



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de
MAGISTER

**ETUDE COMPARATIVE DE MODELES APPLIQUES
EN PHYSIQUE DES POLYMERES
(APPLICATION PMMA)**

Option: Matériaux Avancés

par

Sabah BOUTABIA

Encadreur : Abdelhamid SOUABI MC U. Annaba

Devant le Jury:

Président : Seddik BOURAS Pr U. Annaba

Examineurs : Abdelkrim MOUSSAOUI MC U. Guelma
Rachid MERABTINE MC U. Annaba

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire des Matériaux Avancés de l'Institut de Physique à l'Université Badji Mokhtar -ANNABA.

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur SOUHI Abdelhamid, mon directeur de thèse, pour avoir dirigé et encadré cette étude avec un grand professionnalisme.

Je remercie aussi Monsieur BOURAS Seddik, Professeur à l'Université Badji Mokhtar -Annaba, d'avoir accepté de présider le jury.

Je remercie également Monsieur MOUSSAOUI Abdelkrim Maître de Conférences à l'Université de Guelma ainsi que Monsieur MERABTINE Rachid Maître de Conférences à l'Université Badji Mokhtar - Annaba d'avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Pour m'aider dans la compréhension de théories que j'ai tenté d'illustrer, je me suis largement reposée sur les connaissances et compétences de Monsieur MOUSSAOUI Abdelkrim que je remercie vivement.

Je tiens aussi à remercier particulièrement Monsieur MENASRIA Azeddine du Laboratoire d'Automatisme et de l'Informatique de Guelma (LAIG) ainsi que Monsieur BERRAH Smail du Département d'Electronique de l'Université de Béjaia pour leurs aides précieuses dans la 1^{ère} et 2^{ème} partie de simulation de ce travail.

Je tiens à remercier tous ceux qui ont collaboré à l'accomplissement de ce travail, en particulier mes collègues : Sihem pour son aide irremplaçable, Hamida, Chafia, Hafida, Mohamed, Nabil et Asma.

Je remercie également ma famille qui m'a soutenue tout au long de mes études, et plus particulièrement ma sœur Karima qui m'a beaucoup aidé ainsi que ma petite sœur Samia.

Dédicace

Je dédie ce travail à :

Mon cher père Slimane et ma mère adorée Fatma

Mon frère unique et sa femme

Mes sœurs

Mes neveux et nièces :

*Rami Bilel, Mohamed Anis, Mohamed Wassim
(nouveau né), Rawnek Roumaissa, Narjes, Rim
Basma et Nour EL Houda.*

Ma grande famille

Tous ceux qui m'aiment et m'estiment.

RESUME

Notre travail consiste à approximer la loi de comportement mécanique du Polyméthacrylate de Méthyle PMMA qui est un polymère industriel avec une structure amorphe, aux alentours de sa transition vitreuse, à une vitesse de déformation constante. Les termes σ , ε sont définis à une échelle locale lors d'un essai de traction uniaxial. Sachant que l'éprouvette est de forme axisymétrique avec un profil en sablier.

Pour cela, et pour s'approcher de la loi de comportement mécanique du matériau utilisé dans notre travail, nous avons opté pour la méthode des Réseaux de Neurones Artificiels, ou RNA, comme méthode de simulation, que nous avons appliquée au PMMA. Une autre technique a été appliquée sur ce matériau, c'est celle des Algorithmes Génétiques, ou AG.

A partir des résultats obtenus, on constate que la performance des méthodes est satisfaisante pour la technique des RNA en comparaison avec les résultats de la seconde technique des AG.

Mots clés : Polymère, traction uniaxiale, RNA, AG.

Abstract

Our work is to approximate the law of the mechanical behavior of Polymethyl methacrylate PMMA, it is an industrial polymer with amorphous structure, in the surroundings of its glass transition at a constant speed of deformation. The terms σ , ϵ are defined in a local scale during an uniaxial tensile test. The tube is axisymmetric shape with an hourglass profile,

For this, and to approach the law of the mechanical behavior of the material used in our work, we opted for the method of artificial neural networks, or ANN, as a method of simulation, we have applied to PMMA. Another technique has been applied to this material is that of Genetic Algorithms, or GA.

From the results, we find that performance of the two methods is satisfactory for the first technique: RNA compared with the results of the second technical: GA.

Keywords: Polymer, uniaxial tensile, ANN, GA.

SOMMAIRE

Introduction Générale	-1-
-----------------------	-----

Chapitre I

Etude bibliographique

I-1 Introduction	-3-
I-2 Historique	-3-
I-3 Structure de macromolécules	-3-
I-4 Architecture des polymères	-5-
I-5 Synthèse des polymères	-5-
I-5-1 Polymérisation en chaîne	-6-
I-5-2 Polymérisation par condensation	-7-
I-6 Types de polymères	-7-
I-6-1 Les thermoplastiques	-7-
I-6-2 Les thermodurcissables	-8-
I-6-3 Les élastomères	-8-
I-7 Distribution des masses molaires	-9-
I-8 Classement des polymères	-10-
I-8-1 Les polymères amorphes	-11-
I-8-2 Les polymères semi-cristallins	-11-
I-8-3 Les fibres	-12-
I-8-4 Les polymères cristaux-liquides ou mésomorphes	-13-
I-9 Domaines d'état	-13-
I-9-1 Vitreux	-13-
I-9-2 Caoutchoutique	-14-
I-9-3 Fondu	-14-
I-10 Propriétés des polymères	-14-
I-10-1 Propriétés mécaniques	-14-
I-10-2 Propriétés thermique	-15-
I-10-3 Autres propriétés	-15-
• Propriétés optiques	-15-

• Propriétés électriques et électro-optiques	-16-
• Propriétés de protection physique et chimique	-16-
I-11 Utilisation des polymères	-16-
I-12 Description générale du PMMA	-16-
I-12-1 Histoire du PMMA	-18-
I-12-2 Elaboration du MAM	-18-
I-12-3 Polymérisation du MAM	-18-
I-12-4 Propriétés et utilisation du PMMA	-19-
I-12-4-1 Propriétés du PMMA	-19-
I-12-4-2 Utilisation du PMMA	-20-
I-12-5 Recyclage	-20-
I-12-6 Commercialisation du PMMA	-20-
I-13 Elaboration et caractérisation du matériau étudié	-21-
I-13-1 Elaboration du matériau	-21-
I-13-2 Caractérisation du matériau	-21-
I-13-3 Distribution des masses moléculaires	-22-
II-14 Conclusion	-22-

Chapitre II

Essais et méthodes utilisées

II-1 Introduction	-23-
II-2 Essais	-23-
II-2-1 Essai de traction	-23-
II-2-2 Courbe générale de traction-allongement des polymères	-25-
II-2-3 Comportements typiques des polymères solides	-26-
II-2-4 Eprouvette de traction	-29-
II-2-5 Etude quantitative du comportement mécanique de l'éprouvette	-29-
II-2-6 Résultats d'essai de traction du PMMA	-32-
II-3 Méthode des Réseaux de Neurones Artificiels	-33-
II-3-1- Historique	-33-
II-3-2 Les réseaux de neurones	-35-
II-3-2-1 Les neurones formels	-35-
II-3-2-2 Différents types de neurones	-35-

II-3-2-3 Les réseaux de neurones formels	-37-
II-3-2-3-1 Les réseaux de neurones non bouclés ou statique	-37-
II-3-2-3-2 Les réseaux de neurones bouclés ou dynamiques	-39-
II-3-2-4 Propriétés fondamentales des Réseaux de Neurones	-40-
II-3-2-4-1 Le parallélisme	-40-
II-3-2-4-2 La capacité d'adaptation	-40-
II-3-2-4-3 La facilité de construction	-41-
II-3-2-4-4 Propriété fondamentale : L'approximation universelle parcimonieuse	-41-
a) l'approximation universelle	-41-
b) La parcimonie	-41-
II-3-2-4-5 Réseaux de neurones et régressions non linéaires	-43-
II-3-2-5 Apprentissage d'un réseau de neurones	-44-
II-3-2-6 Algorithme de Rétro-propagation (RP)	-44-
II-3-2-8 Variantes de l'algorithme de RP	-48-
II-3-2-8-1 Choix de la fonction coût	-49-
II-3-2-8-2 Introduction d'un terme de moment	-49-
II-3-2-8-3 Taux d'apprentissage adaptatifs	-50-
II-3-2-9 Autres procédures d'optimisation	-51-
II-3-2-10 Choix des séquences d'apprentissage	-52-
II-3-2-10-1 Séquence des entrées de commande	-52-
a) Contraintes sur les entrées de commande	-52-
b) Fréquence d'échantillonnage	-53-
II-3-2-10-2 Séquences d'apprentissage et estimation de la performance	-53-
a) Le sur-ajustement	-55-
b) Problème des minima locaux	-55-
II-3-2-11 Etude du pouvoir de généralisation des réseaux de neurones	-55-
II-4 Méthode des algorithmes génétiques	-56-
II-4-1 Méthode générale des algorithmes	-60-
II-4-1-1 Codage des chromosomes	-61-
II-4-1-2 Généralisation de la population initiale	-61-
II-4-1-3 Taille de la population	-62-
II-4-1-4 Fonction de mérite (adaptation)	-64-
II-4-1-5 Sélection	-64-
II-4-1-6 Croisement	-64-

II-4-1-7 Mutation	-65-
II-4-1-8 Remplacement	-65-
II-5 Conclusion	-66-

Chapitre III

Résultats des Réseaux de Neurones Artificiels

III-1 Introduction	-67-
III-2 Conception du réseau	-67-
III-3 Choix de l'architecture	-69-
III-4 Méthode "Early Stopping"	-70-
III-5 Résultats de simulation	-71-
III-5-1 Premier essai	-71-
III-5-2 Deuxième essai	-75-
III-5-3 Troisième essai	-79-
III-6 Conclusion	-82-

Chapitre IV

Résultats des Algorithmes Génétiques

IV-1 Introduction	-83-
IV-2 Application de la méthode	-83-
IV-3 Méthodologie de simulation	-84-
IV-3 Description détaillée	-84-
IV-3-1 Programme principal	-84-
IV-3-1-1 Génération de la population initiale	-84-
IV-3-1-2 Evaluation	-85-
IV-3-1-3 Sélection	-85-
IV-3-1-4 Croisement	-85-
IV-3-1-5 Mutation	-86-
IV-3-1-6 Calcul	-86-
IV-4 Résultats de simulation	-86-
IV-4-1 A T inférieur à Tg	-86-

IV-4-2 Dans le domaine caoutchoutique	-89-
IV-5 Conclusion	-94-

Chapitre V

Discussion et comparaison

V-1 Introduction	-95-
V-2 Discussion	-95-
V-2-1 Méthode de Réseaux de Neurones Artificiels	-95-
V-2-2 Méthode des Algorithmes Génétiques	-96-
V-3 Comparaison	-97-
V-4 Conclusion	-98-
Conclusion Générale	-100-
Annexe I	-102-
Annexe II	-114-
Annexe III	-115-
Références bibliographiques	-116-

Liste des figures

Figure	Titre	Page
I-1	Différent types de macromolécules	-5-
I-2	Voies, types et procédés de polymérisation	-6-
I-3	Principaux groupes de polymères	-9-
I-4	Structure du PMMA: $(C_5O_2H_8)_n$	-16-
I-5	Représentation du PMMA : a) plane b) spatiale	-17-
I-6	Le dispositif de mesure de la masse volumique du PMMA M70	-22-
II-1	Courbe générale traction-allongement des polymères	-26-
II-2	Comportement plastique (contrainte vraie/déformation vraie) du PMMA à différentes températures (G'Sell C., 1988)	-27-
II-3	Courbes traction-allongement de 4 types de polymères	-27-
II-4	L'éprouvette en sablier	-30-
II-5	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie	-32-
II-6	Neurone formel	-35-
II-7	Différents types de fonctions d'activations	-37-
II-8	Perceptron multicouche à une couche cachée	-39-
II-9	Définition des notations pour un PMC	-45-

II-10	Organigramme d'un algorithme génétique type (simple) (Gen : numéro de la génération courante, M : taille d'une population)	-63-
II-11	Possibilité de croisement	-65-
III-1	Schéma de principe de l'estimation	-69-
III-2	L'architecture choisie	-71-
III-3	Test d'apprentissage	-73-
III-4	Test de validation	-74-
III-5	Test de généralisation à la température 96°C	-75-
III-6	Architecture choisie	-76-
III-7	test d'apprentissage	-77-
III-8	Test de validation	-78-
III-9	Test de généralisation à la température 96°C	-78-
III-10	L'architecture choisie	-79-
III-11	Test d'apprentissage	-80-
III-12	Test de validation	-81-
III-13	Test de généralisation	-82-
IV-1	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 100°C	-87-

IV-2	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 105°C	-87-
IV-3	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 110°C	-88-
IV-4	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 115°C	-89-
IV-5	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 120°C	-90-
IV-6	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 125°C	-91-
IV-7	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 130°C	-91-
IV-8	Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 135°C et 140°C	-92-
IV-9	Comparaison du test de validation des RNA avec les résultats des AG à 95°C	-93-

V-1	Comparaison du test de validation des RNA avec les résultats des AG à 95°C	-98-
V-2	Comparaison du test de validation des RNA avec les résultats des AG à 120°C	-98-

LISTE DES TABLEAUX

Tableau	Titre	Page
II-1	Réseaux de neurones et statistiques	-44-
III-1	Choix des paramètres	-68-
III-2	Nombre de neurones choisis dans la couche cachée	-72-
III-3	Nombre de neurones choisis dans la couche cachée	-76-
III-4	Nombre de neurones choisis dans la couche cachée	-80-
VI-1	Coefficients du modèle	-83-
VI-2	Valeurs de coefficients des modèles à $T < T_g$	-88-
VI-3	Valeurs de coefficients des modèles à $T > T_g$	-93-

INTRODUCTION GENERALE

Les polymères synthétiques sont à la base des matériaux plastiques qui sont de plus en plus utilisés dans un nombre toujours croissant d'applications. Il existe une grande variété de polymères synthétiques, chaque polymère répondant à des besoins spécifiques en terme de caractéristiques physiques, mécaniques ou même électriques.

Dans le cadre d'une approche phénoménologique du comportement non linéaire, et à partir de données expérimentales issues de la littérature, deux méthodes de simulation sont élaborées à partir d'un modèle visco-élasto-plastique du matériau PMMA, c'est un polymère thermoplastique amorphe.

Seul l'effet de la température sera pris en considération dans cette étude, la vitesse de déformation étant constante, sous sollicitation en traction. Le comportement mécanique obtenu, fortement non linéaire et sensible à la température, suit ces différentes étapes : Comportement élastique linéaire puis, au-delà d'une certaine déformation, plastique. Ce dernier se manifeste le plus souvent par un adoucissement plus au moins marqué suivi d'un durcissement du matériau jusqu'à la rupture.

Les deux méthodes choisies dans notre étude permettent de modéliser le comportement visco-élasto-plastique du PMMA, au voisinage de sa transition vitreuse. Pour la première méthode, on a effectué trois essais différents. Pour la seconde, il s'agit d'une approche nécessitant une grande puissance de calcul, mais présentant l'immense avantage pratique de fournir des solutions pas trop éloignées de l'optimal.

Ce mémoire est composé des parties suivantes :

- Dans un premier temps, nous allons donner quelques notions sur les polymères, puis, des généralités sur le PMMA, son historique, son élaboration, son mode de polymérisation, ses propriétés ainsi que son cadre d'utilisation.
- Ensuite, nous traiterons la technique expérimentale qui est l'essai de traction. Nous nous efforcerons de définir toutes les informations issues de cette technique, nous donnerons les résultats expérimentaux. Nous entamerons la phase essentielle, c'est la

simulation. On va présenter deux techniques de simulation, la première est celle de Réseaux de Neurons Artificiels, ou RNA, où on présentera son historique et quelques définitions principales. La seconde est celle des Algorithmes Génétiques, ou AG, c'est une autre méthode d'optimisation des fonctions non linéaires.

- Nous ferons état des résultats des deux méthodes de simulation.
- Puis, nous discuterons nos résultats afin d'interpréter la loi de comportement du matériau étudié. Nous terminerons notre travail par une comparaison entre les deux méthodes.

I-1 Introduction

Dans ce chapitre, on rappellera quelques notions concernant les matériaux polymères, et notamment quelques propriétés élémentaires, puis on présentera le PMMA, Polyméthacrylate de méthyle, en donnant des généralités concernant en particulier son élaboration et sa caractérisation.

I-2 Historique

Les polymères appartiennent à une science qui a pris son essor dans les années 40, car pendant la guerre, il est apparu nécessaire de fabriquer certains matériaux qui manquaient alors.

A cette époque, on distinguait les molécules organiques en deux catégories:

- Les cristalloïdes
- Les colloïdes

Les cristalloïdes sont des composés organiques cristallisables, de température de fusion et de masses molaires définies.

Les colloïdes sont des molécules visqueuses, ne cristallisant pas et ayant des températures de fusion mal définies. Lorsque l'on mesurait leur masse molaire, on la trouvait supérieure à 100000. Cela renforçait l'idée que ces molécules étaient des agrégats.

Au début des années 1950, Carothers et Flory admettent et montrent que des édifices covalents de masse molaire supérieure à 100 000 existent. C'est le fondement de la théorie des polymères. Dès cette époque, on a établi la notion de polymères.

I-3 Structure de macromolécules

Les polymères sont des composés organiques formés de l'assemblage de macromolécules en interaction, ces macromolécules sont des longues chaînes organiques constituées de la répétition de groupements chimiques simples appelés monomères dont le squelette est le plus souvent à base d'atome de carbone, les dispositions configurationnelles (arrangement topologique des atomes au sein du monomère) et conformationnelles (agencement relatif des monomères d'une même molécule) conduisent à un état partiellement ou totalement désordonné de la matière.

Le squelette du polymère est stabilisé par des liaisons chimiques covalentes, il ne se dissout donc pas en solution. La cohésion entre macromolécules est assurée par des liaisons physiques, Van-Der-Waals ou hydrogènes, lesquelles se rompent si on chauffe.

C'est la chaîne carbonée constituée des liaisons C-C qui est à l'origine des propriétés des matières plastiques. Ces liaisons covalentes, liaisons fortes (438 KJ/mol) sont à la base de la notion de polymère, elles sont dirigées. Il existe un angle de liaison qui est fixé mais avec des possibilités de rotation autour des segments de liaison. Ces rotations sont à la base de la notion de conformation. Les interactions secondaires sont en général de type Van-Der-Waals et leur énergie est très inférieure à celle des liaisons covalentes de la chaîne. C'est cette dualité des liaisons dans la structure des polymères qui est l'origine de leurs propriétés mécaniques importantes.

