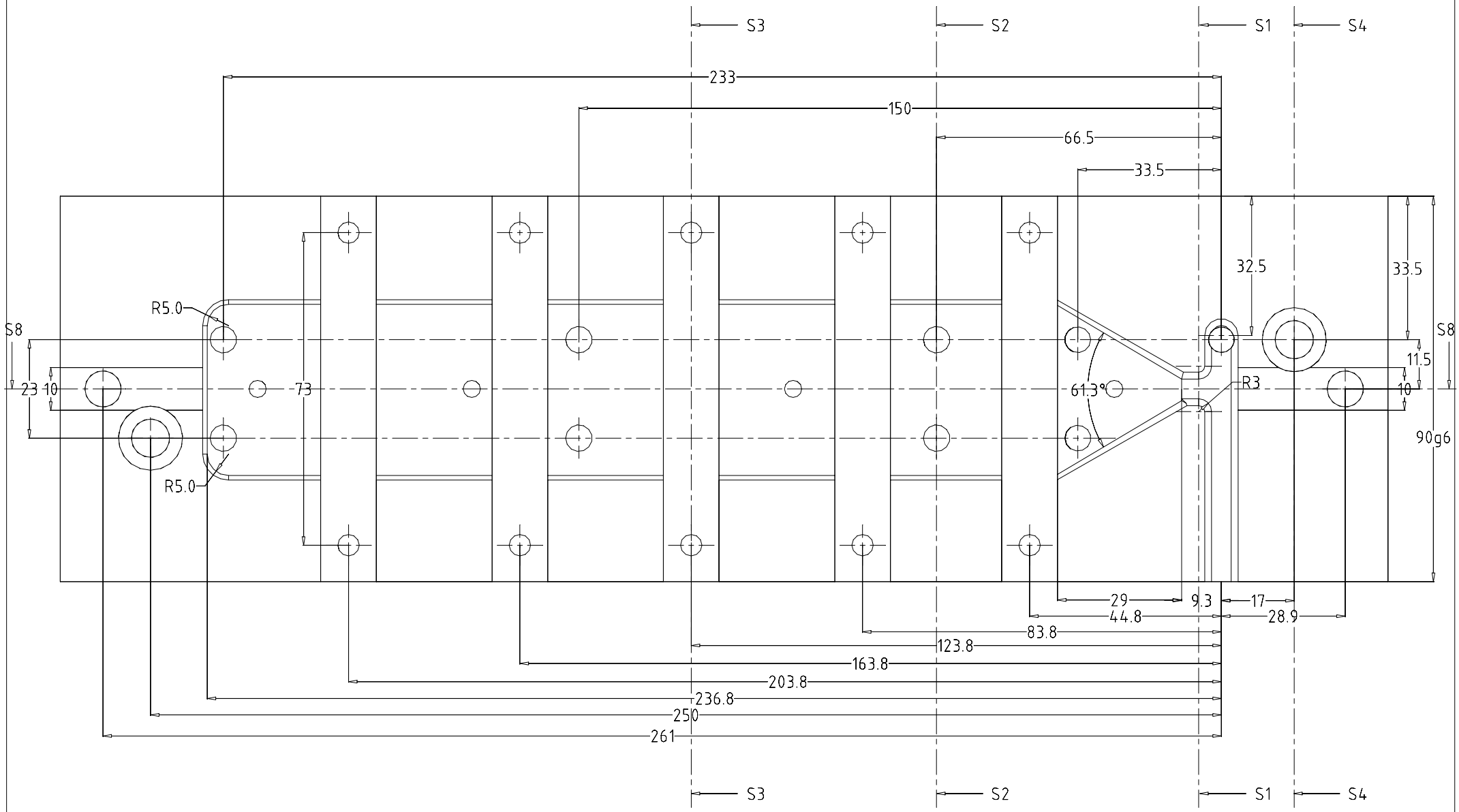
FIG. J.8 – Sensibilité par rapport à T_∞