Les enchaînements covalents se développent dans une, deux ou trois directions de l'espace, on distingue les macromolécules mono-, bi- et tridimensionnelles. La dimensionnalité d'une macromolécule est directement liée à la fonctionnalité des unités constitutives, c'est-à-dire au nombre de liaisons établies avec leurs voisines.

Les macromolécules monodimensionnelles comportent d'abord les macromolécules linéaires décrites par la formule $(-A-)_n$. Le trajet de la chaîne dans l'espace est une courbe (figure 1.1.a). A cette partie appartiennent les grands polymères industriels. Une macromolécule présente des accidents de structure sous la forme de chaîne latérale ou ramifications, de faibles longueurs par rapport à celle de la chaîne principale ou squelette (figure 1.1.b), les polymères linéaires et les polymères ramifiés sont des thermoplastiques.

Le graphite est un exemple de macromolécule bidimensionnelle ou lamellaire (figure 1.1.c). Il est formé de plans d'atomes de carbones liés par des liaisons covalentes. Sa structure en feuillet lui confère d'excellentes propriétés lubrifiantes.

Les macromolécules tridimensionnelles ont une structure en réseau (figure I-1-d). La formation du réseau ou réticulation peut se faire pendant la synthèse des macromolécules ou à partir de chaînes linéaires déjà polymérisées comme le cas de la vulcanisation du caoutchouc. Deux grandes classes de polymères sont associées à une structure en réseau : les élastomères avec un réseau lâche et les polymères thermodurcissables avec un réseau dense.

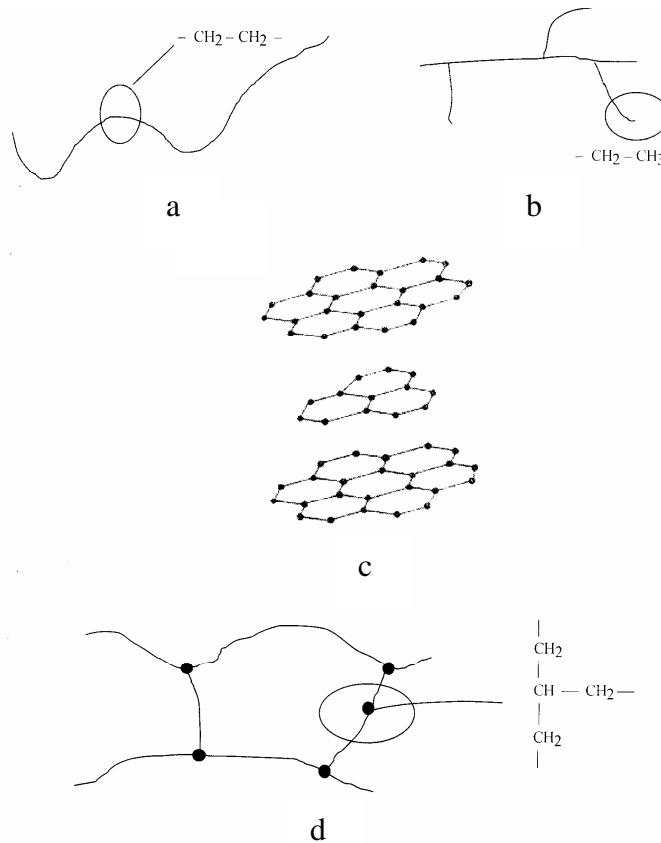


Figure I-1: Différents types de macromolécules

I-4 Architecture des polymères

Les macromolécules sont organisées de façon spatiale : compacité et ordre de « l'empaquetage » des chaînes, orientation, enchevêtrements...

I-5 Synthèse des polymères

Il existe deux grandes voies de polymérisation : la polymérisation en chaîne et la polycondensation (Figure I-2).

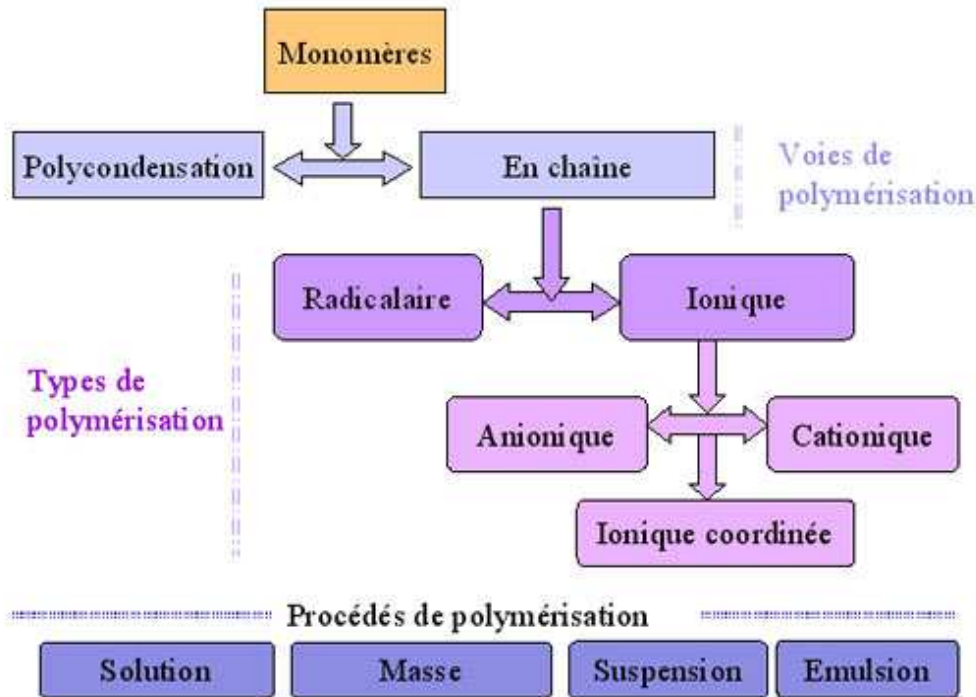


Figure I-2 : Voies, types et procédés de polymérisation

I-5-1 Polymérisation en chaîne

Les réactions en chaîne font intervenir un nombre réduit de centres actifs mais ces derniers sont très réactifs. Il s'établit entre 1000 et 10000 réactions primaires pendant la durée de vie d'un radical de 0.1 seconde.

Les réactions en chaîne se déroulent suivant 3 grandes étapes :

- L'amorçage qui conduit à la formation du premier centre actif.
- La propagation pendant laquelle les macromolécules croissent.
- La terminaison qui correspond à l'arrêt de la croissance des chaînes.

Les terminaisons déterminent la taille des chaînes. En polymérisation radicalaire, cette terminaison se fait par la réaction de deux radicaux macromoléculaires. Cette réaction est soit une addition conduisant à une très longue chaîne macromoléculaire, soit une dismutation menant à deux chaînes macromoléculaires, l'une contenant une fin de chaîne saturée et l'autre comprenant une fin de chaîne insaturée.

La polymérisation en chaîne regroupe la polymérisation radicalaire et la polymérisation ionique (Figure I-2). Cette dernière peut être anionique, cationique ou ionique coordinée. La polymérisation ionique coordinée se fait en présence de catalyseurs régiosélectifs de type Ziegler et Natta à base d'halogénures de métaux de transition. Elle permet le contrôle de la structure moléculaire des polymères et permet l'obtention de polymères de très hautes masses molaires.

I-5-2 Polymérisation par condensation

La polycondensation est également désignée par le terme «polymérisation par étapes». La formation de la macromolécule se fait par des réactions de condensation successive entre les fonctions chimiques des monomères di ou polyfonctionnelle. Ces réactions s'accompagnent généralement de l'élimination de petites molécules telles que H₂O, fonction des monomères en présence. Dans cette voie de polymérisation, la chaîne grossit soit par addition de monomères, soit par addition d'oligomères. Cette polymérisation est longue et dure plusieurs heures.

On distingue quatre procédés de polymérisation (figure I-2) : en solution, en masse, en suspension et en émulsion.

I-6 Types de polymères

Selon le mode de polymérisation, la structure des polymères prend plusieurs formes. La polymérisation par addition entraîne la formation de macromolécules linéaires qui se ramifient, alors que la polymérisation par condensation engendre habituellement un réseau tridimensionnel. Le comportement des matières plastiques dépend en grande partie du type de structure obtenue et de son degré de réticulation. En général, on classe les polymères en trois groupes : Les thermoplastiques, les thermodurcissables et les élastomères.

I-6-1 Les thermoplastiques

Les thermoplastiques sont constitués de macromolécules linéaires ou ramifiées, liées entre elles physiquement. Ils sont solides à température ambiante, ils se ramollissent à la chaleur jusqu'à un état plastique dans lequel ils se laissent comparativement plus facilement déformés. Ce processus est réversible, c'est-à-dire que les thermoplastiques se rigidifient de nouveau au refroidissement.

I-6-2 Les thermodurcissables

Egalement appelés thermodurs ou matières thermorigides, sont élaborés par réaction chimique entre plusieurs composants : une résine (prépolymère), un durcisseur, un accélérateur, et d'autres additifs. Le matériau fini, c'est-à-dire la matière thermodurcie réticulée, est constitué de macromolécules chimiquement liées entre elles sous forme de réseau. Des forces de cohésion physiques agissent en plus des liaisons chimiques formées au cours du processus de réticulation. On obtient à température ambiante, un matériau dur. Au chauffage, un affaiblissement des liaisons physiques est possible et entraîne une très nette diminution de la rigidité du matériau. Un état plastique n'est pas atteint par chauffage à des températures permettant l'affaiblissement des liaisons physiques, en raison du caractère indestructible, dans ces conditions, des liaisons chimiques existantes entre macromolécules.

I-6-3 Les élastomères

Les élastomères sont des matériaux aux propriétés bien particulières. Ce sont des polymères de haute masse moléculaire et à chaînes linéaires. Le déplacement de leurs chaînes les unes par rapport aux autres n'étant limité que par une légère réticulation, on obtient de grandes déformations élastiques totalement réversibles. Lorsque la contrainte est nulle, ces matériaux sont amorphes. Leurs chaînes tendant toutefois à s'aligner au cours de la déformation, il se produit une augmentation de la rigidité. Pour obtenir un tel comportement, il faut utiliser ces matériaux à une température supérieure à leur température de transition vitreuse. Les propriétés des élastomères dépendent de leur degré de réticulation, c'est ainsi que les propriétés du caoutchouc varient en fonction de la quantité de soufre lors de la vulcanisation, en vue de lier les chaînes les unes aux autres.

La figure suivante illustre les principaux groupes de polymères :

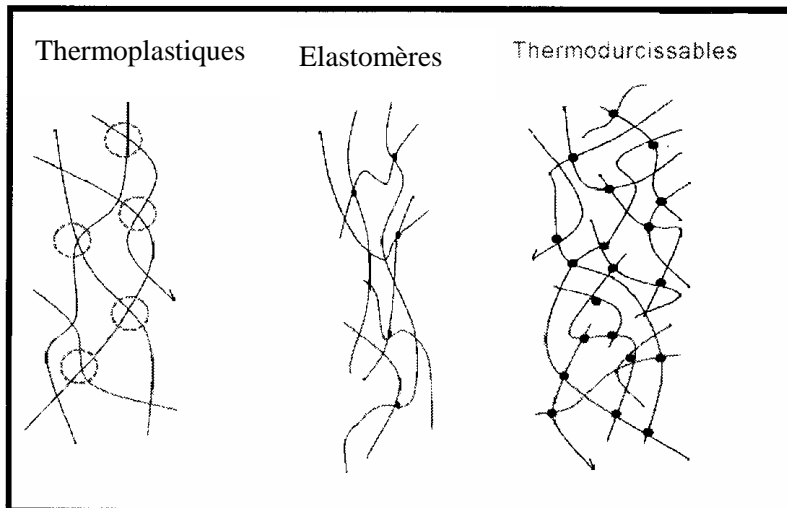


Figure I-3 : Principaux groupes de polymères

I-7 Distribution des masses molaires

Les matériaux polymères présentent une hétérogénéité des masses molaires. On dit qu'ils sont polymoléculaires, c'est-à-dire que les chaînes polymères ont des longueurs différentes. On parle d'une distribution de masses molaires et on est ramené à l'étude d'une population de masses molaires afin de caractériser le matériau polymère.

Cette polymolécularité, autrement dit la largeur de la distribution des masses molaires, est en général inhérente aux procédés de synthèse.

Il est important de définir la masse molaire moyenne en nombre et la masse molaire moyenne en masse. Pour cela on considère soit la masse m_j des macromolécules possédant un certain degré de polymérisation P_j par rapport à la masse totale M_0 des monomères mis en jeu, soit le nombre n_i de macromolécules correspondant à un degré de polymérisation P_j par rapport à la quantité totale N_0 de monomères. La fonction de distribution en nombre conduit, par comparaison avec la distribution en masse, à des valeurs de masses molaires moyennes plus élevées dans le domaine des faibles degrés de polymérisation et plus faibles dans le domaine des degrés élevés de polymérisation. Ceci peut s'expliquer par le fait que beaucoup de chaînes polymères courtes ont une masse comparativement plus faible qu'un plus petit nombre de longues chaînes.

• Masses molaires moyennes

L'interprétation des courbes de distribution étant souvent complexe, on définit de préférence la taille des macromolécules par des valeurs moyennes.

La masse molaire moyenne en nombre :

$$\overline{M}_n = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} n_j P_j}{N_0} \quad (\text{I-1})$$

La masse molaire moyenne en masse \overline{M}_w est obtenue, de façon analogue, à partir du produit m_j des macromolécules pour chaque degré de polymérisation P_j correspondant, rapporté à la masse totale M_0 des monomères mis en jeu.

$$\overline{M}_w = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} m_j \cdot P_j}{M_0} \quad (\text{I-2})$$

Dans le cas d'une distribution très étroite des masses molaires, la valeur moyenne en nombre \overline{M}_n coïncide relativement bien avec la valeur moyenne en masse \overline{M}_w . Pour une distribution large, les valeurs de \overline{M}_n sont nettement plus élevées que celles de \overline{M}_w . L'écart entre \overline{M}_n et \overline{M}_w augmente avec la largeur de la distribution.

A partir de ces valeurs moyennes, on détermine le coefficient de distribution des masses molaires, ou indice de polymolécularité, c'est-à-dire le rapport $\overline{M}_w / \overline{M}_n$ qui caractérise l'homogénéité des masses molaires. Il varie de 2 environ, pour les polymères issus d'une polyaddition ou d'une polycondensation, jusqu'à des valeurs comprises entre 20 et 50 pour des polymères à taux de ramification élevé. Il se rapproche de l'unité pour les polymérisations vivantes.

I-8 Classement des polymères

D'un point de vue physique, les polymères sont classés en plusieurs catégories :

I-8-1 Les polymères amorphes

Beaucoup de polymères thermoplastiques ont une structure amorphe : polyéthylène basse densité (PEBD), polystyrène (PS), polyméthacrylate de méthyle (PMMA). Les macromolécules linéaires y sont entremêlées en pelote comme des nouilles dans un plat. Dans la structure amorphe, les macromolécules sont flexibles et disposées sans aucune règle, de façon aléatoire. Mais cela donne quelque chose d'assez homogène.

En général, les polymères amorphes employés sans adjonction d'autres substances sont transparents. C'est le cas par exemple de films de polyéthylène basse densité, des boîtiers en polyméthacrylate de méthyle, des bouteilles d'eau en polytéraphalate d'éthylène (PET).

Les thermodurcissables sont généralement amorphes, par exemple les résines polyépoxydes. En effet, les réticulations et pontages ont lieu dans toutes les directions empêchant tout ordre d'orientation, provoquant l'isotropie du matériau. Cela ressemble à un enchevêtrement de lianes s'accrochant les unes aux autres par des tentacules en de multiples points.

Une autre catégorie d'amorphes est constituée par les élastomères. Ce sont des caoutchoucs tels que le polyisoprène (caoutchouc naturel et synthétique) et le polybutadiène. Leur température de transition vitreuse est en dessous de la température ambiante. Les macromolécules sont emmêlées en pelote et, de plus, elles sont reliées de façon assez lâche par des nœuds dont la nature varie selon les types des élastomères. Lorsqu'on tire sur un élastomère, les molécules se déplient et s'allongent. Le rôle des nœuds est de les empêcher de glisser et de les ramener dans leur position initiale lorsqu'on relâche la tension.

I-8-2 Les polymères semi-cristallins

La structure cristalline n'est pas réservée au monde minéral. Elle est largement présente dans les polymères thermoplastiques, mais elle se révèle sous des aspects spécifiques aux polymères à cause de leurs longues molécules : les cristallites et les sphérolites. Le polyéthylène en est un bon exemple. Dans une cristallite de polyéthylène, les chaînes macromoléculaires linéaires non ramifiées sont repliées en accordéon. Les parties rectilignes des repliements s'ajustent les unes contre les autres en empilements réguliers. C'est la définition même du cristal. Sa particularité est qu'une direction d'empilement est concrétisée par la chaîne elle-même.

Cependant, ces cristaux ne sont pas parfaits. Cela ne veut pas dire qu'ils sont mauvais, mais qu'au regard de notre définition de l'ordre, ils souffrent de défauts aux règles, par exemples, les chaînes ne sont pas parfaitement alignées et parallèles, ou bien pas vraiment calées les unes contre les autres. Il s'ensuit que les cristaux ne se développent qu'à des tailles très limitées, inférieures au micromètre. C'est ce qu'on nomme cristallite. Dans certaines conditions favorables de cristallisation, les cristaux ont la liberté de se développer à des tailles beaucoup plus grandes, plusieurs micromètres, et sont visibles au microscope optique. On découvre que leur croissance s'est effectuée de façon radiale, on les nomme alors les sphérolites. La structure en sphérolite est particulièrement belle. Cependant, dans les matériaux industriels, il est préférable que les sphérolites restent petits, sinon le matériau est fragile.

I-8-3 Les fibres

Les fibres naturelles sont connues et employées depuis longtemps en tant que fils et cordages, par exemple le coton, le lin et le chanvre. Leur caractéristique est d'avoir une forme extrêmement allongée dans un sens, et une section toute petite. Elles sont exploitées pour leur teneur mécanique dans le sens de la longueur. Cette propriété provient d'un constituant, la cellulose, polymère naturel du glucose, la soie et la laine sont d'autres exemples de fibres naturelles.

Les polymères synthétiques ont également conquis le domaine de fibres. Les fibres synthétiques ont une longueur pratiquement aussi grande que l'on veut, et sont appelées des filaments. Leur diamètre est très petit, environ 50 à 10 μ m, et même moins de 10 μ m dans les microfibrilles.

Les microstructures des fibres sont de toutes sortes. Elles peuvent être amorphes (fibres transparentes en polyméthacrylate de méthyle pour l'optique, fil de pêche en polyamide), quelquefois semi-cristallines. Mais souvent, les molécules s'étirent parallèlement à l'axe de fibre. C'est dans cette configuration que la fibre possède la meilleure résistance à la traction. De cette façon, on fabrique des fibres ultra-résistantes. A condition toutefois que ces molécules soient solidaires. Cela est réalisé par des enchevêtrements ou par des liaisons hydrogènes comme dans le cas du kevlar, un polyamide.

I-8-4 Les polymères cristaux-liquides ou mésomorphes

Les molécules des cristaux-liquides ne sont pas isotropes, elles ont une forme fixe qui possède une orientation privilégiée. Elles sont par exemple rigides et allongées sous forme de bâtonnets. Cela introduit une affinité pour des microstructures où ces bâtonnets sont empilés côte à côte, parallèlement les uns aux autres. Par rapport aux structures amorphe et cristalline, un ordre d'orientation a introduit une anisotropie dans la structure.

I-9 Domaines d'état :

Le domaine d'état exprime la variation de comportement du matériau en fonction du changement de température. Pour un matériau polymère, on distingue trois domaines d'états : vitreux, caoutchoutique et fondu.

Entre les états vitreux et caoutchoutiques, il existe une zone de transition vitreuse. Ce phénomène est défini seulement pour les polymères amorphes et les phases amorphes de thermoplastiques semi cristallins.

La température de transition vitreuse T_g se trouvant dans cette zone a une grande importance, car elle caractérise le passage du polymère d'un état dur et fragile à un état mou et souple lors d'une élévation de température. Elle dépend de :

- La rigidité de la chaîne polymère car une chaîne rigide aura T_g haute, et une chaîne souple aura une T_g basse.
- La taille des groupes latéraux puisque des groupes latéraux grands vont être des obstacles aux glissements des chaînes et donc donner un polymère de haute T_g .
- La force des interactions intermoléculaires qui donneront une haute T_g si elles sont fortes.

I-9-1 Vitreux

Le matériau est solide, il montre un comportement semblable au verre, d'où son appellation. Les mouvements intermoléculaires veulent dire que les glissements des chaînes sont bloqués. Cet état est obtenu lorsque le matériau est refroidi à une température inférieure à T_g . Lors d'une sollicitation, le polymère présente une déformation élastique, basée sur des modifications réversibles des distances atomiques et des angles de valence des liaisons chimiques.

En général, les thermoplastiques et les thermodurcissables se trouvent à l'état vitreux à température ambiante 23°C.

I-9-2 Caoutchoutique

Ce domaine se situe dans le sens des températures croissantes, les mouvements de rotation et de transition des segments de chaînes sont possibles, de sorte que les macromolécules adoptent une forme étirée sous l'effet d'une sollicitation. Le comportement des matériaux polymères dans ce domaine de température étant semblable à celui du caoutchouc, cet état est également appelé état caoutchoutique.

I-9-3 Fondu

Avant cet état, il y a une autre zone qui se trouve entre les états caoutchoutique et fondu, elle est appelée zone de fusion, caractérisée seulement pour les polymères thermoplastiques.

Pour un thermoplastique amorphe, cette zone est appelée aussi zone de fluidification. Pour un thermoplastique semi cristallin, il y a une température importante, c'est la température de fusion T_f qui est caractérisée seulement pour ce type de polymère. Elle est définie comme le passage d'une structure semi cristalline à un état liquide amorphe et correspond à la température de fusion de cristaux.

Les thermoplastiques amorphes, les élastomères et les thermodurcissables ne sont pas concernés par cette température, car T_f est la conséquence de la formation de cristallites à une température élevée. Après cette zone, le matériau passe à l'état fondu ou liquide à très haute température.

I-10 Propriétés des polymères

Les propriétés des polymères sont très différentes de celles des matériaux traditionnels comme le béton et les métaux.

I-10-1 Propriétés mécaniques

Les matériaux polymères sont utiles principalement en raison de leurs propriétés mécaniques qui décrivent le comportement des polymères vis-à-vis des sollicitations

mécaniques telles que pression, étirement, torsion, frottement, choc et sous l'effet de la pesanteur.

Les thermoplastiques et les thermodurcissables sont soumis au phénomène de vitrification. Au dessous de leur température de vitrification, ou transition vitreuse, ils deviennent durs et cassants comme du verre. Au-dessus, ils sont plus souples, plastiques. A l'extrême, ils deviennent élastiques.

I-10-2 Propriétés thermiques

En fonction de la réaction à la chaleur, on classe les polymères en thermoplastiques et thermodurcissables. Les premiers fondent lorsqu'on les chauffe, tout comme la glace ou le beurre. C'est le cas du polyéthylène, ou du polypropylène, des polyamides, de certains polyesters. L'avantage est que dans l'état fondu, on le moule dans la forme que l'on veut. C'est un procédé industriel employé pour fabriquer des objets à la pièce, en discontinu. Ce procédé est bien connu également pour les métaux, mais les températures de fusion des polymères sont bien plus basses, de l'ordre de 80°C à 300°C. Un autre procédé de mise en forme est l'extrusion qui consiste à faire passer la matière dans une vis qui l'entraîne dans une filière dont le profil permet de produire des fils, des films, des plaques, des tubes, des enrobages de câble.

Les seconds durcissent quand on les chauffe. Un exemple connu est celui des colles ou des peintures. Ils sont également très employés comme pièces de structure thermostables, par exemple les résines polyépoxydes, certains polyesters. On les met en forme lorsqu'ils sont encore dans leur état mou, de la même manière que les thermoplastiques, avant qu'ils ne durcissent sous l'effet de la chaleur et d'additifs chimiques qui induisent la réaction de polymérisation.

I-10-3 Autres propriétés

- **Propriétés optiques**

La propriété optique donne au polymère les caractéristiques suivantes : transparence (étuis de CD, bouteilles d'eau), translucidité, opacité, coloration.

- **Propriétés électriques et électro-optiques**

Les polymères sont largement utilisés comme isolants électriques, en particulier dans les circuits électroniques et les gaines de câbles électriques. Il existe aussi des polymères conducteurs, soit à l'état intrinsèque, soit parce qu'ils sont chargés de particules de carbone conductrices.

Certaines molécules de polymères, rigides et allongées, sont susceptibles de s'orienter sous l'effet d'un champ électrique. Cet effet est utilisé dans des dispositifs d'affichage comportant des polymères de structure cristal-liquide. Lorsque le champ n'est pas appliqué, les molécules sont en désordre local, le matériau est opaque et d'apparence laiteuse. Lorsque le champ est appliqué, les molécules s'orientent dans la même direction et laissent passer la lumière.

- **Propriétés de protection physique et chimique**

Ces propriétés englobent des caractéristiques diverses : imperméabilité aux liquides et aux gaz, résistance chimique aux solvants, résistance aux rayons ultraviolet.

I-11 Utilisation des polymères

On rencontre les polymères dans les petits objets usuels de la maison, les appareils électroménagers et aussi en tant que matériaux de construction, en revêtement et peintures, dans les emballages, les pneus, les textiles, les produits médicaux, chirurgicaux, prothèses, produits d'hygiène, articles de loisirs, pièces de structure dans les véhicules de transport, les équipements électriques, les circuits électroniques, les matelas-mousses, les colles. Ils s'infiltrent aussi dans l'alimentation, les produits cosmétiques, les ciments. Les polymères sont employés aussi pour la fabrication d'imperméables, de boîtes de conservations, de flacons pour les laboratoires, de citernes, de gaines de câbles, pour l'induction de tissus, etc.

I-12 Description générale du PMMA

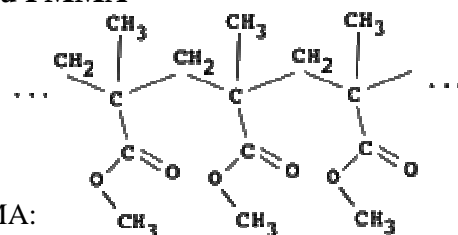
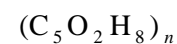


Figure I-4: Structure du PMMA:



Le PMMA a été élaboré par Bradel à la fin du 19^e siècle. Le polyméthacrylate de méthyle (souvent abrégé en PMMA, de l'anglais PolyMethyl MethAcrylate) est un polymère thermoplastique dont le monomère est le méthacrylate de méthyle (MAM). Ce polymère est plus connu sous son nom commercial de Plexiglas (nom déposé) mais aussi sous les noms de plastique acrylique, Perspex, Limacryl, Vitroflex, Altuglas, Metacrilat ou Lucite.

Le PMMA est un polymère asymétrique dont la structure moléculaire est représentée à la figure I-4. Il a trois configurations possibles : isotactique, atactique et syndiotactique. Les études par microscopie et rayons X ainsi que sa grande transparence montre bien qu'il est amorphe c'est pour cela que sa structure a été longtemps considérée atactique. Cependant, il est établi actuellement que la plupart des grades commerciaux ont une tacticité mixte : 54% syndiotactique, 37% atactique et 9% isotactique (Brydson, 1982). Les conditions de polymérisation ont une grande influence sur ces pourcentages. Ainsi, si l'on réduit la température de polymérisation à 78°C, on obtient un grade syndiotactique à 78%.

La figure suivante représente le PMMA dans le plan et dans l'espace.

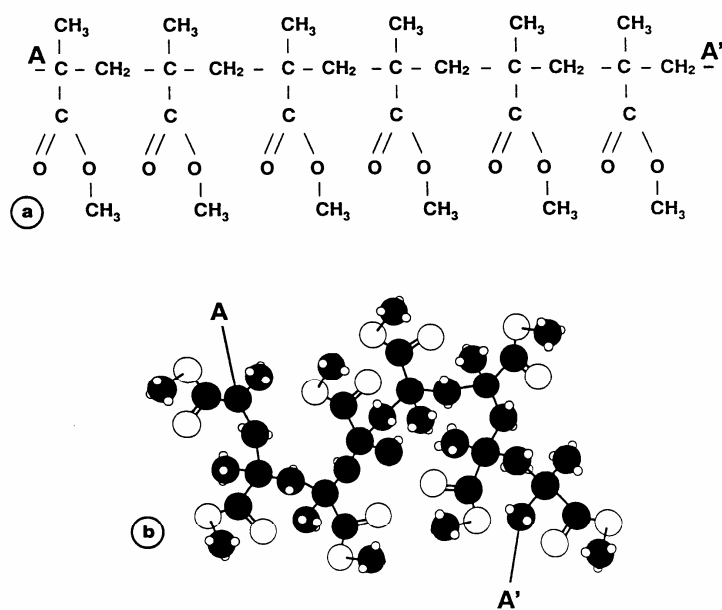


Figure I-5 : Représentation du PMMA :

- a) plane
- b) spatiale

I-12-1 Histoire du PMMA

Historiquement Redtembacher a isolé en 1843 l'acroléine qui, en fixant de l'oxygène, donne l'acide acrylique. La première fabrication d'un méthacrylate, le méthacrylate de méthyle (ou MAM), remonte à 1865. Elle a été réalisée par Francland par déshydratation de l' α -hydroxisobutyrate d'éthyle. Sept ans après, a été mise au point la préparation de plusieurs acrylates (Caspary et Tollens, 1873), en particulier l'acrylate d'allyle qui a une aptitude à la polymérisation. Quelques années plus tard, Kahlbaum (1880) a reporté la polymérisation de l'acrylate de méthyle. A la même période, Fittig (1879 et 1880) a préparé l'acide méthacrylique et noté que certains de ses dérivés ont tendance à polymériser. En 1901, O.Röhm a étudié le méthacrylate de méthyle et son polymère. En 1927, Röhm et Hass ont commencé une production limitée de poly (méthacrylate de méthyle).

I-12-2 Elaboration du MAM

En 1932 Crawford a découvert un nouveau procédé d'élaboration du monomère méthacrylate de méthyle qui a été utilisé jusqu'à nos jours pour son prix de revient compétitif. En 1980, une nouvelle méthode d'élaboration du MAM fondée sur un composé C4 (l'isobutène ou tertiobutanol qui sont produits par la pétrochimie) a été développée, elle permet d'éviter le recours à l'ammoniac nécessaire pour fabriquer l'acide cyanhydrique et à l'acide sulfurique pour générer la fonction méthacrylique ainsi que la formation de sulfate d'ammonium comme sous produit.

Après son élaboration, le MAM est ensuite séparé des différents résidus. C'est un liquide à odeur caractéristique qui a une masse molaire égale à 100 g. Son point d'ébullition est de 100,8 °C sous une pression de 10^5 Pa et sa température de fusion est égale à -48,2 °C. A 20°C, sa densité est égale à 0.94. Il est très réactif sur le plan chimique grâce à la double liaison qu'il comporte (figure I-5). Il présente de ce fait une grande aptitude à la polymérisation et la copolymérisation, même à l'état naturel. Pour le stocker, on lui rajoute généralement 0,1% d'inhibiteur (hydroquinone). Il est conservé sur un tamis moléculaire dans le but d'éliminer les traces d'eau.

I-12-3 Polymérisation du MAM

La polymérisation du MAM est conduite le plus souvent selon un mécanisme radicalaire en chaîne qui comporte trois phases distinctes : l'amorçage du radical primaire, la propagation en chaîne et la terminaison. Les amorceurs qui provoquent la formation de

radicaux libres dans le milieu réactionnel sont généralement des peroxydes ou des composés azoïques. On met parfois aussi en œuvre un procédé de polymérisation anionique mais cette méthode est très peu employée.

La polymérisation du MAM se fait selon deux voies : la polymérisation en émulsion dans l'eau où la réaction est catalysée par des peroxydes et la polymérisation en masse, appelée aussi en coulée, qui est un cas rare d'obtention d'objets thermoplastiques directement par polymérisation. Elle est principalement utilisée dans la production de feuilles ou de tubes. Le processus consiste à remplir des moules avec le monomère ou préférablement avec un sirop de prépolymère (mélange de polymère et de monomère) pour éviter un retrait volumique trop important. La polymérisation est amorcée par les radicaux libres issus de la décomposition thermique de l'azo-bi-isobutyronitrile de formule chimique $((\text{CH}_3)_2\text{CNCN})_2$. La réaction requiert des concentrations en amorceur faibles, de 0,01% à 0,03%, et des cycles de polymérisation variables (de 16 h à 170 h suivant les épaisseurs des feuilles). Elle s'effectue en étuve suivant un programme de température, initialement de 40°C, qui atteint en phase finale 120°C. Elle est suivie d'un recuit vers 145 °C. Dans ce cas le PMMA a un poids très élevé qui facilite le thermoformage en augmentant la plage de température du plateau caoutchoutique.

I-12-4 Propriétés et utilisation du PMMA

I-12-4-1 Propriétés du PMMA

La température de transition vitreuse T_g du PMMA est d'environ +105 °C. La modification du groupe ester induit également un abaissement du T_g (elle est respectivement de 45°C et 115°C pour le PMMA isotactique et le PMMA syndiotactique. C'est la différence entre les forces intramoléculaires liées aux groupements polaires qui implique cet écart entre les valeurs de T_g). Le PMMA est également modifié par copolymérisation avec d'autres monomère tels que des les acrylates, des acrylonitriles, des styrènes et butadiènes, le PMMA a plusieurs propriétés:

- Propriétés optiques exceptionnelles avec une transmission lumineuse supérieure à celle du verre, transparence, limpidité, brillance. Indice optique de 1.49.
- Aspect de la surface très lisse et brillant
- Excellente résistance aux agents atmosphériques.
- Excellente tenue aux rayons ultra-violets, à la corrosion.

- Légèreté : densité de 1.19 g/cm^3 , beaucoup plus léger que le verre.

I-12-4-2 Utilisation du PMMA

- Enseignes, bandeaux lumineux, panneaux signalétiques et publicitaires.
- Présentoir, gravure, ameublement, agencement de magasin, décoration.
- Pièces industrielles.
- Accessoires de sécurité.
- Balle de contact.
- Prothèse dentaire.
- Membranes pour hémodialyseurs.

Le PMMA a de nombreux avantages dont deux principaux :

- Il est transparent
- Il est résistant

Il remplace le verre dans la fabrication de vitres car il permet une excellente transmission de la lumière. Il transmet jusqu'à 92% de la lumière visible, soit plus que le verre. Pour sa résistance aux ultra-violets, il est utilisé pour les vitrages, les protections tuiles ou certain éléments de voitures (feux arrière).

Les surfaces de PMMA montrent une grande dureté, difficilement rayable, ainsi qu'une bonne résistance aux produits chimiques. C'est ainsi le matériau idéal pour les parois transparentes des grands aquariums devant supporter la pression de plusieurs tonnes d'eau.

Malgré tout le PMMA est assez fragile et brûle facilement. Il a une faible résistance aux solvants, particulièrement aux carburants.

I-12-5 Recyclage

Le PMMA peut être fondu puis remoulé, mais c'est surtout par polymérisation qu'on recycle facilement. Par chauffage, le PMMA redonne son monomère de départ, le MAM. Celui-ci est réutilisé pour une nouvelle polymérisation.

I-12-6 Commercialisation du PMMA

Le PMMA se présente sous plusieurs formes commercialisées (Mark Carrega et Coll., 2000) :

- La poudre dont la granulométrie est de l'ordre de $300 \mu\text{m}$.
- Les granulés issus de la polymérisation en suspension.

- Les plaques coulées, généralement de 1 à 6 m², l'épaisseur varie de 2mm à 8cm. Certains blocs à la demande font une épaisseur de 20cm.
- Les plaques extrudées qui se développent car le prix est inférieur au prix des plaques coulées.
- Les mousses.