Annexe K

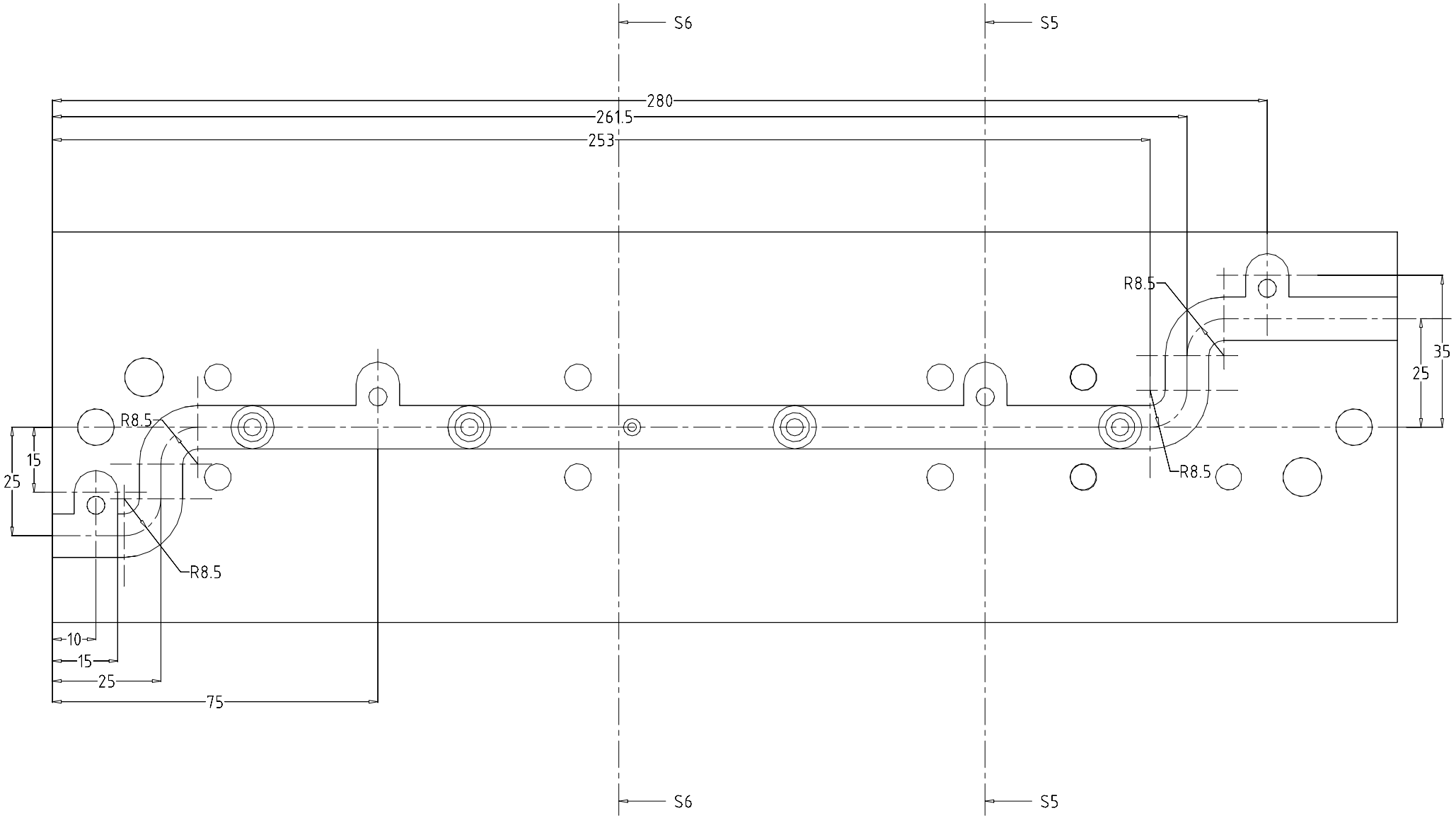
Plans de l'insert massif original



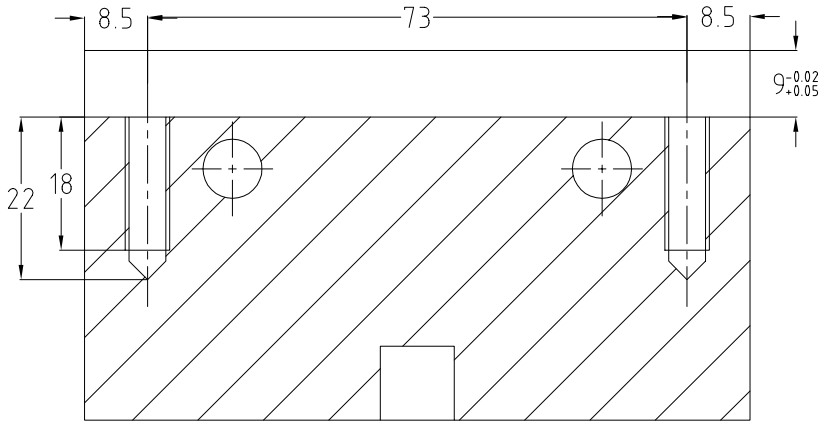
Insert rectangulaire 4 capteurs



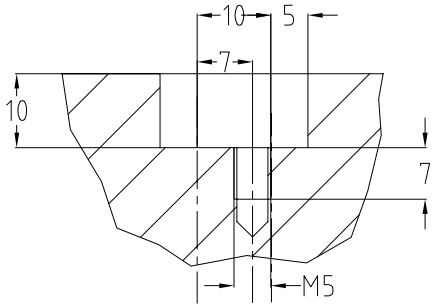
Ech : 0.8


S6
S5
280
261.5
253
R8.5
R8.5
R8.5
R8.5
35
25
15
25
10
15
25
75
S6
S5

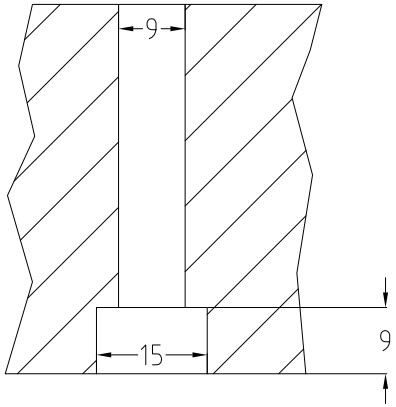
S3 Section logement de la clavette parallele