Les principaux producteurs européens sont les suivants :

- Altulor SA (groupe Atochem) Altuglas et Casocryl.
- Vedril.
- Roeh Oroglas.
- Degussa.
- ICI-Diakon.
- Rsart

I-13 Elaboration et caractérisation du matériau étudié :

On a choisi dans le cadre de notre travail le matériau PMMA M70 préférentiellement à d'autres polymères grâce à son mode de polymérisation en masse mais il peut être obtenu en plaques épaisses sans contraintes internes notables.

I-13-1 Elaboration du matériau

Le procédé d'élaboration du PMMA M70 favorise la formation de chaînes macromoléculaires très longues. La caractérisation des masses moléculaires a été faite à partir d'une analyse par chromatographie sur gel perméable ou GPC (Pollock et Kratz, 1980), en utilisant une méthode d'étalonnage par fraction monodisperses de polystyrène puis une procédure de « calibration universelle ». Le chromatographe BECMAN est équipée d'un jeu de colonnes de type Spherogel et le détecteur est un réfractomètre différentiel. La phase mobile (ou solvant d'éluion) est le THF (tétrahydrofurane).

I-13-2 Caractérisation du matériau

Le polymère M70 est un matériau linéaire non réticulé son premier fabricant est Altulor, il est destiné à l'industrie alimentaire, sa transition vitreuse T_g est égale à 108°C, sa masse volumique a été déterminée par la méthode densitométrique fondée sur le principe de la poussée d'ARCHIMÈDE. Le dispositif de mesure comprend une balance METTLER AE163, précise à 0.01 mg, supportée par des amortisseurs qui assurent sa stabilité mécanique. Elle est

enfermée dans une enceinte où la température est maintenue égale à 25.0 ± 0.1 °C (figure I-6).

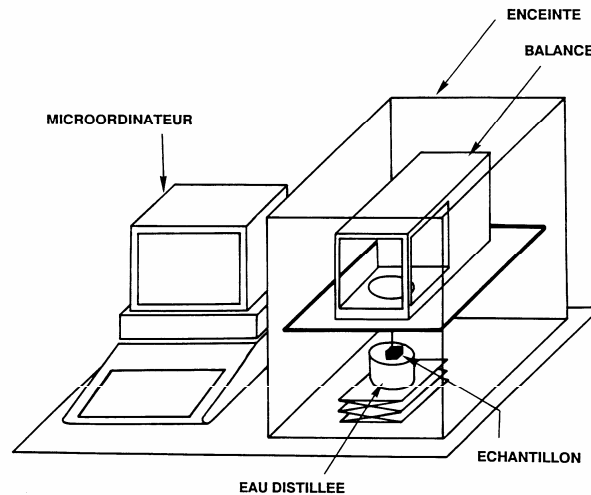


Figure I-6 : Le dispositif de mesure de la masse volumique du PMMA M70

De plus, elle est interfacée à un micro-ordinateur qui traite statistiquement les données de chaque pesée afin d'améliorer la précision des résultats par échantillonnage statistique. Le liquide utilisé est de l'eau distillée, la masse volumique de ce matériau est 1.197 g.cm^{-3} .

I-13-3 Distribution des masses moléculaires

A partir de la distribution des masses moléculaires qui caractérise la dispersion des tailles du matériau, on calcule directement les valeurs statistiques qui définissent conventionnellement la masse moyenne des macromolécules (Bueche, 1962). Les masses moyennes en poids et en nombre que nous trouvons sont respectivement : $\overline{M}_w = 2.48 \times 10^6 \text{ g.mole}^{-1}$ et $\overline{M}_n = 1.75 \times 10^6 \text{ g.mole}^{-1}$. Ce qui donne un indice de polydispersité de 1.42.

II-14 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre des généralités sur les polymères et une description du matériau PMMA, en particulier le PMMA M70. Celui-ci est un matériau linéaire non réticulé destiné à l'industrie alimentaire. Le procédé d'élaboration du PMMA M70 favorise la formation de chaînes macromoléculaires très longues et on l'a choisi préférentiellement à d'autres polymères pour son mode de polymérisation en masse. On étudiera dans le prochain chapitre deux méthodes de simulation statistiques en introduisant avant tout les principales caractéristiques de l'essai de traction.

II-1 Introduction

Avant d'aborder les méthodes de simulation utilisées dans notre travail, on va introduire les principales caractéristiques de l'essai de traction qui est l'essai mécanique le plus indispensable à l'étude des matériaux où l'analyse doit s'appuyer sur des grandeurs intrinsèques (contrainte, déformation). Les contraintes et les déformations sont des concepts destinés à représenter et caractériser l'état mécanique du milieu pour obtenir une approximation de la loi de comportement effective du matériau, le PMMA M70 dans notre cas.

II-2 Essais

II-2-1 Essai de traction

L'essai de traction est la méthode expérimentale qui est utilisée couramment pour la détermination des comportements mécaniques des matériaux. Ces comportements sont décrits par un ensemble de relations entre les contraintes, les déformations et leur évolution au cours du temps. Dans cet essai, on exerce une force de traction sur un barreau de dimension standardisée (Afnor, 1968), jusqu'à sa rupture, en suivant un processus de mise en charge à vitesse de déformation constante. En enregistrant la force F appliquée à l'éprouvette par la machine de traction et son allongement progressif, on remarque que l'effort fourni augmente avec l'allongement puis atteint un maximum et commence à décroître. Cette partie correspond à la striction : au lieu d'être uniformément répartie le long de l'éprouvette, la déformation se localise dans une zone limitée dont la section se réduit de plus en plus, alors que le reste de l'éprouvette ne se déforme pratiquement plus (Souahi, 1986).

On remarque en général la force F et l'allongement ΔL aux dimensions initiales de l'éprouvette d'essai (Cross et Haward, 1973). On obtient ainsi la contrainte nominale σ_N et la déformation nominale ε_N : $\sigma_N = \frac{F}{S_0}$ et $\varepsilon_N = \frac{\Delta L}{L_0}$, où : S_0 est l'aire de la section initiale de l'éprouvette et L_0 correspond à sa longueur initiale. Dans la littérature, on trouve des exemples de ces courbes que ce soit pour le PMMA (Andrews, 1968 ; Roylance et al. 1976 ; Delbosq, 1970. Bauwens, 1982) ou pour d'autres matériaux thermoplastiques (Broutman et Kalpakian, 1969 ; Bauwens-Crowet et al. 1974 ; Flick et Petrie, 1974).

A partir des courbes de déformation nominales $\sigma_N = f(\varepsilon_N)$ on ne peut déduire que des informations très partielles sur le comportement plastique du matériau. De plus, comme nous

allons le voir, ces courbes ne permettent pas, en général, de déduire la loi de comportement plastique du matériau aux grandes déformations. Essentiellement, on détermine quatre grandeurs caractéristiques : le module d'élasticité E , ou module d'YOUNG, donné par la pente de la partie élastique de la courbe, la limite élastique R_e qui donne la valeur de la contrainte nominale théorique à partir de laquelle le matériau commence à se déformer plastiquement, la résistance à la traction R_m qui est définie par la contrainte nominale supportée par l'éprouvette et la déformation à la rupture ε_R qui correspond à la déformation plastique nominale à la rupture en traction de l'éprouvette. Comme la déformation plastique apparaît souvent progressivement, la limite d'élasticité est difficile à déterminer. On adopte alors la limite conventionnelle d'élasticité $R_{0,2}$ qui est la contrainte nominale correspondant à une déformation permanente de 0.2%. Parmi ces caractéristiques, la limite d'élasticité R_e joue un rôle très important, car elle détermine la contrainte limite qu'il ne faut pas dépasser pour ne pas induire des déformations permanentes.

En général, les résultats des essais de traction sont exprimés en fonction des contraintes et déformations nominales. Idéalement, ce sont les contraintes et déformations réelles qui devraient être prises en compte en pratique, leur détermination mais, est rendue très difficile en raison du phénomène de striction. La contrainte réelle σ_r est donnée par le rapport entre la force et la section réelle à tout instant de l'échantillon. Elle est parfois calculée à partir de la contrainte nominale moyennant des hypothèses simplificatrices telles que la conservation du volume de l'échantillon lors de l'étirage. La formule utilisée est alors $\sigma_r = \sigma_N (1 + \varepsilon_N)$. Quant à la déformation réelle ε_r , elle s'exprime en considérant l'accroissement infinitésimal de l'éprouvette de L à $L + \Delta L$. On trouve que la déformation réelle ε_r est reliée à la déformation nominale : $\varepsilon_r = \ln(1 + \varepsilon_N)$ (Bahadure, 1973 ; Pampillo et Davis, 1972). En réalité, ces calculs ne sont pas valables que dans le cas où la déformation est homogène c'est-à-dire pour une réponse viscoélastique (petites déformations) et dans le cas d'un comportement caoutchoutique. A partir de 0.1 environ, l'écart entre ε_r et ε_N devient de plus en plus important (Kurz et al. 1987). De plus, on constate que le maximum de la contrainte nominale ne correspond pas à un maximum de la valeur réelle de la résistance intrinsèque du matériau. En réalité la résistance intrinsèque à la traction du matériau augmente jusqu'à sa rupture. Le maximum de la courbe de traction en contrainte nominale résulte seulement du phénomène de striction qui entraîne une diminution importante de section de l'éprouvette (Souahi, 1986). La force de traction nécessaire à la déformation de l'éprouvette devient alors

plus faible en dépit de l'augmentation de la résistance du matériau. En réalité, la résistance à la traction R_m est une mesure de la résistance de l'éprouvette et non pas celle du matériau. Le maximum de force observé ne correspond donc pas à un adoucissement réel du matériau mais simplement à la diminution rapide de la section de l'éprouvette.

Les machines de traction doivent avoir une rigidité suffisante pour ne pas perturber les mesures effectuées lors de l'étirage de l'échantillon. La déformation élastique du bâti est cependant inévitable. Pour cela l'effort maximal ne doit produire qu'une très faible déformation élastique du bâti.

II-2-2 Courbe générale de traction-allongement des polymères

Dans des applications techniques, la déformation est un facteur bien plus important pour les plastiques que pour les autres matériaux. Le projeteur doit donc bien connaître le comportement mécanique des matériaux polymères pour ne pas dépasser les contraintes maximales permises afin d'éviter des ruptures. Comme pour la plupart des matériaux, une simple courbe traction-allongement constituera un bon élément de base pour connaître le comportement mécanique de tel plastique ou de tel polymère. Cette courbe est habituellement établie à partir des mesures successives des forces exercées sur l'éprouvette, lorsqu'on soumet celle-ci à une traction à vitesse de déformation constante jusqu'à la rupture. Les différents domaines de la courbe (figure II-1) représentent la relation contrainte-déformation en traction de n'importe quel plastique et permettent de déterminer plusieurs quantités utiles. La pente initiale de la courbe permet de déterminer une valeur du module de Young qui est une mesure de rigidité. La courbe permet aussi de connaître la contrainte à la limite élastique du matériau, sa résistance et son degré d'allongement à la rupture. L'aire située entre la courbe et l'axe de déformation représente l'énergie à la rupture et donne une mesure de la ténacité du matériau polymère. La contrainte au point de rupture donne une mesure de la force nécessaire pour rompre le matériau, communément désignée charge de rupture.

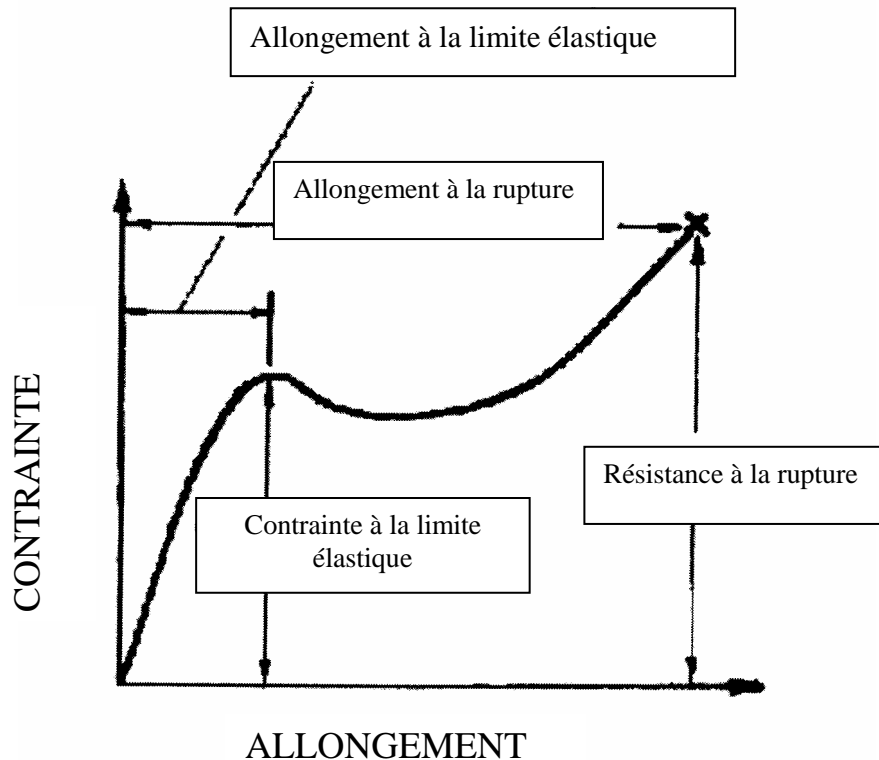


Figure II-1 : Courbe générale traction-allongement des polymères

II-2-3 Comportements typiques des polymères solides

Les différents types de comportement rencontrés dans le cas d'un polymère amorphe sont représentés par les courbes $\sigma(\epsilon)$ de la figure II-2, où le matériau est le PMMA sollicité en traction à différentes températures. A la température ambiante, le PMMA vitreux casse prématurément car le développement des *crazes* devance la plasticité généralisée. A partir de 70°C, c'est l'écoulement plastique qui est prépondérant. Un crochet de traction se produit à la fin du stade viscoélastique tandis que se multiplient des microbranches de cisaillement au centre de l'échantillon. La faible pente qui suit le crochet correspond à un faible durcissement structural initial, tandis que le redressement rapide de la courbe en fin d'essai indique l'orientation de plus en plus des chaînes. Au dessus de T_g , vers 120°C, le seuil de plasticité disparaît totalement car il n'y a pas de limite élastique visible et l'échantillon revient rapidement à l'origine s'il est relâché en cours de l'essai : le PMMA est devenu alors un élastomère hyperélastique.

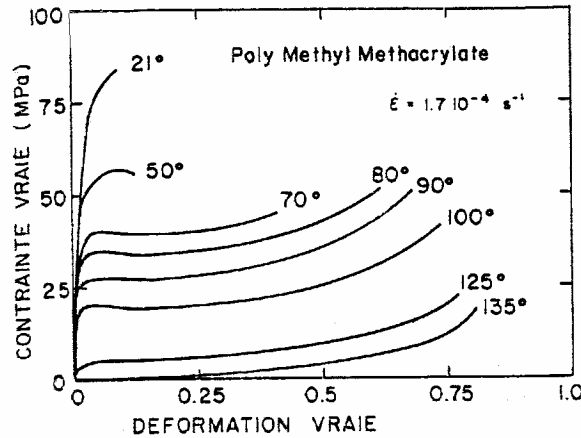


Figure II-2: Comportement plastique (contrainte vraie/déformation vraie) du PMMA à différentes températures (G'Sell C., 1988)

Le comportement de quatre catégories de polymères est illustré à la figure II-3.

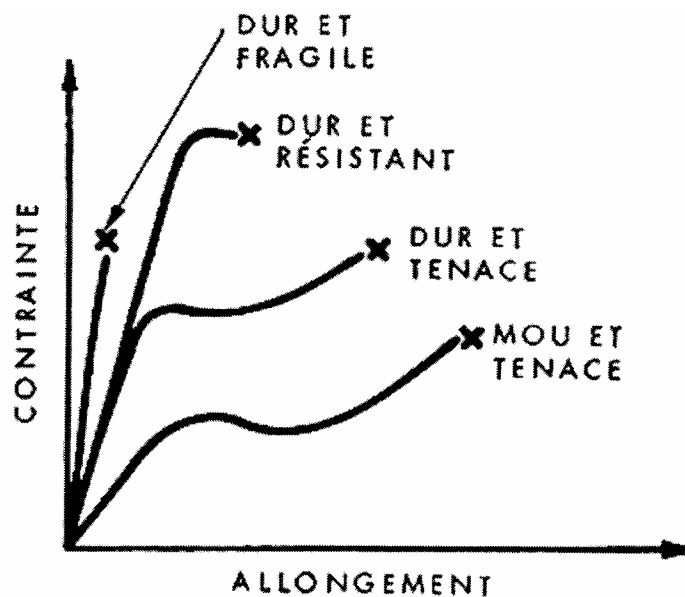


Figure II-3: Courbes traction-allongement de 4 types de polymères

La courbe d'un matériau dur et fragile tel qu'un polymère amorphe à une température bien inférieure à T_g présente habituellement une pente initiale qui indique un module d'élasticité très élevé, une résistance modérée, un faible allongement à la rupture et une aire minime en-dessous de la courbe contrainte-allongement (figure II-4). L'allongement typique est de 2%. En général, la déformation de ces matériaux est élastique jusqu'à la rupture, qui est une cassure fragile. Le polystyrène, le PMMA et de nombreuses résines phénol-formol sont

des exemples de matériaux polymères durs et fragiles à la température ambiante ou au-dessous.

Le module d'élasticité et la résistance des polymères durs et résistants sont élevés. Leur allongement à la rupture est de 5%. La forme de la courbe permet souvent d'affirmer que la rupture du matériau s'est produite à un endroit où on pouvait s'attendre à une limite d'écoulement plastique. Ce type de courbe caractérise certains composés rigides de poly(chlorure de vinyle) et de mélange de polystyrènes.

Certains polymères, comme l'acétate de cellulose, le nitrate de cellulose et les nylons, ont un comportement dur et tenace. Leur contrainte à la limite élastique, module d'élasticité, résistance et leur allongement sont élevés. Sous l'effet d'un étirage, la plupart des polymères de ce groupe subissent un écoulement à froid qui produit une striction dans l'éprouvette. L'étirage à froid améliore la résistance et constitue donc un procédé très important de la technologie des fibres synthétiques.

Les polymères mous et tenaces ont un faible module d'élasticité, des contraintes à la limite élastique peu élevées, une résistance à la rupture modérée et un allongement pouvant aller de 20 à 1000%. Les courbes contrainte-déformation de ce type caractérisent le PVC plastifié et les caoutchoucs (élastomères).