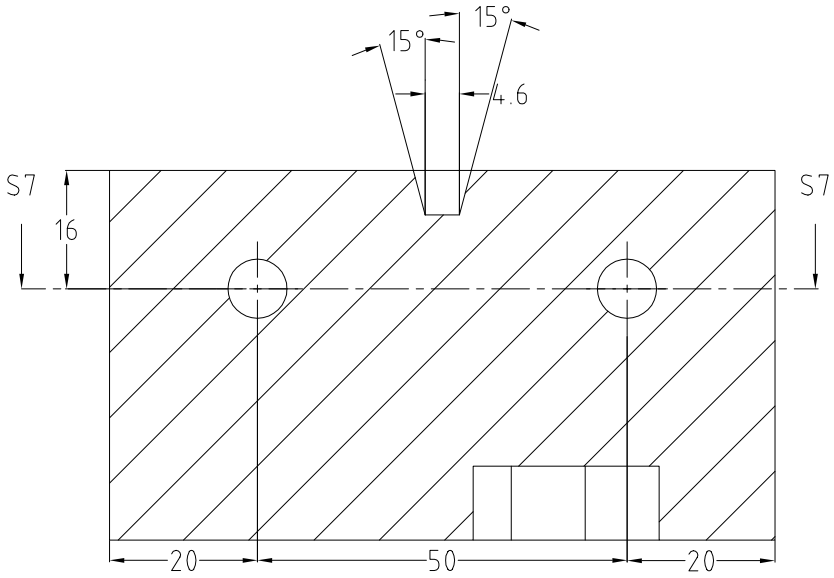
S5 Détail logement vis M5



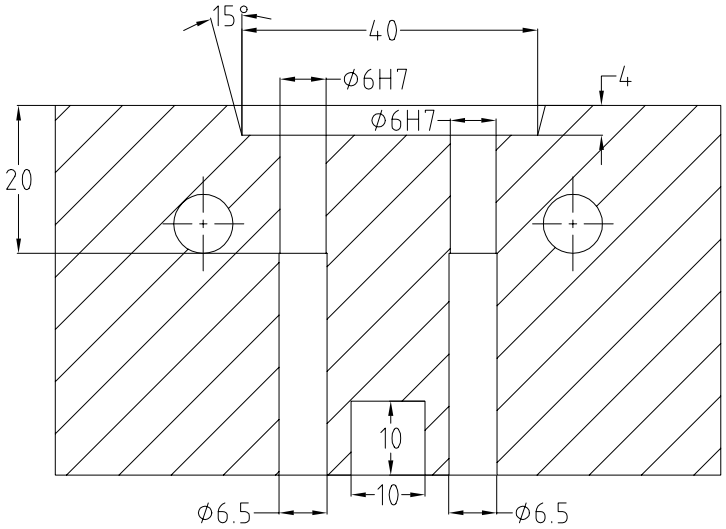
S4 Détail logement vis M8



S2 Section du passage des canaux de refroidissement et du canal d'entree

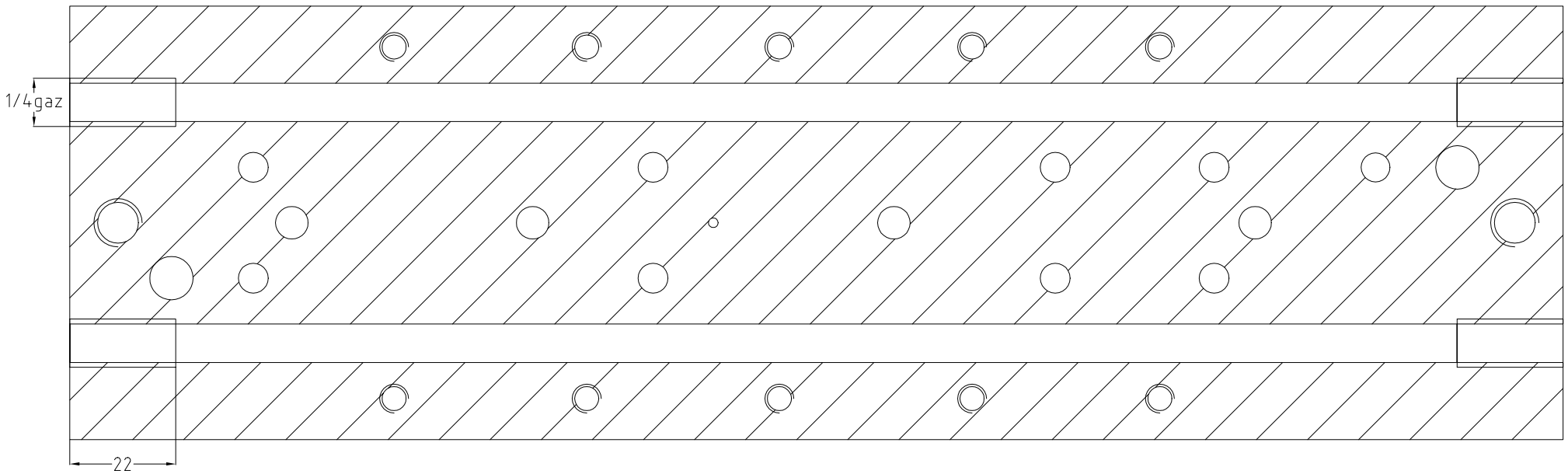


S1 Section type du passage des ejecteurs, de l'empreinte et du canal

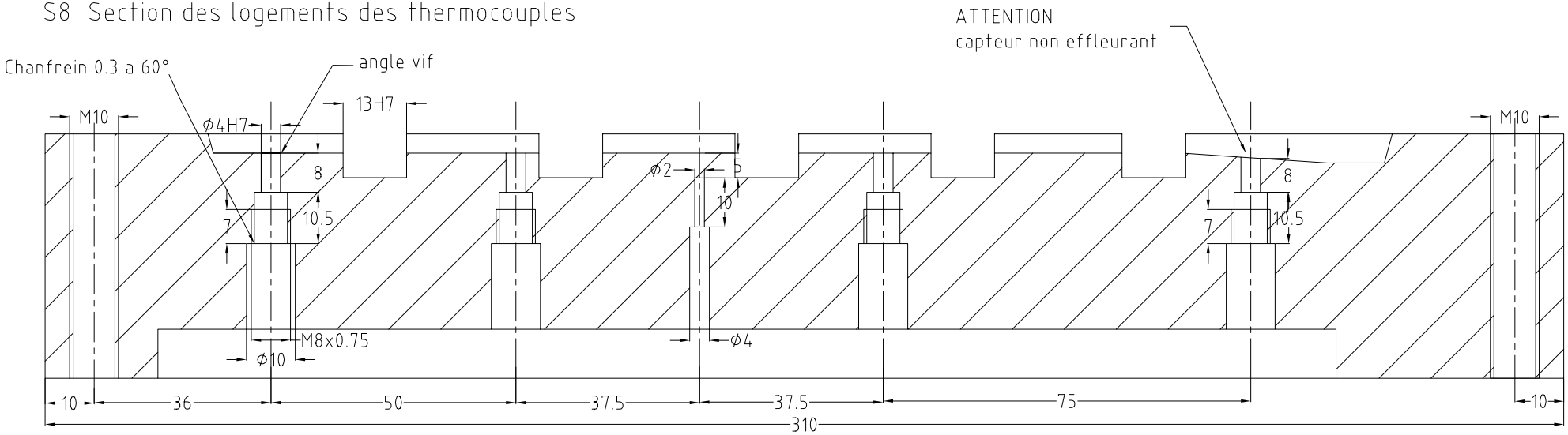


Ech 1/1

S7 Section 4 X Taraudage 1/4 gaz longueur 22



S8 Section des logements des thermocouples



Ech : 0.8

Annexe L

Données fournisseur de l'acier 40CMD8S

Vergütbarer Kunststoffformenstahl

Chemische Zusammensetzung in Massen-%

C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni	Mo	V	W
0,38	0,30	1,50	0,020	0,070	2,00		0,20		
0,35-0,45	0,30-0,550	1,40-1,60	≤ 0,030	0,050-0,100	1,80-2,10		0,15-0,25		

Richtanalyse DIN-Analyse

W.-Nr. 1.2312
DIN 40CrMnMoS8-6

AFNOR 40CMD8S
AISI ~ P20+S
BS ~ P20+S

Werkstoffeigenschaften und Verwendung

Werkstoffcharakteristik	Sehr gut zerspanbarer Kunststoffformenstahl. Aufgrund des geregelten Schwefelgehaltes nicht zum Polieren, Narben, Hartverchromen und Oberflächenbeschichten geeignet.
Für welche Werkzeuge	Kernbauteile für Press- und Spritzwerkzeuge, Formaufbauten.
Für welche Kunststoffe	Thermoplaste, Duroplaste bei Presswerkzeugen
Lieferzustand	Vergütet auf 280-325 HB ≙ 950-1100 N/mm²

Physikalische Eigenschaften

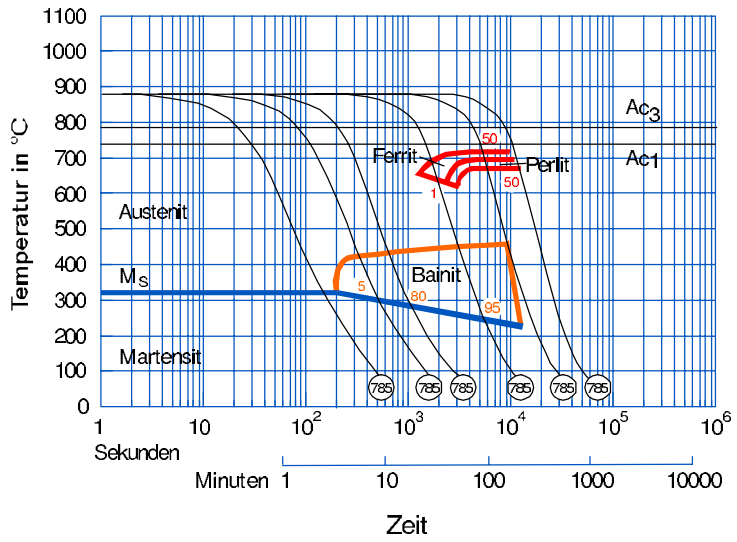
			Temperatur 20°C	250°C	500°C
Wärmeausdehnungskoeffizient	α	(10^{-6}/K)	11,6	12,8	14,3
Wärmeleitfähigkeit	λ	(W/mK)	34,0	33,5	33,0
Spezifische Wärmekapazität	$\bar{c}_p$	(J/kgK)	461	508	558
Temperaturleitfähigkeit	a	($10^{-6}m^2/s$)	11,0	9,6	7,0
Spez. elektrischer Widerstand	ρ	($\mu\Omega$ m)	0,26	0,43	0,69
E-Modul	E	(kN/mm²)	212	197	175

Buderus
EDELSTAHL

2312

Wärmebehandlung

	Temperatur	Haltezeit in Minuten je 100 mm Wanddicke	Abkühlung	Härte
Spannungsarmglühen	ca. 550 °C, vergüteter Zustand	120	Ofen	
Weichglühen	720 °C	240	Ofen	
Härten	880 °C	100	Öl, Warmbad oder Vakuum	max. 52 HRC
Anlassen	siehe Anlass-Schaubild	240	Luft	280-325 HB



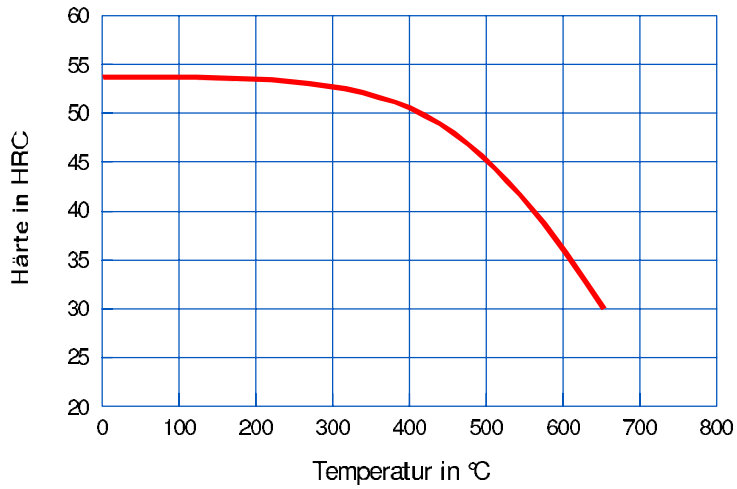
ZTU-Schaubild

kontinuierlich
Austenitisierungstemp.: 880 °C

80 *Gefügeanteil in %*

○ *Härte in HV*

Abkühlkurven ermittelt für Bezugsdurchmesser 50, 100, 200, 500, 1000 und 1500 mm



Anlass-Schaubild

Mittelwerte an Proben mit der Abmessung 25 x 50 mm, gehärtet bei 880 °C in Öl

Annexe M

Données fournisseur de l'ABS Novodur® P2H-AT

Novodur P2H-AT

Injection molding grades / General purpose grades standard impact strength, easy flowing, high gloss, contains antistatic additive

ISO Shortname ISO 2580-ABS 1,MGZ,095-25-16-25

	Property	Test Condition	Unit	Standard	Value
Rheological properties					-
C	Melt volume-flow rate	220 °C; 10 kg	cm³/(10 min)	ISO 1133	37
C	Molding shrinkage, parallel	60x60x2	%	ISO 294-4	0.4 - 0.6
C	Molding shrinkage, normal	60x60x2	%	ISO 294-4	0.4 - 0.6
Mechanical properties (23 °C/50 % r.h.)					
C	Tensile modulus	1 mm/min	MPa	ISO 527-1,-2	2500
C	Yield stress	50 mm/min	MPa	ISO 527-1,-2	44
C	Yield strain	50 mm/min	%	ISO 527-1,-2	2.1
	Strain at break	50 mm/min	%	acc. ISO 527-1,-2	>15
C	Tensile creep modulus	1 h	MPa	ISO 899-1	2200
C	Tensile creep modulus	1000 h	MPa	ISO 899-1	1500
C	Charpy impact strength	23 °C	kJ/m²	ISO 179-1eU	100
C	Charpy impact strength	-30 °C	kJ/m²	ISO 179-1eU	80
C	Charpy notched impact strength	23 °C	kJ/m²	ISO 179-1eA	16
C	Charpy notched impact strength	-30 °C	kJ/m²	ISO 179-1eA	7
	Izod notched impact strength	23 °C	kJ/m²	ISO 180-1A	16
	Izod notched impact strength	-30 °C	kJ/m²	ISO 180-1A	7
	Flexural modulus	2 mm/min	MPa	ISO 178	2400
	Flexural strength	2 mm/min	MPa	ISO 178	70
	Ball indentation hardness		N/mm²	ISO 2039-1	110
Thermal properties					
C	Temperature of deflection under load	1.80 MPa	°C	ISO 75-1,-2	93
C	Temperature of deflection under load	0.45 MPa	°C	ISO 75-1,-2	97
C	Vicat softening temperature	50 N; 50 °C/h	°C	ISO 306	98
C	Coefficient of linear thermal expansion, parallel	23 to 55 °C	10^{-4}/K	ISO 11359-1,-2	0.9
C	Burning behavior UL 94 (1.6 mm)	1.6 mm	Class	UL 94	HB
	Burning rate (US-FMVSS)	2.0 mm	mm/min	ISO 3795	60
	Glow wire test (GWFI)	2.0 mm	°C	IEC 60695-2-12	700
Electrical properties (23 °C/50 % r.h.)					
C	Relative permittivity	100 Hz	-	IEC 60250	3.0
C	Relative permittivity	1 MHz	-	IEC 60250	2.9
C	Dissipation factor	100 Hz	10^{-4}	IEC 60250	55
C	Dissipation factor	1 MHz	10^{-4}	IEC 60250	90
C	Volume resistivity		Ohm·m	IEC 60093	1E13
C	Surface resistivity		Ohm	IEC 60093	1E15
C	Electric strength	1 mm	kV/mm	IEC 60243-1	34
C	Comparative tracking index CTI	Solution A	Rating	IEC 60112	600
Other properties (23 °C)					
C	Density		kg/m³	ISO 1183	1050
Processing conditions for test specimens					
C	Injection molding-Melt temperature		°C	ISO 294	240
C	Injection molding-Mold temperature		°C	ISO 294	70
C	Injection molding-Injection velocity		mm/s	ISO 294	240