Dans les conditions normales d'utilisation, les polymères sont soit fragiles soit tenaces. Par exemple, le PS, le PMMA ainsi que le PVC non modifié et non plastifié sont habituellement fragiles ; ils se cassent brusquement. Les PVC plastifiés sont considérés comme des matériaux tenaces. Selon la température d'utilisation et l'intensité du choc, c'est-à-dire le taux de déformation, un matériau polymère aura un comportement fragile ou tenace. La résistance au choc qui donne une mesure de la ténacité ou de la capacité du matériau de résister à la rupture sous l'effet d'un impact à grande vitesse des polymères et des plastiques correspondants dépendent de l'écart entre leur température de transition vitreuse T_g et la température d'utilisation ainsi que de leur taux de cristallinité. Bien au-dessous de T_g , les polymères amorphes sont cassants, mais ils deviennent plus tenaces lorsque la température s'approche de T_g . Au-dessus de T_g , les polymères amorphes deviennent caoutchouteux, et on ne parle plus du choc.

II-2-4 Epreuve de traction

Dans ce travail, nous utilisons des éprouvettes axisymétriques ayant une forme de sablier (figure II-4) dont le rayon de courbure est de 20mm pour permettre une localisation de la déformation au centre et minimiser les risques de cisaillement oblique en traction, comme l'ont montré des travaux antérieurs (G'Sell et Jonas, 1981).

Les essais de traction (Souahi, 1993) ont été réalisés sur une machine de traction INSTRON (modèle 8032); son vérin peut exercer une force maximale de 100 KN. La température réelle de l'échantillon est repérée, à son contact, par un thermocouple T de précision. On peut, avec ce dispositif, obtenir une régulation thermique à 0.2 °C près, dans une gamme de température s'étendant de 20 °C à 300 °C. Un logiciel est développé pour mesurer en temps réel la contrainte effective et la déformation effective. Ce programme informatique contrôle également la vitesse de déformation au cours de l'essai pour la maintenir constante.

II-2-5 Etude quantitative du comportement mécanique de l'éprouvette

L'étude quantitative du comportement mécanique d'un matériau en traction s'appuie sur la détermination de la loi phénoménologique (analytique ou numérique) qui exprime les variations de la contrainte σ subie par le matériau en fonction de sa déformation ε et de sa vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$.

Dans les éprouvettes en sablier (figure II-4), la contrainte, la déformation et la vitesse de déformation varient selon l'axe z. Nous avons donc mené l'analyse de telle sorte que les variables σ et ε représentent fidèlement la réponse locale d'un élément de matière soumis à une contrainte uniaxiale à une température constante.

Dans une section droite d'une éprouvette de traction, la composante majoritaire du champ de contrainte est la composante axiale ou contrainte de Kirchoff. Elle s'exprime par l'équation :

$$\sigma_{zz} = \frac{4F}{\pi D^2} \quad (\text{II-1})$$

Où : D est le diamètre local de l'échantillon déformé (figure II-4)

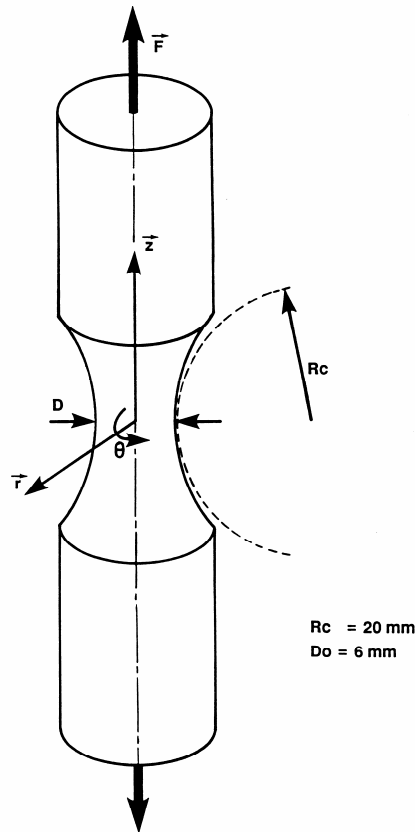


Figure II-4 : L'éprouvette en sablier

Différents travaux antérieurs ont montré que pour une éprouvette de section non uniforme (résultant de l'usinage initial ou de la formation d'une section), les composantes de la contrainte radiale (σ_r) et circonférentielle ($\sigma_{\theta\theta}$) ne sont plus négligeables (Ally Helal, 1982 ; G'Sell et al, 1983 et 1985). Cet effet de triaxialité est d'autant plus sensible que la courbure locale du profil est plus marquée. Il s'exprime par le « Facteur de triaxialité » $F_T = \sigma_{\text{eff}} / \sigma_{zz}$, ou σ_{eff} est la contrainte effective qui, en traction uniaxiale pure, produirait une vitesse de déformation effective σ_{eff} , observée dans l'éprouvette réelle.

En se fondant sur une loi d'écoulement déduite du critère de VON MISES, Bridgman (1944) a dérivé une expression du facteur de triaxialité :

$$F_T = \frac{1}{\left(1 + 4 \frac{R_c}{D}\right) \log\left(1 + \frac{D}{4R_c}\right)} \quad (\text{II-2})$$

Où : R_c est le rayon de courbure du profil au centre de la striction de diamètre courant D .

Le calcul détaillé du facteur de Bridgman est présenté à l'annexe I.

L'analyse de Bridgman est la plus couramment utilisée. Sa validité opérationnelle a été confirmée dans un travail précédent (G'Sell et al. 1985). Malgré les approximations qu'elle suppose, elle a été retenue pour cette étude. En ce qui concerne le champ de déformation, il a été choisi de déterminer sa composante radiale par la mesure de la réduction locale du diamètre dans la section la plus faible de l'éprouvette.

$$\varepsilon_{rr} = \text{Log} \left(\frac{D}{D_0} \right) \quad (\text{II-3})$$

Où : D_0 est le diamètre minimum de l'éprouvette non déformée.

Sous l'hypothèse que le matériau soit transversalement isotrope et se déforme à volume constant, la composante axiale de la déformation se déduit directement de la composante radiale par la relation suivante :

$$\varepsilon_{zz} = -2 \varepsilon_{rr} \quad (\text{II-4})$$

En sachant que les effets de triaxialité de contrainte dans le plan de symétrie sont d'une amplitude de second ordre, nous négligerons leur influence sur la distribution locale des déformations. Nous considérerons alors dans ce qui suit que la déformation effective locale s'exprime simplement par :

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_{zz} = 2 \text{Log} \left(\frac{D_0}{D} \right) \quad (\text{II-5})$$

En conséquence, la vitesse de déformation effective s'écrit :

$$\dot{\varepsilon}_{\text{eff}} = \frac{d\varepsilon_{\text{eff}}}{dt} = - \frac{2}{D} \frac{dD}{dt} \quad (\text{II-6})$$

Cette méthode d'évaluation possède trois avantages :

- 1) Le plan matériel pour la détermination de déformation est le même que pour la mesure de la contrainte.
- 2) L'état de contrainte et de déformation dans ce plan a la propriété singulière d'être quasiment homogène pour des raisons de symétrie.
- 3) Les valeurs de σ et ε sont obtenues directement à partir de la mesure du diamètre minimum lors du développement de la striction.

Le problème expérimental se résume donc à savoir mesurer les variations du diamètre courant en fonction du temps, au centre de la striction, pendant le déroulement de l'essai de traction.

II-2-6 Résultats d'essai de traction du PMMA

Les essais de traction ont été réalisés sur le matériau PMMA M70 pour une vitesse de déformation : $5 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$, le domaine de température choisi est compris entre 95°C et 140° .

Les résultats expérimentaux aux différentes températures nous montrent les variations de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie (figure II-5).

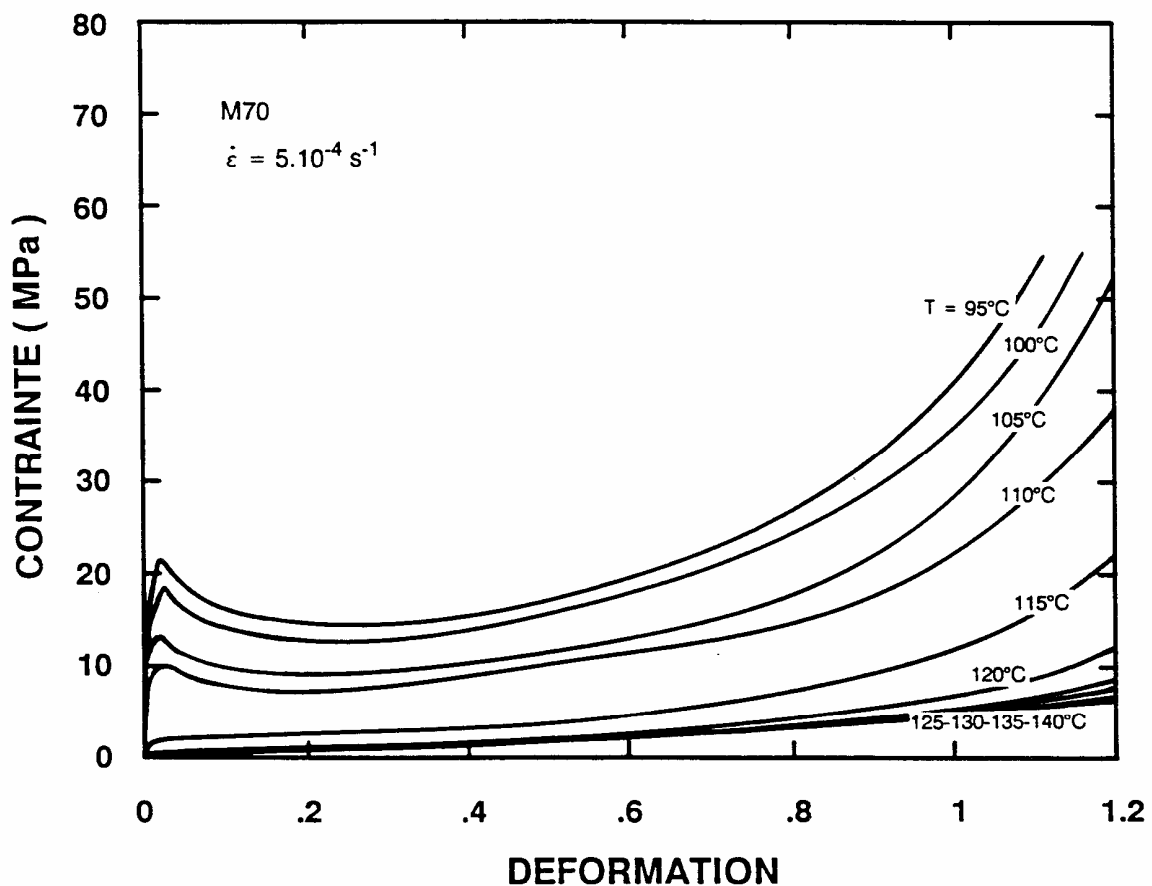


Figure II-5 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie (Souahi, 1993)

Après avoir présenté les essais que nous allons simuler, nous traitons maintenant les deux méthodes: les Réseaux de Neurones Artificiels, ou RNA, et les Algorithmes Génétiques, ou AG.

II-3 Méthode des Réseaux de Neurones Artificiels

II-3-1- Historique

1890 : W.James, célèbre psychologue américain introduit le concept de mémoire associative, et propose ce qui deviendra une loi de fonctionnement pour l'apprentissage sur les Réseaux de Neurones Artificiels (RNA) connue plus tard sous le nom de loi de Hebb.

1943 : J.Mc.Culloch et W.Pitts sont les premiers à montrer que des Réseaux de Neurones Formels simples peuvent réaliser des fonctions logiques, arithmétiques et symboliques complexes.

1949 : D.Hebb physiologiste américain explique le conditionnement chez l'animal par les propriétés des neurones eux-mêmes. Ainsi un conditionnement de type pavlovien tel que nourrir tous les jours à la même heure un chien, entraîne chez cet animal la sécrétion de salive à cette heure précise même en absence de nourriture. La loi de modification des propriétés des connexions entre neurones qu'il propose explique en partie ce type de résultats expérimentaux.

1957 : F.Rosenblat développe le modèle du perceptron. Il construit le premier neuro-ordinateur basé sur ce modèle et l'applique au domaine de la reconnaissance de forme.

1960 : B.Widrow un automaticien, développe le modèle Adaline (Adaptive Linear Element) dans sa structure, le modèle ressemble au perceptron. Cependant la loi d'apprentissage est différente. B.Widrow a créé dès cette époque la « Memistor Corporation ». Il est aujourd'hui le président de l'International Neural Network Society (INNS).

1969 : M.Minsky et S.Papert publient un ouvrage qui met en exergue les limitations théoriques du perceptron. La limitation alors connue notamment concernant l'impossibilité de traiter par ce modèle des problèmes non linéaires

1967-1982 : toutes les recherches se poursuivent, mais déguisées sous le couvert de divers domaines. De grands noms travaillent durant cette période tels que S.Grossberg, T.Kohonen. Albus développa son adaptatif « Cerbral Model Articulation Controller », qui se résume à une sorte de table de correspondances, imitant sa perception de la mémoire humaine (Albus 1972).

1982 : J.J.Hopfield physicien à qui on doit le renouveau d'intérêt pour les RNA. Notons qu'à cette date, l'intelligence artificielle est l'objet d'une certaine désillusion, elle n'a pas répondu à toutes les attentes et s'est même heurté à de sérieuses limitations. Aussi bien que les limitations du perceptron mises en avant par M.Minsky ne soient pas levées par le modèle d'Hopfield.

1983 : La machine de Boltzmann est le premier modèle connu pour traiter de manière satisfaisante les limitations recensées dans le cas du perceptron.

1985 : la rétropropagation du gradient apparat. Elle a été découverte par trois groupes de chercheurs indépendants. De nos jours, le réseau multicouches et la rétropropagation du gradient restent le modèle le plus étudié et le plus productif au niveau d'applications. Une architecture similaire au MLP, est le Probabilistic Neural Network (PNN), qui diffère de ce dernier par sa fonction d'activation exponentielle et les formes de ses connections. Durant cette période plusieurs idées originales telles : les réseaux ART (« Adaptive Resonance Theorie ») sont des réseaux d'apprentissage par compétition.

1987 : la confirmation des réseaux de Hopfield comme les réseaux à mémoires associatives, très utiles pour les problèmes de classification (clustering). Plus tard, Kosko étendra ce concept pour développer son « Bi-directional Associative Memory » (BAM) (Kosko 1985).

1988 : Broomhead et Lowe (1988) s'inspirant des fonctions radiales, développent les réseaux RBF (Radial Basis Fonction). Ils ouvrirent la voie à Chen et Billings (1992) et leurs Functional Link Network (FLN) où une transformation nonlinéaire des entrées permet une réduction de la puissance de calcul ainsi qu'une convergence plus rapide.

1997 : Implantation des Réseaux de Neurones Artificiels sous Silicium (VLSI) ce qui lève beaucoup de limitation de vitesse et offre des possibilités pas encore envisagées jusque là.

II-3-2 Les réseaux de neurones

II-3-2-1 Les neurones formels

Un neurone formel (Moussaoui, 2006) ou simplement neurone est une fonction algébrique non linéaire et bornée, dont la valeur dépend de paramètres appelés coefficients ou poids. Les variables de cette fonction sont habituellement appelées « entrées » du neurone, et la valeur de la fonction est appelée « sortie ».

Un neurone est donc avant tout un opérateur mathématique, dont on peut calculer la valeur numérique par quelques lignes de logiciel. Le neurone est représenté à la figure suivante :

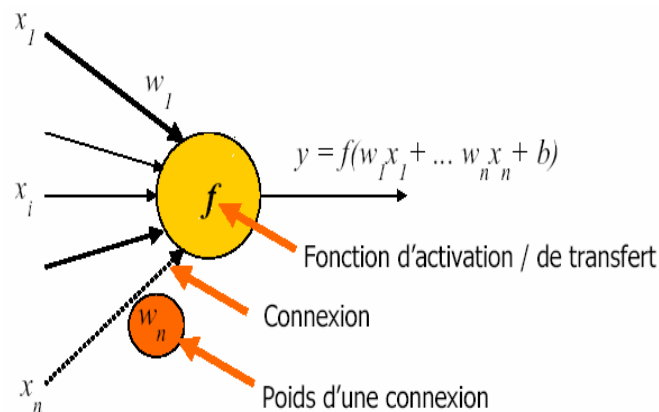


Figure II-6 : Neurone formel

Où les x_i sont les variables (entrées) du neurone, les w_i sont des paramètres ajustables, y est la sortie du neurone et b est le biais.

II-3-2-2 Différents types de neurones :

La fonction d'activation, ou de transfert, utilisée dans le modèle de McCulloch et Pitts (1943) est la fonction échelon (figure II-7). Elle fait passer l'activation du neurone d'une valeur à une autre dès que l'entrée résultante dépasse un certain seuil. L'inconvénient de cette

fonction est qu'elle n'est pas différentiable, ce qui pose un problème pour les algorithmes basés sur le gradient.

Pour remédier à cet inconvénient, on cherche à approximer cette fonction d'activation par une fonction « non linéaire » différentiable.

Deux fonctions de ce type sont particulièrement intéressantes et souvent utilisées : la fonction tangente hyperbolique (figure II-7) définie par :

$$f(u) = \tanh(\beta u) = \frac{e^{\beta u} - e^{-\beta u}}{e^{\beta u} + e^{-\beta u}} \quad (\text{II-7})$$

Et la fonction logistique (figure II-7) dont l'expression est la suivante :

$$f_{\beta}(u) = \frac{1}{1 + e^{-\beta u}} \quad (\text{II-8})$$

La fonction « tanh » est bornée entre -1 et +1 alors que la fonction logistique est bornée entre 0 et 1. Ces deux fonctions, appelées fonctions sigmoïdes, sont liées par la relation :

$$\tanh(\beta u) = 2 f_{\beta}(u) - 1 \quad (\text{II-9})$$

Où le paramètre β est appelé le gain. Plus le gain est important, plus la saturation du neurone est rapide.

La fonction logistique est appelée aussi sigmoïde unipolaire. Elle admet une variante appelée sigmoïde bipolaire (figure II-7) ayant pour expression :

$$f_{\beta}(u) = \frac{1 - e^{-\beta u}}{1 + e^{-\beta u}} \quad (\text{II-10})$$

Les fonctions sigmoïdes ont la propriété d'être différentiables, ce qui est nécessaire pour les algorithmes basés sur le gradient. Une autre propriété intéressante est le fait que les fonctions dérivées s'expriment facilement à l'aide des fonctions elles-mêmes, ce qui permet un gain significatif de temps de calcul (Billings et al., 1992).