Annexe N

Données constructeur des capteurs de température Kistler®

KISTLER
mesurer. analyser. innover.

Capteur

pour la saisie de la température

Type 6192A..., 6193A..., 6194A...

Capteurs de température pour l'enregistrement des températures de contact directement à la surface solidifiée de la matière fondue dans la cavité.

- Câble intégré haute température avec connecteur «Fischer»
- Compatible avec les capteurs standards de pression dans l'empreinte Types 6157B..., 6159A... et 6183A...

Description

Les capteurs de température de types 6192A…, 6193A... et 6194A… peuvent être montés partout où se montent les capteurs standards de pression dans l'empreinte de 2,5 mm et 4 mm de diamètre frontal. Le principe de mesure s'appuie sur les thermocouples de type K, lesquels ont été optimisés quant à leur vitesse de réaction. Plus la masse d'un thermocouple est faible, plus sa réaction aux variations de température est rapide. On a utilisé cette caractéristique en amenant séparément les conducteurs du thermocouple vers la face du capteur et on les a soudés là pour former le thermocouple. C'est pourquoi la face du capteur ne peut pas être rectifiée.

Le thermocouple de Type K est utilisé dans cette application à cause de l'avantage technique que représente sa résistance à la corrosion.

Application

Ces capteurs mesurent la température de contact à la surface solidifiée de la matière fondue dans la cavité. Les valeurs de la température peuvent être utilisées à des fins de surveillance ou de régulation, par exemple, pour le réglage de chauffe du moule en cours d'opération. Ces valeurs permettent également de calculer la température effective de la matière fondue à l'intérieur du moule.

Type 6193A... (Ø1 mm) **Type 6194A... (Ø2,5 mm)** **Type 6192A... (Ø4 mm)**

Données techniques Types 6192A..., 6193A... et 6194A...

Elément thermique	Type	K (NiCr-Ni)
		IEC584 Kl 1
Gamme de température d'utilisation		
Moule (capteur, câble, connecteur)	°C	0 ... 200
Matière fondue (face du capteur)	°C	≤1250
Gamme de pression	bar	0 ... 2000
Matériau du corps du capteur		17-4PH
Fils	+	vert
	–	blanc

000-363f-10.03 (DB18.6192f)

Cette information correspond à l'état actuel de nos connaissances. Kistler se réserve le droit de procéder à des modifications techniques. Toute responsabilité quant à des dommages consécutifs à l'utilisation de produits Kistler est exclue.

©2003, Kistler Instrumente AG, Case postale, Eulachstr. 22, CH-8408 Winterthur
Tel +41 52 224 11 11, Fax 224 14 14, info@kistler.com, www.kistler.com

KISTLER
mesurer. analyser. innover.

Dimensions

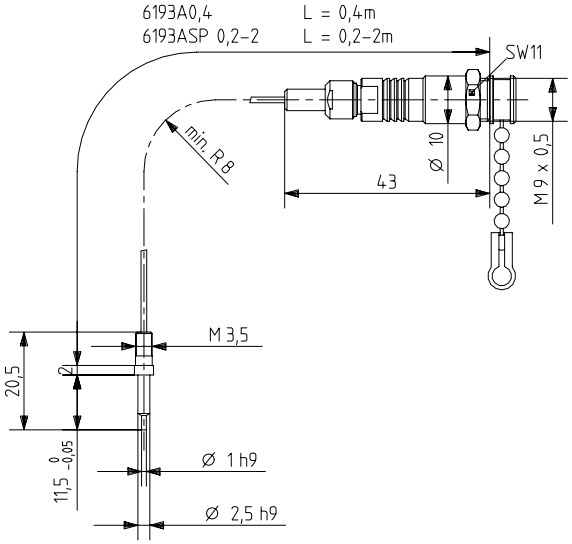


Fig. 1: Type 6193A... (Ø1 mm)

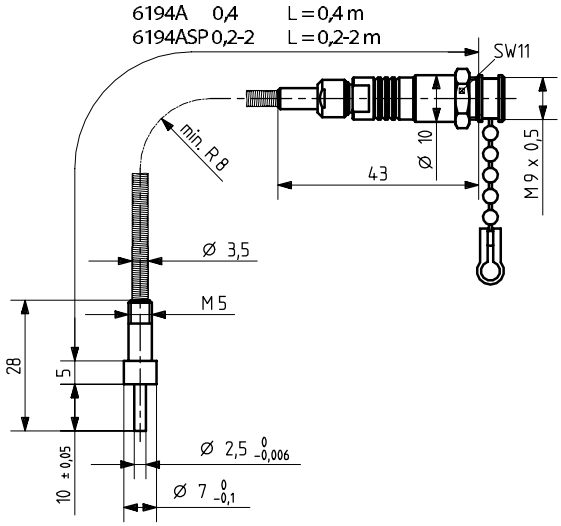


Fig. 2: Type 6194A... (Ø2,5 mm)