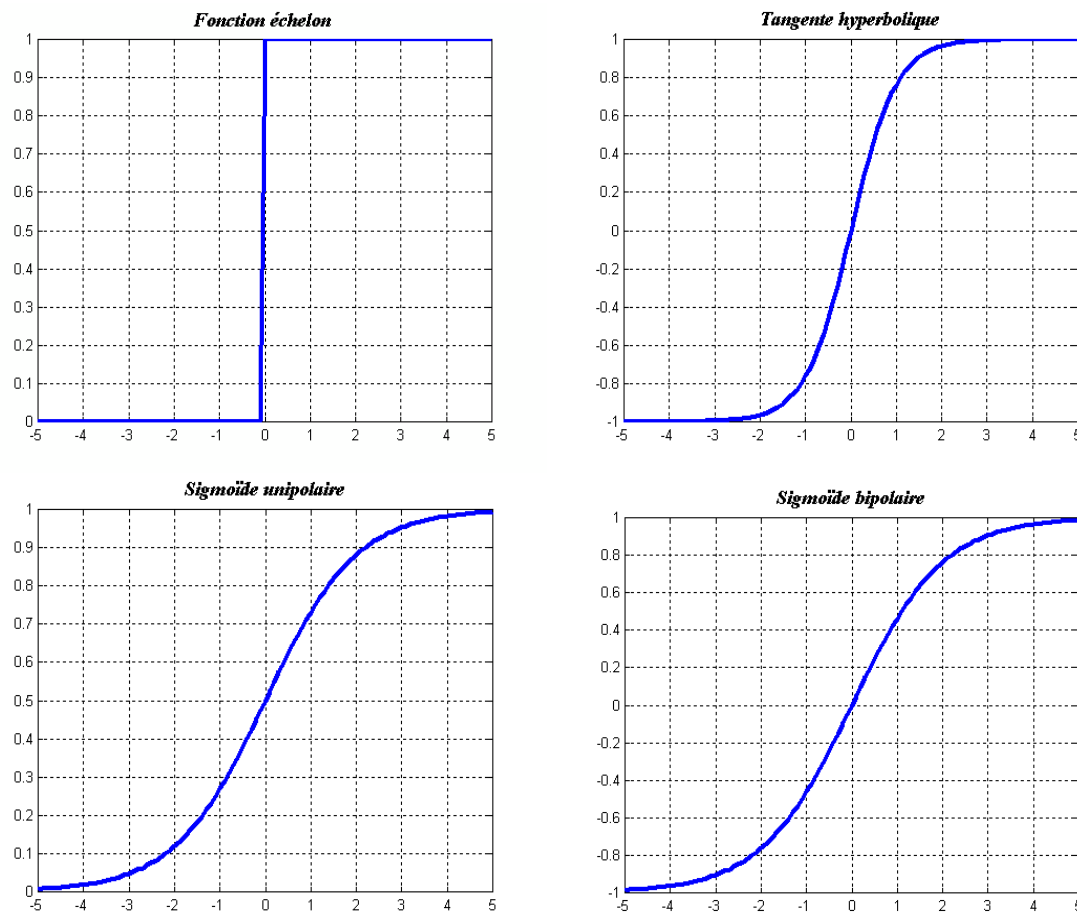


Figure II-7 : différents types de fonctions d'activations

Un neurone formel ne réalise donc rien d'autre qu'une somme pondérée suivie d'une non linéarité. C'est l'association de tels éléments simples sous la forme de réseaux qui permet de réaliser des fonctions utiles pour les applications industrielles.

III-3-2-3 Les réseaux de neurones formels

On distingue deux grands types de réseaux de neurones : Les réseaux de neurones non bouclés (statiques) et les réseaux de neurones bouclés (dynamiques ou récurrents).

III-3-2-3-1 Les réseaux de neurones non bouclés ou statique

Un réseau de neurones non bouclé réalise une, ou plusieurs, fonction algébrique de ses entrées, par composition des fonctions réalisées par chacun de ses neurones.

Un réseau de neurones non bouclé est représenté graphiquement par un ensemble de neurones connectés entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans retour

en arrière, si l'on représente le réseau comme un graphe dont les nœuds sont les neurones et les arêtes sont les connexions entre ceux-ci, le graphe d'un réseau non bouclé est acyclique. Le terme de connexions est une métaphore : dans la très grande majorité des applications, les réseaux de neurones sont des formules algébriques dont les valeurs numériques sont calculées par des programmes d'ordinateurs, non des objets physiques (circuits électroniques spécialisés) ; néanmoins, le terme de connexion, issu des origines biologiques des réseaux de neurones, est passé dans l'usage, car il est commode quoique trompeur. Il a même donné naissance au terme de « connexionisme ».

✚ Perceptron multicouches (PMC)

La figure II-8 représente un réseau de neurones non bouclé qui a une structure particulière, très fréquemment utilisée : c'est le PMC. Ses neurones sont organisés en couches successives. Chaque neurone d'une couche reçoit des signaux de la couche précédente et transmet le résultat à la suivante, si elle existe.

Les neurones d'une même couche ne sont pas interconnectés. Un neurone ne peut donc envoyer son résultat qu'à un neurone situé dans une couche postérieure à la sienne. L'orientation du réseau est fixée par le sens, unique, de propagation de l'information, de la couche d'entrée vers la couche de sortie.

Pour le réseau considéré, les notions de couches d'entrée et de sortie sont donc systématiques. Ces dernières constituent l'interface du réseau avec l'extérieur. La couche d'entrée reçoit les signaux ou variables d'entrée et la couche de sortie fournit les résultats. Enfin, les neurones des autres couches (couches cachées) n'ont aucun lien avec l'extérieur et sont appelés neurones cachés.

Par convention, les neurones d'entrée ont toujours une fonction d'activation « identité », laissant passer l'information sans la modifier.

En ce qui concerne les neurones de sortie, on peut leur associer une fonction d'activation linéaire ou non, dérivable ou non, suivant la nature du problème à résoudre.

En ce qui concerne la fonction d'activation associée aux neurones cachés, on utilise dans le cadre de ce mémoire une fonction d'activation de la famille des sigmoïdes comme on

va le voir dans le prochain chapitre.

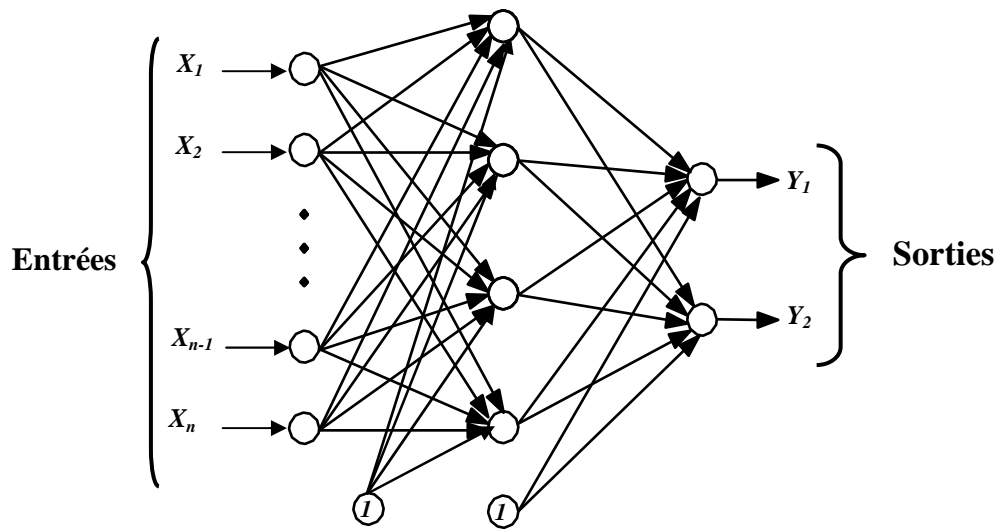


Figure II-8: Perceptron multicouches à une couche cachée

Les réseaux de neurones non bouclés sont des objets statiques : si les entrées sont indépendantes du temps, les sorties le sont également. Ils sont utilisés principalement pour effectuer des tâches d'approximation de fonction non linéaire, de classification ou de modélisation de processus statiques non linéaires.

II-3-2-3-2 Les réseaux de neurones bouclés ou dynamiques

Contrairement aux réseaux de neurones non bouclés dont le graphe de connexions est acyclique, les réseaux de neurones bouclés peuvent avoir une topologie de connexions quelconque, comprenant notamment des boucles qui ramènent aux entrées la valeur d'une ou plusieurs sorties. Pour qu'un tel système soit causal, il faut évidemment qu'à toute boucle soit associé un retard : Un réseau de neurones bouclé est donc un système dynamique, régi par des équations différentielles ; Comme l'immense majorité des applications sont réalisées par des programmes d'ordinateurs, on se place dans le cadre des systèmes à temps discret, où les équations différentielles sont remplacées par des équations aux différences.

Un réseau de neurones bouclé à temps discret est donc régi par une ou plusieurs équations aux différences non linéaires, résultant de la composition des fonctions réalisées par chacun des neurones et des retards associés à chacune des connexions.

Les réseaux de neurones bouclés sont utilisés pour effectuer des tâches de modélisation de systèmes dynamiques, de commande de processus, ou de filtrage.

Il existe d'autres catégories de réseaux de neurones artificiels :

1- Réseaux à base de fonction radial ou radial-basis function (RBF)

- Approximateurs locaux de fonctions
- Réseau à une couche seule
- Apprentissage facile

2- Réseaux de Hopfield

- Réseaux à couche unique, avec un retour des sorties sur les entrées
- Très liés au mémoires associatives
- Forme continue et discrète

3- Les cartes de Kohonen ou Kohonen Self-Organizing Feature Maps (SOFM)

- Modèle simplifié de la notion caractéristique liée à une région donnée du cerveau
- Apprentissage par compétition
- Principalement utilisé pour la classification

II-3-2-4 Propriétés fondamentales des Réseaux de Neurones

Les propriétés essentielles des réseaux de neurones sont:

II-3-2-4-1 Le parallélisme

Cette notion se situe à la base de l'architecture des réseaux de neurones considérés comme ensemble d'entités élémentaires qui travaillent simultanément. Le parallélisme permet une rapidité de calcul supérieure mais exige de penser et de poser différemment les problèmes à résoudre.

II-3-2-4-2 La capacité d'adaptation

Elle se manifeste par la capacité d'apprentissage qui permet de tenir compte des nouvelles contraintes ou données du monde extérieur. Certains réseaux se caractérisent aussi par leur capacité d'auto-organisation qui assure leur stabilité en tant que systèmes dynamiques capables de tenir compte de situations non encore connues.

II-3-2-4-3 La facilité de construction

La simulation informatique de réseaux de neurones pour une petite application est simple et ne nécessite qu'un temps de développement assez court. Pour des applications plus complexes, l'utilisation de simulateur ou de carte accélératrice se révèle utile.

II-3-2-4-4 L'approximation universelle parcimonieuse

a) L'approximation universelle

Les travaux de Cybenko (Cybenko, 1989) et Funahashi (Funahashi, 1989) ont prouvé la possibilité d'approcher des fonctions continues, au sens de la norme uniforme sur les compacts, par des réseaux de neurones.

Les réseaux considérés sont de type réseau à une couche de neurones cachés à fonction d'activation non linéaire, et à neurones de sortie linéaires. Dans le cas du théorème de Cybenko, l'hypothèse sur la fonction d'activation est qu'elle a pour limite 0 en $-\infty$ et 1 en $+\infty$, dans celui de Funahashi, qu'elle est croissante, non constante et bornée. Les fonctions non continues, mais mesurables, peuvent aussi être approchées, mais dans un sens moins fort (Hornik et al. 1990). Il existe par ailleurs quelques résultats sur le nombre de neurones requis pour approcher une fonction avec une précision fixée, pour certaines classes de fonctions (Neelakantan et Guiver, 1998).

Ces résultats affirment donc, pour toute fonction déterministe usuelle, l'existence d'une approximation par un réseau de neurones. Les réseaux complètement connectés ou à couches, et à neurones cachés sigmoïdaux, remplissent les conditions d'application des théorèmes.

b) La parcimonie

Lorsque l'on cherche à modéliser un processus à partir des données, on s'efforce toujours d'obtenir les résultats les plus satisfaisants possibles avec un nombre minimum de paramètres ajustables. Dans cette optique, (Hornik et al. 1994) a montré que : Si le résultat de l'approximation, c'est-à-dire la sortie du réseau de neurones est une fonction non linéaire des paramètres ajustables, elle est plus parcimonieuse que si elle est une fonction linéaire de ces paramètres. De plus, pour des réseaux de neurones à fonction d'activation sigmoïdale, l'erreur commise dans l'approximation varie comme l'inverse du nombre de neurones cachés, et elle est indépendante du nombre de variables de la fonction à approcher. Par conséquent, pour une

précision donnée, donc pour un nombre de neurones cachés donné, le nombre de paramètres du réseau est proportionnel au nombre de variables de la fonction à approcher.

Ce résultat s'applique aux réseaux de neurones à fonction d'activation sigmoïdale puisque la sortie de ces neurones n'est pas linéaire par rapports aux poids synaptiques.

La spécificité des réseaux de neurones réside donc dans le caractère parcimonieux de l'approximation : A précision égale, les réseaux de neurones nécessitent moins de paramètres ajustables, comme les poids des connexions, que les approximateurs universels couramment utilisés ; Plus précisément, le nombre de poids varie linéairement avec le nombre de variables de la fonction à approcher, alors qu'il varie exponentiellement pour la plupart des autres approximateurs (Hornik et al, 1994).

Qualitativement, la propriété de parcimonie se comprend de la manière suivante: Lorsque l'approximation est une combinaison linéaire de fonctions élémentaires fixées, des monômes par exemple, où des gaussiennes à centres et écarts-types fixes, on ne peut ajuster que les coefficients de la combinaison ; En revanche, lorsque l'approximation est une combinaison linéaire de fonctions non linéaires à paramètres ajustables, un perceptron multicouche par exemple, on ajuste à la fois les coefficients de la combinaison et la forme des fonctions que l'on combine. Ainsi, dans un perceptron multicouche, les poids de la première couche déterminent la forme de chacune des sigmoïdes réalisées par les neurones cachés, et les poids de la seconde couche déterminent une combinaison linéaire de ces fonctions. On conçoit facilement que cette souplesse supplémentaire, conférée par le fait que l'on ajuste la forme des fonctions que l'on superpose, permet d'utiliser un plus petit nombre de fonctions élémentaires, donc un plus petit nombre de paramètres ajustables. Nous allons voir ultérieurement pourquoi cette propriété de parcimonie est précieuse dans les applications industrielles.

Rappelons que ces résultats concernent l'utilisation de réseaux de neurones pour l'approximation uniforme de fonctions connues ; Il est pourtant rare que les réseaux de neurones soient mis en œuvre dans ce cadre. Nous allons montrer dans le paragraphe suivant que la technique des réseaux de neurones est généralement utilisée comme une méthode de modélisation statistique.

II-3-2-4-5 Réseaux de neurones et régressions non linéaires

Les réseaux de neurones ne sont pratiquement jamais utilisés pour réaliser l'approximation d'une fonction connue. Dans la très grande majorité des applications, les réseaux de neurones sont utilisés pour réaliser une modélisation ou régression non linéaire. A cet effet, on réalise des mesures, en nombre fini, des entrées et des sorties du processus que l'on cherche à modéliser. Ces mesures sont évidemment entachées de bruit, ou affectées par des perturbations non mesurées. On suppose que les résultats des mesures sont valablement modélisées par la somme d'une fonction inconnue, dite fonction de régression, et d'une variable aléatoire de moyenne nulle. La modélisation consiste alors à approcher la fonction de régression inconnue à l'aide de fonctions paramétrées, par exemple des RNA, dont on ajuste les paramètres lors d'un processus dit d'apprentissage.

Comme le nombre de mesure à effectuer sur le processus doit être plus grand que le nombre de paramètres du modèle à ajuster, la parcimonie des réseaux de neurones a une conséquence pratique très importante : pour obtenir une précision de modélisation donnée, un modèle non linéaire par rapport à ses paramètres, un réseau de neurones par exemple, nécessite un plus petit nombre de mesures qu'un modèle linéaire par rapport à ses paramètres, donc non parcimonieux, tel qu'un polynôme.

Contrairement à une idée reçue, les réseaux de neurones ne sont pas donc des modèles surparamétrés, bien au contraire, ils sont parcimonieux en nombre de paramètres. De manière générale, un réseau de neurones permet donc de faire un meilleur usage des mesures disponibles que les méthodes de régression non linéaires conventionnelles. Ce gain peut être considérable lorsque le processus à modéliser dépend de plusieurs variables.

Ainsi, à la lumière de cette propriété fondamentale, la technique des RNA apparaît comme une puissante méthode de régression non linéaire: Ce n'est donc rien d'autre qu'une extension des méthodes de régression linéaire ou multilinéaires proposées par tous les logiciels qui permettent de faire de la modélisation de données.

Contrairement à une croyance répandue, la méthode des RNA ne relève donc pas de l'Intelligence Artificielle au sens classique du terme, mais elle constitue une branche des statistiques appliquées. Il ne faut donc pas être victime du vocabulaire utilisé comme :

neurones, apprentissage, etc. Le tableau ci-dessous résume les équivalences entre le vocabulaire des statistiques et celui des réseaux de neurones.

Réseaux de neurones	Statistiques
Choix de l'architecture	Choix de la famille de fonctions pour approcher la fonction de régression
Ensemble d'apprentissage	Observations
Apprentissage	Estimation des paramètres de l'approximation de la fonction de régression
Généralisation	Interpolation, extrapolation

Tableau II-1 : Réseaux de neurones et statistiques

II-3-2-5 Apprentissage d'un réseau de neurones

Un réseau de neurones définit une famille de fonctions. L'apprentissage consiste à déterminer la solution du problème posé au sein de cette famille de fonctions qui ont des capacités limitées comme les fonctions linéaires ou au contraire permettent la construction de fonctions aussi complexes comme les PMC. Le principe d'apprentissage est l'optimisation d'une fonction de coût calculée à partir des exemples de la base d'apprentissage et de la sortie du réseau de neurones. Les méthodes numériques utilisées sont le plus souvent des méthodes approchées basées sur des techniques de gradient.

En d'autres termes, l'apprentissage d'un RNA consiste à déterminer les valeurs des poids permettant, à la sortie du réseau de neurones, d'être aussi proche que possible de l'objectif fixé.

II-3-2-6 Algorithme de Rétro-propagation (RP)

L'algorithme de rétropropagation du gradient, Back-propagation en Anglais, figure aujourd'hui parmi les algorithmes d'apprentissage les plus utilisés.

Selon la littérature, la RP a été proposée plusieurs fois et de manière indépendante (Bryson et Ho, 1969 ; Werbos, 1974 ; Parker, 1985) et enfin Rumelhart et les membres du groupe PDP en 1986 (Rumelhart et al. 1986). Une approche similaire a également été proposée par Le Cun (1985).

D'après (Hassibi et Stork, 1993), des liens sont établis avec la technique de (Robbins et Monro, 1951). Cependant, la popularisation de la RP et son développement restent liés aux travaux du groupe PDP dirigé par Rumelhart.

On considère un réseau à trois couches illustré à la figure II-9.

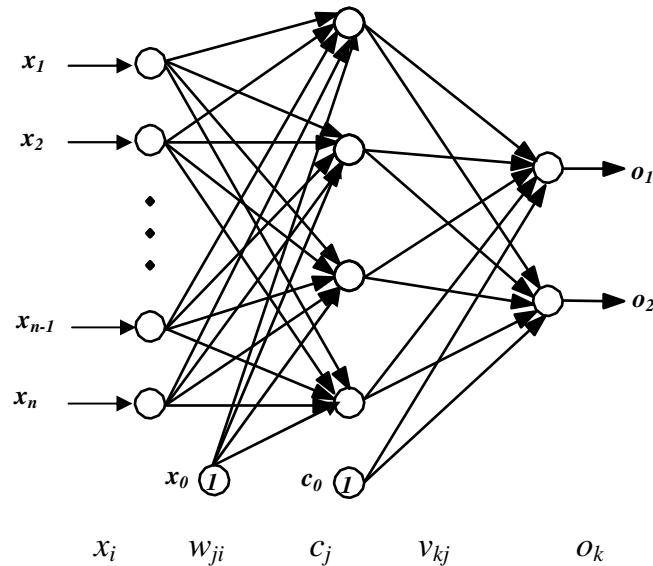


Figure II-9: Définition des notations pour un PMC

Les conventions de notation sont les suivantes :

- o_k : activation de la $k^{\text{ème}}$ unité de sortie, $k = 1, \dots, M$;
- t_k : activation désirée de la $k^{\text{ème}}$ unité de sortie;
- c_j : activation de la $j^{\text{ème}}$ unité cachée, $j = 0, 1, \dots, n_h$; $c_0 = 1$: c'est l'entrée du biais pour la couche de sortie.
- x_i : $i^{\text{ème}}$ entrée externe du réseau ; $i = 0, 1, \dots, n$; $x_0 = 1$: entrée du biais pour la couche cachée.
- w_{ji} : poids d'une connexion entre la $i^{\text{ème}}$ entrée et la $j^{\text{ème}}$ unité cachée.
- v_{kj} : poids d'une connexion entre la $j^{\text{ème}}$ unité cachée et la $k^{\text{ème}}$ unité de sortie.

Les indices i , j et k font référence aux unités d'entrée, aux unités cachées et aux unités de sortie, respectivement. L'exposant p correspond au numéro de l'exemple présenté à l'entrée du réseau : $p = 1, \dots, n_A$, où n_A est le nombre d'exemples d'apprentissage. Le $p^{\text{ème}}$ exemple est noté $x^p = [x_0^p, \dots, x_i^p, \dots, x_n^p]$ et la $i^{\text{ème}}$ composante x_i^p désigne la $i^{\text{ème}}$ entrée

lorsque le $p^{\text{ème}}$ exemple est présenté au réseau. Pour un exemple p , la $j^{\text{ème}}$ unité cachée a l'entrée résultante I_j^p :

$$I_j^p = \sum_{i=0}^n w_{ji} x_i^p \quad (\text{II-11})$$

et une activation C_j^p :

$$C_j^p = f(I_j^p) = f\left(\sum_{i=0}^n w_{ji} x_i^p\right) \quad (\text{II-12})$$

Où f est la fonction d'activation. La $k^{\text{ème}}$ unité de sortie reçoit une entrée résultante I_k^p définie par :

$$I_k^p = \sum_{j=0}^n v_{kj} C_j^p \quad (\text{II-13})$$

Et génère en sortie l'activation O_k^p :

$$O_k^p = f(I_k^p) \quad (\text{II-14})$$

Comme la fonction d'activation des neurones de sorties pour un PMC est linéaire, l'équation (II-14) devient :

$$O_k^p = I_k^p \quad (\text{II-15})$$

La fonction de coût usuelle est l'erreur quadratique moyenne définie par :

$$E(w) = 1/2 \sum_{k,p} (t_k^p - o_k^p)^2 \quad (\text{II-16})$$

Où w est le vecteur contenant tous les poids du réseau. La fonction $E(w)$ est continue et différentiable par rapport à chaque poids. Pour déterminer les poids qui la minimisent, on utilise l'algorithme de descente du gradient (Moussaoui et al, 1999). Pour faciliter la notation, $E(w)$ sera notée E dans ce qui suit.

Pour les poids des connexions des unités cachées vers les unités de sortie, le terme d'adaptation des poids au cours de l'apprentissage est défini par :

$$\begin{aligned}\Delta v_{kj} &= -\eta \frac{\partial E}{\partial v_{kj}} \\ &= \eta \sum_p \delta_k^p c_j^p\end{aligned}\quad (\text{II-17})$$

Avec :

$$\delta_k^p = (t_k^p - o_k^p) \quad (\text{II-18})$$

Dans le cas de sorties linéaires.

Pour les poids des connexions entre la couche d'entrée et la couche cachée, le terme d'adaptation des poids est :

$$\begin{aligned}\Delta v_{kj} &= -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} = -\eta \sum_p \frac{\partial E}{\partial c_j^p} \frac{\partial c_j^p}{\partial w_{ji}} \\ &= \eta \sum_{k,p} (t_k^p - o_k^p) v_{kj} f'(I_j^p) x_i^p = \eta \sum_p \delta_j^p x_i^p\end{aligned}\quad (\text{II-19})$$

$$\text{Avec:} \quad \delta_j^p = f'(I_j^p) \sum_k v_{kj} \delta_k^p \quad (\text{II-20})$$

On constate que les équations (II-17) et (II-19) ont la même forme et ne diffèrent que par la définition de la quantité δ . Ces formules se généralisent facilement aux cas des réseaux possédant un nombre quelconque de couches cachées.

D'après l'équation (II-20), le calcul de δ_j pour une unité cachée j nécessite les δ_k des unités de sortie qui sont fonctions des erreurs en sortie du réseau ($t_k - o_k$). Ainsi, pour corriger les poids des connexions entre la couche d'entrée et la couche cachée, on a besoin de rétropropager l'erreur depuis les sorties vers les entrées, d'où le nom de l'algorithme d'apprentissage : rétro-propagation de l'erreur.

D'après l'équation (II-20), le calcul de δ_j pour une unité cachée j utilise la dérivée de l'activation de cette même unité et la somme des δ_k pour toutes les unités de sortie. Le calcul de δ_j se fait donc de manière locale (indépendamment de toutes les autres unités cachées). Ceci permet d'envisager une parallélisation de l'algorithme de rétro-propagation (RP).

Après avoir calculé le terme d'adaptation des poids, la mise à jour se fait selon la formule suivante :

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) + \Delta w_{ji} \quad (\text{II-21})$$

Et

$$v_{kj}(t+1) = v_{kj}(t) + \Delta v_{kj} \quad (\text{II-22})$$

Où t est l'indice de l'itération. Le mode d'adaptation des poids tel qu'il est présenté par les équations (II-17) et (II-19) s'appelle mode « batch ». La mise à jour des poids se fait après avoir passé en revue tous les exemples d'apprentissage. Ce mode d'apprentissage est encore appelé déterministe hors ligne « off-line » ou « by epoch ».

Une autre approche consiste à modifier les poids après chaque présentation d'un exemple d'apprentissage. C'est l'apprentissage en mode en ligne « on-line » ou « by pattern ». Il y a des avantages et des inconvénients pour chaque mode d'adaptation des poids, et le choix de l'un ou de l'autre dépend du problème à traiter.

Les algorithmes «off-line» sont faciles à analyser pour ce qui concerne les propriétés de convergence. Ils peuvent utiliser un taux d'apprentissage optimum à chaque itération et peuvent conduire à des solutions assez précises (avec de faibles variantes). En revanche, ils ont l'inconvénient d'induire un temps de calcul du terme d'adaptation de poids dépendant de la taille de l'ensemble d'apprentissage. Les méthodes «on-line» peuvent être utilisées lorsque les exemples ne sont pas tous disponibles au début de l'apprentissage, et quand on désire réaliser une adaptation continue à partir d'une suite de couples entrée-sortie issus d'une relation qu'on cherche à identifier.

II-3-2-8 Variantes de l'algorithme de RP

Depuis son introduction, l'algorithme de RP a été largement étudié et plusieurs modifications y ont été apportées. L'algorithme de base décrit ci-dessus converge très lentement pour les réseaux multicouches.

Les variations apportées à l'algorithme de RP ont pour objectifs l'accélération de la convergence du processus d'apprentissage et l'amélioration de la capacité de généralisation. Nous présentons ci-dessous quelques variantes parmi les plus importantes.

II-3-2-8-1 Choix de la fonction coût

Le choix de la fonction d'erreur utilisée pour l'apprentissage des RN multicouches a une certaine influence sur la rapidité d'apprentissage et sur la qualité de généralisation du réseau. Cette question a été étudiée par plusieurs chercheurs (Gayner et Downs, 1994). Le critère d'erreur le plus utilisé est la fonction d'erreur quadratique moyenne (équation (II-16)).

Cette fonction a tendance à amplifier les erreurs les plus importantes. Par conséquent, au cours de l'apprentissage, la mise à jour des poids est largement déterminée par la correction des grandes erreurs, ce qui est recherché en général (Hassibi et Stork, 1993).

Cependant le choix de fonction quadratique n'est pas la seule possibilité. On peut remplacer (t_k^p, o_p^k) différentiable et minimale lorsque ses deux argument sont égaux. Le développement précédent montre que seule l'expression de l'équation (II-17) dépend de la fonction coût. Le reste de l'algorithme de RP reste échangé.

II-3-2-8-2 Introduction d'un terme de moment

Le paramètre η , appelé taux d'apprentissage, joue un rôle important. S'il est trop faible, la convergence est lente, et, s'il est trop grand, l'algorithme oscille entre des points différents à cause de l'existence de vallées et de plateaux à la surface de la fonction coût.

Pour stabiliser la recherche des poids optimisant la fonction coût, une méthode consiste à ajouter un terme dit le «*moment*» à l'expression d'adaptation des poids (Plaut et al, 1990). L'idée est de donner une certaine «*inertie*» pour chaque poids, de sorte que sa mise à jour ne se fasse pas de manière brutale. Ceci permet alors d'utiliser un taux d'apprentissage relativement important sans pour autant augmenter les oscillations de la trajectoire sur la surface d'erreur. La nouvelle formule d'adaptation des poids est définie par :

$$\Delta w(t+1) = -\eta \frac{\partial E}{\partial w} + \alpha \Delta w(t) \quad (\text{II-23})$$

Où η est le terme de moment dont la valeur est souvent prise proche de 1 (≈ 0.9). Cette méthode est utilisée en modes «off-line» ou «on-line».

II-3-2-8-3 Taux d'apprentissage adaptatifs

Les paramètres η et α de l'algorithme *RP* ne sont pas faciles à fixer a priori pour un problème donné. En outre, des valeurs données sont bien adaptées au début de l'apprentissage, sans l'être nécessairement au milieu ou à la fin du processus. Pour résoudre ce problème, certains auteurs ont proposé d'ajuster automatiquement ces paramètres au cours de l'apprentissage.

Plusieurs heuristiques d'adaptation dynamique du taux d'apprentissage ou du terme de moment ont été proposées (Jacobs, 1988), (Silva et Almeida, 1990), (Tollenaere, 1990). On se contente ici de rappeler le principe des méthodes adaptatives et de citer l'algorithme de Silva et Almeida comme exemple.

Le principe des méthodes adaptatives est d'étudier à chaque itération l'effet de la mise à jour des poids des connexions sur la fonction coût. Si cette fonction augmente, alors le taux d'apprentissage η_{pq} associé au poids w_{pq} doit être réduit. En revanche, si la fonction coût décroît régulièrement suite aux modifications des poids, alors on augmente η_{pq} pour accélérer la recherche de l'optimum. Différents critères sont peut être retenus, exemple la diminution de la fonction coût pendant plusieurs itérations successives. En partant de ce principe, Silva et Almeida ont proposé la règle suivante :

$$\eta_{pq}(t) = \begin{cases} \gamma \eta_{pq}(t-1), & \text{si } \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t)} \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t-1)} > 0 \\ \zeta \eta_{pq}(t-1) & \text{sin on} \end{cases} \quad (\text{II-24})$$

Où w_{pq} est un poids quelconque du réseau, γ et ζ sont des paramètres respectivement supérieur et inférieur à 1 (par exemple: $\gamma = 1.2$ et $\zeta = 0.7$). Les auteurs montrent expérimentalement que les valeurs précises de ces deux paramètres ne sont pas décisives. Ils proposent également d'utiliser un terme de moment identique et non adaptatif pour tous les poids du réseau. La procédure d'adaptation des poids est alors la suivante :

$$w_{pq}(t+1) = w_{pq}(t) - \eta_{pq}(t) z_{pq}(t) \quad (\text{II-25})$$

$$z_{pq}(t) = \frac{\partial E}{\partial w_{pq}(t)} + \alpha z_{pq}(t-1)$$

Où α est le terme de moment.

II-3-2-9 Autres procédures d'optimisation

L'algorithme de *RP* dans sa forme de base utilise la technique de descente du gradient. Celle-ci est parmi les plus simples, mais elle n'est pas très efficace car elle utilise peu d'information sur la surface de l'erreur. Dans la littérature, on trouve une grande quantité de techniques plus sophistiquées (Fletcher, 1987).

L'une des procédures d'optimisation les plus utilisées sont les méthodes dites du deuxième ordre. Elles consistent à effectuer le développement au second ordre de la fonction coût $E(w)$ autour du point courant w_0 . Et en négligeant les termes d'ordre supérieur, on peut écrire :

$$E w = E w_0 + w - w_0^T \nabla E w_0 + 1/2 w - w_0^T H w - w_0 \quad (\text{II-26})$$

Avec H la matrice Hessienne calculée au point w_0 . En dérivant l'équation (II-26), on obtient :

$$\nabla E w = \nabla E w_0 + H w - w_0 \quad (\text{II-27})$$

En annulant la dérivée, l'équation (II-27) donne une estimation de la localisation du minimum :

$$w = w_0 - H^{-1} \nabla E w_0 \quad (\text{II-28})$$

En posant $w_0 = w(t)$ et $w = w(t+1)$, on obtient une procédure itérative d'estimation du vecteur des poids minimisant la fonction coût :

$$w(t+1) = w(t) - H^{-1} \nabla E w(t) \quad (\text{II-29})$$

Cette méthode est appelée méthode de Newton. Elle permet une convergence rapide chaque fois que les poids se trouvent au voisinage de la solution. Son inconvénient est la nécessité de calculer H^{-1} .

Deux solutions ont été proposées face à ce problème. L'une consiste à négliger les termes non diagonaux de H (méthode pseudo-Newton) (Le Cun et al, 1989), l'autre à estimer itérativement la matrice H^{-1} (méthode quasi-Newton).

Les méthodes de minimisation présentées jusqu'ici se basent sur l'utilisation de dérivées de la fonction coût. Une autre approche consiste à utiliser des procédures de minimisation stochastique (Bruenelli, 1994) ou les algorithmes génétiques (Goldberg, 1989). Ces algorithmes effectuent une recherche globale et présentent par conséquent moins de risques d'aboutir à des minima locaux assez superficiels. Cependant, ils nécessitent des calculs plus lourds.

Algorithme de Levenberg-Marquardt

Dans cette méthode de rétropropagation de gradient, pour retrouver les poids qui minimisent l'erreur commise, il est connu en optimisation classique que l'utilisation des informations données par les dérivées d'ordre supérieur peut accélérer le processus de recherche de la solution optimale. De nombreux travaux ont tenté d'étendre cette approche aux réseaux de neurones. On cite la méthode de Newton qui utilise les dérivées de second ordre (la matrice Hessienne). Cependant, il est très difficile et très coûteux de calculer la matrice Hessienne dans le cas des réseaux multicouches. L'algorithme Levenberg-Marquardt (Hagan M.T, Menhaj M., 1994) fait partie des méthodes dites Quasi-Newton où le Hessien n'est pas calculé de manière explicite mais approché en utilisant une fonction dépendante du gradient. Cet algorithme est parmi les méthodes les plus performantes (Battiti, 1992), elle est dite du second ordre parce qu'elle prend en considération la dérivée seconde de la fonction de coût.

II-3-2-10 Choix des séquences d'apprentissage

Dans ce qui suit, on donne quelques indications sur le choix des séquences d'apprentissage.

II-3-2-10-1 Séquence des entrées de commande

a) Contraintes sur les entrées de commande :

Elles portent sur l'amplitude et le type de signaux de commande que le processus est susceptible de recevoir pendant son fonctionnement. Les amplitudes maximales sont en général faciles à déterminer, car leur ordre de grandeur correspond aux valeurs de saturation des actionneurs, qui sont estimées physiquement (puissance maximale que délivre un moteur, pression maximale d'un circuit de freinage ou d'un mécanisme hydraulique, etc.).

En ce qui concerne le type de signaux à utiliser, un principe général est que les signaux utilisés pour l'identification doivent être de même nature que ceux qui seront calculés par

l'organe de commande pendant l'utilisation du processus. L'idéal serait d'utiliser pour l'identification le correcteur même qui sera synthétisé à l'aide du prédicteur identifié. Si le bruit est négligeable, une bonne démarche consiste à effectuer les expériences en asservissement, avec un correcteur simple (par exemple, un PID). Cette démarche, ou identification en boucle fermée, permet d'explorer le domaine de fonctionnement désiré, en imposant une séquence de consigne correspondant au cahier des charges.