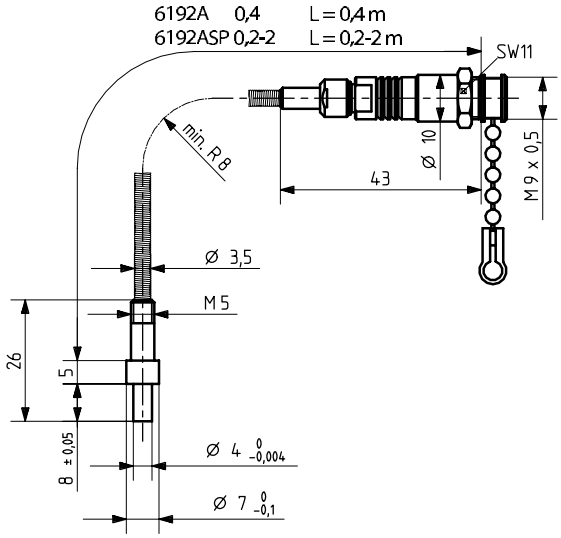


Fig. 3: Type 6192A... (Ø4 mm)

000-363f-10.03 (DB18.6192f)

Cette information correspond à l'état actuel de nos connaissances. Kistler se réserve le droit de procéder à des modifications techniques. Toute responsabilité quant à des dommages consécutifs à l'utilisation de produits Kistler est exclue.

©2003, Kistler Instrumente AG, Case postale, Eulachstr. 22, CH-8408 Winterthur
Tel +41 52 224 11 11, Fax 224 14 14, info@kistler.com, www.kistler.com

KISTLER
mesurer. analyser. innover.

Exemple de montage

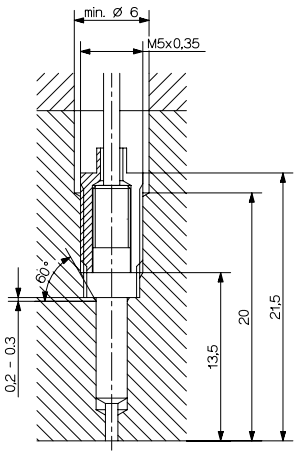


Fig. 4: Montage Type 6193A... avec écrou de montage Type 6458

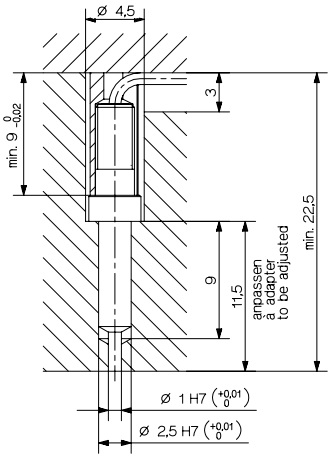


Fig. 5: Montage Type 6193A... avec douille de distance Art. No. 3.710.057

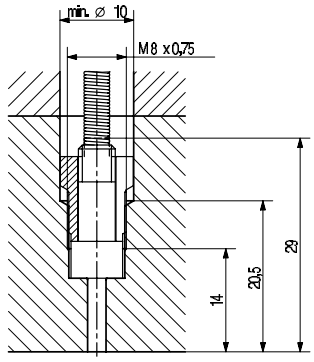


Fig. 6: Montage Type 6194A... avec écrou de montage Type 6457

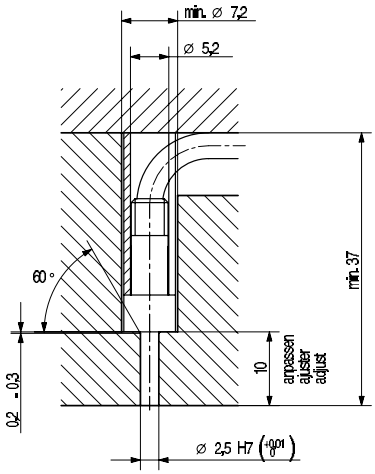


Fig. 7: Montage Type 6194A... avec douille de distance Type 6459

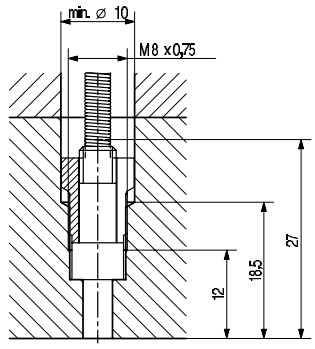


Fig. 8: Montage Type 6192A... avec écrou de montage Type 6457

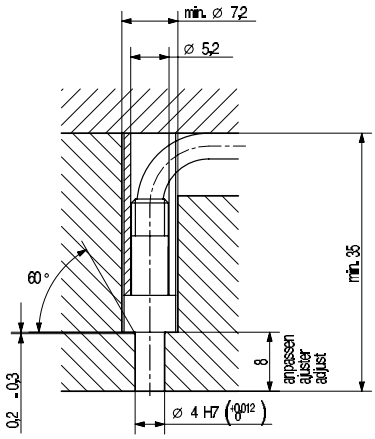


Fig. 8: Montage Type 6192A... avec douille de distance Type 6459

Cette information correspond à l'état actuel de nos connaissances. Kistler se réserve le droit de procéder à des modifications techniques. Toute responsabilité quant à des dommages consécutifs à l'utilisation de produits Kistler est exclue.

©2003, Kistler Instrumente AG, Case postale, Eulachstr. 22, CH-8408 Winterthur
Tel +41 52 224 11 11, Fax 224 14 14, info@kistler.com, www.kistler.com

KISTLER
mesurer. analyser. innover.

Montage

Les capteurs sont habituellement montés dans l'alésage à côté de l'écrou de montage (Type 6457, 6192A... et 6194A...). Il est également possible d'utiliser une câle d'epaisseur Art. No. 3.710.057 (Type 6193A...) à la place.

La face du capteur fait partie de la paroi de la cavité. Le capteur doit donc être monté de façon à affleurer exactement à la surface de ladite paroi.

Dans la mesure du possible, on fixera le connecteur à l'aide de la plaque de montage (Art. No. 3.520.328) à un endroit non exposé du moule.

Temps de réaction d'un thermocouple

Le temps de réaction d'un thermocouple dépend de sa masse. Plus elle est petite, plus la réaction aux variations de température est rapide. Dans le types 6192A..., 6193A... et 6194A... les conducteurs du thermocouple ont été menés séparément sur la face du capteur, ce qui a permis d'en réduire significativement la masse. C'est le soudage de ses deux conducteurs qui en fait crée le thermocouple. Il convient de mentionner ici qu'on ne mesure pas la température de la matière fondue, mais la température de contact à la surface de la pièce moulée.

Ce sont des avantages d'ordre technique comme la résistance à la corrosion qui ont fait porter le choix sur le thermocouple de type K pour cette application.

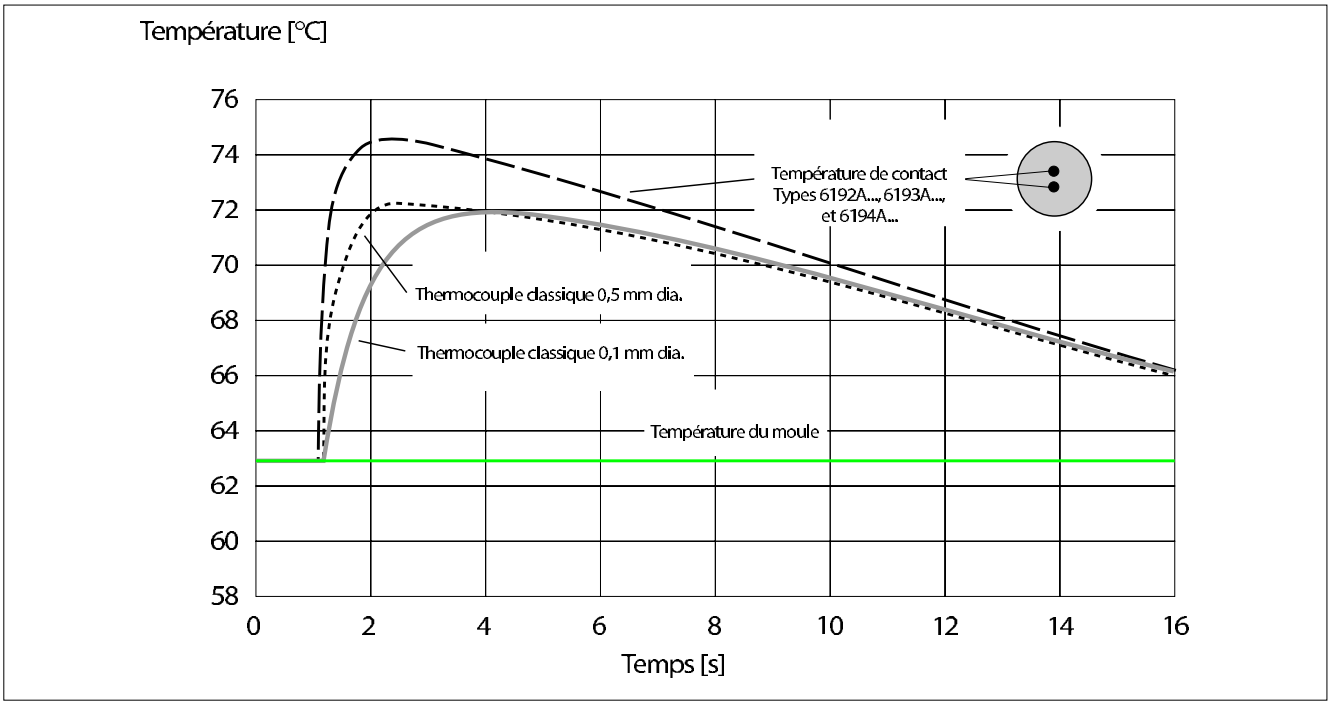


Fig. 10: Comparaison avec les thermocouples enrobés

000-363f-10.03 (DB18.6192f)

Cette information correspond à l'état actuel de nos connaissances. Kistler se réserve le droit de procéder à des modifications techniques. Toute responsabilité quant à des dommages consécutifs à l'utilisation de produits Kistler est exclue.

©2003, Kistler Instrumente AG, Case postale, Eulachstr. 22, CH-8408 Winterthur
Tel +41 52 224 11 11, Fax 224 14 14, info@kistler.com, www.kistler.com

KISTLER
mesurer. analyser. innover.

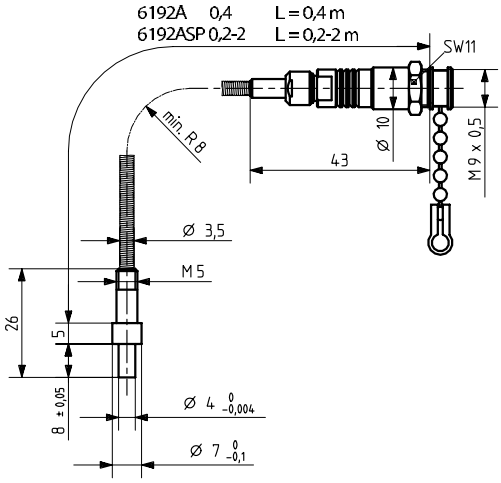


Fig. 11: Exemple chaîne de mesure

Type 2290A2

Type 2209A1

Accessoires inclus dans la livraison	Art. No./Type
• Ecrou de montage Types 6192A... et 6194A...	6457
• Plaque de montage	3.520.328
• Câle d'épaisseur pour Type 6193A...	3.710.057

Accessoires optionnels		Type
• Câble de compensation	L = 2 m	2290A2
	L = 5 m	2290A5
• Transducteur de mesure		2209A1
• Clé à douille à ouverture Types 6192A... et 6194A...		1383
• Transducteur de mesure Type 6193A...		1356
• Outil d'extraction Types 6192A... et 6194A...		1362A
• Outil d'extraction Type 6193A...		1358
• Accessoire de serrage pour connecteur		1401
• Câle d'épaisseur Types 6192A... et 6194A...		6459
• Ecrou de montage Type 6193A...		6458

Référence de commande

Type 619 □ A □

Capteur de température diamètre frontal 4 mm	**2**
Capteur de température diamètre frontal 1 mm	**3**
Capteur de température diamètre frontal 2,5 mm	**4**

Câble (longueur 0,4)	**0,4**
Longueur de câble spécifique	**sp**

000-363f-10.03 (DB18.6192f)

Cette information correspond à l'état actuel de nos connaissances. Kistler se réserve le droit de procéder à des modifications techniques. Toute responsabilité quant à des dommages consécutifs à l'utilisation de produits Kistler est exclue.

©2003, Kistler Instrumente AG, Case postale, Eulachstr. 22, CH-8408 Winterthur
Tel +41 52 224 11 11, Fax 224 14 14, info@kistler.com, www.kistler.com

Annexe O

Données fournisseur de l'huile Marlotherm®

Product Information

Rev: 09/04

MARLOTHERM® SH Heat Transfer Fluid

3. Material data for MARLOTHERM® SH

Temperature		Density		Specific heat		Thermal conductivity		Viscosity kinematic		Vapour pressure	
°C	°F	kg/m³	lb/ft³	kJ/kg K	Btu/lb °F	W/m K	Btu/ft*hr °F	mm²/s	cSt	hPa	psi
0	32	1058	66.0	1.48	0.354	0.133	0.077	321	321	–	–
20	68	1044	65.2	1.55	0.370	0.131	0.076	47	47	–	–
40	104	1030	64.3	1.62	0.387	0.128	0.074	16.5	16.5	–	–
60	140	1016	63.4	1.70	0.406	0.125	0.072	8.10	8.10	–	–
80	176	1001	62.5	1.77	0.423	0.123	0.071	4.70	4.70	–	–
100	212	987	61.6	1.85	0.442	0.120	0.069	3.10	3.10	–	–
120	248	973	60.7	1.92	0.459	0.117	0.068	2.30	2.30	–	–
140	284	958	59.8	1.99	0.475	0.115	0.066	1.80	1.80	0.1	–
160	320	944	58.9	2.07	0.494	0.112	0.065	1.40	1.40	0.5	–
180	356	930	58.1	2.15	0.514	0.110	0.064	1.20	1.20	1.7	0.02
200	392	915	57.1	2.22	0.530	0.107	0.062	0.92	0.92	5.0	0.07
220	428	901	56.2	2.29	0.547	0.104	0.060	0.77	0.77	12	0.17
240	464	887	55.4	2.37	0.566	0.102	0.059	0.65	0.65	27	0.39
260	500	873	54.5	2.44	0.583	0.099	0.057	0.57	0.57	54	0.78
280	536	858	53.6	2.52	0.602	0.096	0.055	0.50	0.50	98	1.42
300	572	844	52.7	2.59	0.619	0.094	0.054	0.45	0.45	200	2.90
320	608	830	51.8	2.67	0.638	0.091	0.053	0.4	0.40	315	4.57
340	644	815	50.9	2.74	0.654	0.088	0.051	0.36	0.36	560	8.12
360	680	801	50.0	2.82	0.674	0.086	0.050	0.32	0.32	860	12.47

Sasol Olefins & Surfactants GmbH
Business Unit Surfactants, Paul-Baumann-Straße 1, 45764 Marl, Germany
Telephone: +49 2365 49-5371 Facsimile: +49 2365 49-9180 info@de.sasol.com www.marlotherm.com

Title : Injection mould cooling optimization using boundary element heat transfer simulation

---

Summary :

Part quality and cycle time during injection moulding depend on heat transfer within the mould and the polymer part. Numerical simulation methods are widely used as an help to mould cooling conception. In this work, an optimization procedure of the cooling system is proposed. This procedure is based on numerical simulation of the cooling stage using the boundary element method.

Heat transfer during injection are simulated using two models. A stationary model, solved by the boundary element method, gives access to mean mould temperatures. The dual reciprocity method is used to solve the transient model to obtain temperature variations in the mould and the polymer part during the cooling phase. These two methods have been programmed and validated by comparison with analytical solutions.

Numerical simulation is then used in an optimization loop to find the best combination of cooling system geometry and coolant parameters. A study of the possible parameters, objective functions, constraint handling techniques is carried out. Optimization is performed with a sequential quadratic programming method and uses derivative of the objective function according to optimization parameters. Sensitivity analysis can be performed by a finite difference method or by direct differentiation of the boundary integral equation.

The optimization procedure is applied to 2D mould sections to study the effects of the objective function, the constraints and the simulation models used. Simulation results are also compared to experimental measures of mould temperature during injection.

Keywords :

Polymer injection
Heat transfer
Optimization
Injection cooling simulation
Boundary element method
Dual reciprocity method
Sensitivity analysis
Injection mold conception

Auteur : Eliette Mathey

Titre : Optimisation numérique du refroidissement des moules d'injection de thermoplastiques basée sur la simulation des transferts thermiques par la méthode des éléments frontières

Directeur de Thèse : François Rondé-Oustau

Lieu et Date de Soutenance : École des Mines d'Albi, 17 décembre 2004

Discipline Administrative : Génie Mécanique

Résumé :

Les transferts thermiques lors de l'injection jouent un rôle important pour l'obtention de pièces de bonne qualité avec un temps de cycle suffisamment court. La simulation numérique est de plus en plus utilisée pour aider à la conception des systèmes de refroidissement des moules. Nous proposons dans ce travail une procédure d'optimisation numérique du refroidissement des moules d'injection basée sur la simulation de la phase de refroidissement du cycle d'injection par la méthode des éléments frontières.

Deux modèles de transferts thermiques pendant l'injection ont été utilisés. La méthode des éléments frontières a été utilisée pour la résolution du modèle stationnaire dans le moule alors qu'elle a été combinée à la méthode de la réciprocité duale pour résoudre les problèmes transitoires linéaires. Ces deux méthodes ont été programmées et validées par comparaison à des solutions analytiques sur des problèmes simples.

La résolution numérique a alors été intégrée dans une boucle d'optimisation de manière à déterminer la meilleure combinaison possible des paramètres de refroidissement. Le choix des objectifs d'optimisation, des paramètres d'optimisation (géométrie du système de refroidissement ou paramètres procédés), des contraintes sur ces paramètres est détaillé. L'optimisation est réalisée par une méthode de programmation quadratique séquentielle nécessitant le calcul des dérivées de l'objectif par rapport aux paramètres. Cette analyse de sensibilité est faite par différences finies ou par différentiation directe du système linéaire obtenu par la méthode des éléments frontières.

La procédure d'optimisation est appliquée à des sections de moules simples pour une validation et une étude des effets de l'objectif, des contraintes et du modèle de calcul sur les résultats de l'optimisation. Enfin, les résultats de simulation et d'optimisation sont comparés à des mesures expérimentales de température réalisées sur des moules instrumentés en conditions de production.

Mots-Clés :

Injection de polymères	Transferts thermiques
Optimisation	Modélisation du refroidissement
Méthode des éléments frontières	Méthode de la réciprocité duale
Analyse de sensibilité	Conception des moules d'injection

Laboratoire :

CROMeP (Centre de Recherche sur les Outillages Matériaux et Procédés)
École des Mines d'Albi - Campus Jarlard - Route de Teillet - 81 013 ALBI Cedex 09