Une autre démarche, couramment utilisée, consiste à explorer au mieux le domaine de fonctionnement, par exemple avec des créneaux de commande (riches en fréquences), d'amplitudes et de durées diverses. Notons que cette dernière solution n'est pas praticable s'il existe des contraintes sur des sorties ou des variables internes du processus, et en particulier si le processus est instable.

b) Fréquence d'échantillonnage :

Les réseaux de neurones étant des modèles non linéaires, il n'est pas possible de passer simplement d'un modèle discret, valable à une fréquence d'échantillonnage donnée, à un autre: Il est donc nécessaire d'effectuer l'identification à la fréquence qui sera utilisée pour la commande du processus. Si des contraintes diverses, par exemple le temps de calcul de la commande, nécessitent le choix d'une fréquence d'asservissement plus basse que la fréquence utilisée pour l'identification, il faut procéder à une nouvelle identification ou un nouvel apprentissage.

II-3-2-10-2 Séquences d'apprentissage et estimation de la performance

Comme nous l'avons précisé auparavant, l'apprentissage consiste à ajuster les fonctions du prédicteur à un ensemble de points définis par des séquences d'apprentissage, ceci en minimisant une fonction de coût.

Il y a un sur-ajustement (over-fitting) lorsque l'apprentissage conduit à annuler quasiment la fonction de coût sans que pour autant les fonctions réalisées par le réseau prédicteur approchent celles du modèle-hypothèse auquel le prédicteur est associé. Pour des séquences d'apprentissage données, le sur-ajustement se produit si le réseau prédicteur possède trop de coefficients, c'est-à-dire définit une famille de fonctions trop riche.

Pour sélectionner un réseau candidat pour une hypothèse donnée, il est donc nécessaire de répartir les données disponibles en une séquence d'apprentissage et une séquence d'estimation de la performance, dite séquence de test. Une séquence de test (validation), de même type, issue de la même population que la séquence d'apprentissage, conduit à une meilleure estimation de la variance de l'erreur de prédiction (erreur quadratique moyenne de test, notée EQMP) que celle obtenue avec la séquence d'apprentissage (notée EQMA).

L'évolution de l'EQMA et de l'EQMP, lorsqu'on augmente le nombre de neurones cachés, permet de détecter un sur-ajustement et de sélectionner le meilleur réseau de neurones parmi les candidats : dès qu'ajouter un neurone supplémentaire au réseau fait augmenter l'EQMP, même si l'EQMA continue à décroître, le nombre optimal de neurones est atteint.

Cette méthode, à condition d'utiliser des méthodes d'optimisation performantes, par exemple les méthodes quasi-newtoniennes, permet de sélectionner le réseau le plus parcimonieux.

Il est à noter au passage que dans la littérature (Sjöberg et al, 1994), la séquence de test est souvent utilisée pour arrêter l'apprentissage d'un réseau donné : dès qu'une itération d'apprentissage augmente l'EQMP, celui-ci est arrêté prématurément (Early Stopping).

De même, la séquence de test peut servir exclusivement à estimer la performance des réseaux après apprentissage. En effet, l'apprentissage n'est arrêté que lorsqu'un minimum est atteint : l'arrêt est décidé en fonction de la valeur de la fonction de coût et de celle de la norme de son gradient. Si le nombre de neurones est augmenté de façon incrémentale, comme nous l'indiquons auparavant, on obtient forcément le prédicteur le plus parcimonieux réalisant la meilleure performance sans sur-ajustement.

Il est à signaler que le prix à payer pour ces méthodes d'optimisation des réseaux de neurones est le temps de calcul. En général, on se contente dans la pratique d'utiliser des méthodes qui ne garantissent pas l'optimalité de la solution, mais ont l'avantage d'être plus rapides.

a) Le sur-ajustement

Après cette revue des outils les plus fréquemment utilisés dans le domaine des RN pour sélectionner le meilleur modèle tout en évitant les solutions sur-ajustées, les questions suivantes se posent :

- quelle est l'origine exacte du sur-ajustement?
- quelle démarche faudrait-il mettre en œuvre pour régler ce problème à la base ?

Le sur-ajustement caractérise une fonction dont la complexité (c'est-à-dire le nombre et la nature des degrés de libertés) est telle qu'elle est capable de s'ajuster exactement aux exemples d'apprentissage, même si ceux-ci sont entachés de bruit.

Ce phénomène est donc, à l'origine, un phénomène local : Dans certains domaines des entrées, la fonction utilise localement certains de ses degrés de liberté de manière à passer précisément par certains exemples. Cette définition du sur-ajustement suppose que tous les exemples ont la même importance et que l'on recherche effectivement une solution dont la réponse est satisfaisante.

Généralement, cette hypothèse est formalisée dans la fonction de coût choisie. Ainsi, pour éviter le sur-ajustement, il faudrait limiter l'influence de chaque exemple sur l'estimation des poids du modèle. Les valeurs de ceux-ci doivent être déterminées par l'ensemble de la base d'apprentissage, et non par un exemple particulier.

b) Problème des minima locaux

Les minima trouvés par les algorithmes d'apprentissages sont souvent des minima locaux. Le minimum trouvé dépend du point de départ de la recherche, en d'autres termes de l'initialisation des poids. En pratique, il faut effectuer plusieurs minimisations avec des initialisations différentes, pour trouver plusieurs minima et retenir le « meilleur ». Il est néanmoins impossible et généralement inutile, de s'assurer que le minimum choisi est le minimum global (Bishop, 1995).

II-3-2-11 Etude du pouvoir de généralisation des réseaux de neurones

La généralisation concerne la tâche accomplie par le réseau une fois son apprentissage achevé (Gallinari., 1997). Elle est évaluée en testant le réseau sur des données qui n'ont pas servi à l'apprentissage. Elle est influencée essentiellement par quatre facteurs : la complexité

du problème, l'algorithme d'apprentissage, la complexité de l'échantillon (le nombre d'exemples et la manière dont ils représentent le problème) et enfin la complexité du réseau ou nombre de poids.

Parmi ces quatre facteurs, la complexité du réseau constitue un facteur important surtout dans les applications industrielles. En effet, lorsque l'on doit traiter des données bruitées, ce qui est souvent le cas en pratique, l'objectif est de trouver le modèle optimal, présentant le meilleur compromis possible entre performance d'apprentissage et capacité de généralisation.

Le problème de la généralisation est souvent vu sous deux perspectives différentes. Dans la première, la taille du réseau est fixée (en accord avec la complexité du problème) et la question est : combien d'exemples d'apprentissage sont nécessaires pour atteindre une bonne généralisation ? Cette perspective est intéressante dans les applications où l'on a la possibilité d'acquérir autant d'exemples que l'on veut. Dans le second cas, le nombre d'exemples d'apprentissage est fixé et la question est : quelle taille du réseau qui donne la meilleure généralisation pour ces données ? On est conduit à adopter ce point de vue lorsque l'on est limité dans la possibilité d'acquérir des données d'apprentissage.

II-4 Méthode des Algorithmes Génétiques

Parmi tous les types d'algorithmes existants, certains ont la particularité de s'inspirer de l'évolution des espèces dans leur cadre naturel (J.-S. Yang and M.L. West, 2001). Ce sont les algorithmes génétiques. Les espèces s'adaptent à leur cadre de vie qui peut évoluer, les individus de chaque espèce se reproduisent, créant ainsi de nouveaux individus, certains subissent des modifications de leur ADN, certains disparaissent.

Les algorithmes génétiques sont des algorithmes informatiques inspirés de la théorie darwinienne. Cette théorie repose sur deux postulats simples :

- « Dans chaque environnement, seules les espèces les mieux adaptées perdurent au cours des temps, les autres étant condamnées à disparaître ».
- « Au sein de chaque espèce, le renouvellement des populations est essentiellement dû aux meilleurs individus de l'espèce ».

Les algorithmes génétiques ont déjà une histoire relativement ancienne puisque les premiers travaux de John Holland sur les systèmes adaptatifs remontent à 1962. Avant cette date quelques tentatives ont été faites pour modéliser les systèmes génétiques par des systèmes informatiques comme : Barricelli en 1957 et en 1962, Fraser en 1960 et en 1962, Martin et Cockerham en 1960. Cependant l'objectif fondamental de ces études était de comprendre quelques phénomènes biologiques.

John Holland (J.Holland, 1975 ; 1992) et ses étudiants dans l'université de Michigan étaient les premiers à reconnaître l'utilité d'utiliser des opérateurs génétiques dans les problèmes de l'adaptation artificiels. Mais c'était Bagley en 1967 qui a mentionné, en premier lieu, l'expression « Algorithme Génétique » et le premier à avoir présenté une application pratique de cette connaissance. Aujourd'hui, leurs champs d'application sont très vastes. Les raisons du grand nombre d'applications sont la simplicité et l'efficacité de ces algorithmes. Les algorithmes génétiques sont basés sur des mécanismes très simples, ils sont robustes car ils peuvent résoudre des problèmes fortement non-linéaires et discontinus, et efficaces car ils font évoluer non pas une solution mais toute une population de solutions potentielles et donc bénéficient d'un parallélisme puissant.

Les algorithmes génétiques sont des algorithmes évolutionnaires, les individus soumis à l'évolution sont des solutions, plus ou moins performantes, à un problème posé. Ces solutions appartiennent à l'espace de recherche du problème d'optimisation. L'ensemble des individus traités simultanément par l'algorithme évolutionnaires constitue une population. Elle évolue durant une succession d'itérations appelées générations jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt, qui prend en compte a priori la qualité des solutions obtenu, soit vérifié. Durant chaque génération, une succession d'opérateurs est appliquée aux individus d'une population pour engendrer la nouvelle population à la génération suivante. Lorsqu'un ou plusieurs individus sont utilisés par un opérateur, on convient de les désigner comme des parents. Les individus résultants de l'application de l'opérateur sont des enfants. Ainsi, lorsque deux opérateurs sont appliqués en séquence, les enfants engendrés peuvent devenir des parents pour d'autres.

Avant tout, nous allons définir la terminologie utilisée dans la description de la méthode numérique :

- Un individu représente une solution potentielle (candidate) du problème d'optimisation
- Un gène est la valeur codée d'une seule variable de contrôle
- Un chromosome ou un ensemble de gène représente numériquement le vecteur de contrôle
- Une population est formée par l'ensemble des solutions candidates
- La génération est le passage d'une population à une autre
- Les parents sont les individus sélectionnés pour former une nouvelle génération

L'algorithme génétique fournit des solutions à un problème n'ayant pas de solution analytique ou algorithmique.

L'algorithme génétique mène à une recherche itérative de l'optimum à travers les étapes suivantes :

- Génération d'une population initiale d'individus.
- Evolution du critère d'optimisation présenté pour chaque individu de la population.
- Sélection des individus aptes à se produire selon le critère d'optimisation
- Croisement entre les individus sélectionnés (parents) pour former une nouvelle génération.
- Mutation ou changement éventuel de l'information génétique d'un ou plusieurs individus de la nouvelle génération.
- Remplacement de la population précédente par la population de la nouvelle génération.

La recherche se poursuit jusqu'à la satisfaction d'un critère d'arrêt.

Le principe dans les algorithmes génétiques est de simuler l'évolution d'une population d'individus divers auxquels on applique différents opérateurs génétiques et que l'on soumet à chaque génération à une sélection. Ces algorithmes sont de plus en plus utilisés dans l'industrie.

C'est cette deuxième méthode d'optimisation que nous avons choisie dans la mesure où les algorithmes génétiques sont particulièrement adaptés aux problèmes d'optimisation comportant de nombreux paramètres.

Les algorithmes génétiques ont été utilisés dans le but de minimiser la différence entre les courbes expérimentales (réelles) et le modèle (simulé) pour les raisons suivantes :

- les algorithmes génétiques utilisent un codage des paramètres, et non les paramètres eux-mêmes. Cette technique permet de s'affranchir en grande partie des contraintes des autres méthodes (continuité, dérivabilité)
- Dans beaucoup de méthodes d'optimisation, on se déplace de manière incrémentale d'un point à un autre dans l'espace de recherche en utilisant une règle de transition pour trouver le nouveau point. Cette technique fonctionnant point par point. Les AG explorent, quant à eux, simultanément plusieurs zones susceptibles de contenir des extrema. Ainsi, la probabilité de détecter un maximum local est réduite par rapport à d'autres méthodes à exploration incrémentale.
- Souvent les méthodes d'optimisation nécessitent beaucoup d'informations auxiliaires pour bien fonctionner. les AG n'ont nullement besoin de cette information auxiliaire, ils sont aveugles. Cette caractéristique fait des AG une méthode d'optimisation plus générale que beaucoup de procédure d'exploration. Pour effectuer une recherche performante, les AG n'ont besoin que des valeurs de la fonction à optimiser associées à chaque chaîne. Il existe également des AG guidés par la connaissance, qui utilisent l'information autre que la valeur de la fonction à optimiser.
- Les AG utilisent des règles de transition probabiliste. Ceci ne signifie pas que la méthode de recherche est aléatoire. Le choix aléatoire est utilisé comme outil pour le guidage de l'exploration, avec une amélioration probable.

Ces quatre spécificités des AG par rapport aux autres méthodes (utilisation d'un codage, travail sur une population, indifférence à l'information auxiliaire et opérateurs aléatoires) contribuent à leur robustesse par rapport aux méthodes plus classiques.

II-4-1 Méthode générale des Algorithmes

Un algorithme génétique recherche le ou les extrema d'une fonction définie sur un espace de données. Pour l'utiliser, on doit disposer des cinq éléments suivants :

- Un principe de codage de l'élément de population. Cette structure conditionne le succès des algorithmes génétiques.
- Un mécanisme de génération de la population initiale. Ce mécanisme doit être capable de produire une population d'individus non homogène qui suivra de base pour les générations futures.
- Une fonction de mérite. Celle-ci retourne une valeur appelée fitness ou fonction d'évaluation de l'adaptation de l'individu à son environnement.
- Des opérateurs permettant de diversifier la population au cours des générations et d'explorer en théorie la quasi-intégralité de l'espace d'état. L'opérateur de croisement recompose les gènes d'individus existant dans la population, l'opérateur de mutation a pour but de garantir l'exploration de l'espace d'états.
- Des paramètres de dimensionnement du problème, tels que la taille de la population, le nombre total de générations ou critère d'arrêt de l'algorithme, les probabilités d'application des opérateurs de croisement et de mutation.

Le principe général du fonctionnement d'un algorithme génétique repose sur les étapes suivantes :

- 1) Produire une population initiale d'individus aléatoires.
- 2) Exécuter itérativement les sous étapes suivantes jusqu'à satisfaction du critère d'arrêt :
 - 2.1 Assigner une valeur d'aptitude à chaque individu de la population en utilisant la fonction d'évaluation.
 - 2.2 Créer une nouvelle population de chromosomes en appliquant les opérations génétiques suivantes. Les opérations sont appliquées à des chromosomes choisis de la population avec une probabilité basée sur l'aptitude.
 - (i) Reproduction : Reproduire un individu existant en le copiant dans la nouvelle population.
 - (ii) Croisement : Créer deux nouveaux individus à partir de deux individus existants par recombinaison génétique de leurs chromosomes par l'opération crossover.
 - (iii) Mutation : Créer un nouvel individu à partir d'un individu existant en subissant à une mutation.

3) l'individu qui est identifié par la méthode de désignation du résultat est retourné comme étant le meilleur chromosome produit.

On commence par générer une population d'individus de façon aléatoire. Pour passer d'une génération k à la génération $k+1$, les trois opérations de reproduction, croisement et mutation sont répétées pour des éléments de la population k . Des couples de parents X_1 et X_2 sont sélectionnés en fonction de leurs adaptations. L'opérateur de croisement leur est appliqué avec une probabilité P_c et génère des couples d'enfants E_1 et E_2 . D'autres éléments X sont sélectionnés en fonction de leur adaptation. L'opérateur de mutation leur est appliqué avec la probabilité P_m et génère des individus mutés X' sont ensuite évalués avant insertion dans la nouvelle population. De génération en génération, la taille de la population reste constante. Lors d'une génération, la totalité d'une population peut être remplacée par des descendants, l'algorithme génétique est alors dit « générationnel » (generational).

Différents critères d'arrêt de l'algorithme peuvent être choisis :

- Le nombre de générations que l'on souhaite exécuter peut être fixé a priori.
- L'algorithme peut être arrêté lorsque la population n'évolue pas.

II-4-1-1 Codage des chromosomes

La première étape est de définir et de coder convenablement le problème. Historiquement le codage utilisé par les algorithmes génétiques était représenté sous forme de chaîne binaire contenant toute l'information nécessaire à la description d'un individu (chromosome). D'autres formes de codage sont possibles à savoir le codage réel, codage de gray, etc (dans notre étude on utilise le codage binaire). Il existe deux types de difficultés dans le choix d'un codage. D'une autre part celui-ci doit pouvoir être adapté au problème de façon à limiter au mieux la taille de l'espace de recherche et aussi de façon que les nouveaux chromosomes engendrés par les opérateurs de recherches soient significatifs le plus souvent possible, c'est-à-dire qu'ils puissent coder des solutions valides respectant les contraintes du problème.

II-4-1-2 Généralisation de la population initiale

La rapidité de l'algorithme est fortement dépendante du choix de la population initiale d'individus. Si la position de l'optimum dans l'espace d'état est totalement inconnue, il est naturel et plus simple de générer aléatoirement des individus en faisant des tirages uniformes

dans l'espace d'état en veillant à ce que les individus produits respectent les contraintes. Si par contre, des informations à priori sur le problème sont disponibles, les individus sont générés dans un sous domaine particulier afin d'accélérer la convergence.

II-4-1-3 Taille de la population

Certaines approches utilisent une population à taille fixe, alors que d'autres proposent des tailles variables, qui évoluent au cours du temps. Au lieu d'utiliser une population de taille fixe où la fonction de mérite sert à la sélection, elles proposent plutôt d'indexer l'espérance de vie d'un individu à sa fonction de mérite. Les individus reçoivent une espérance de vie supérieure à celle des moins bons. Au fur et à mesure que la population évolue, les individus vieillissent et finissent par mourir lorsqu'ils arrivent au terme de leur espérance de vie.

La figure II-10 illustre l'organigramme type d'un algorithme génétique.

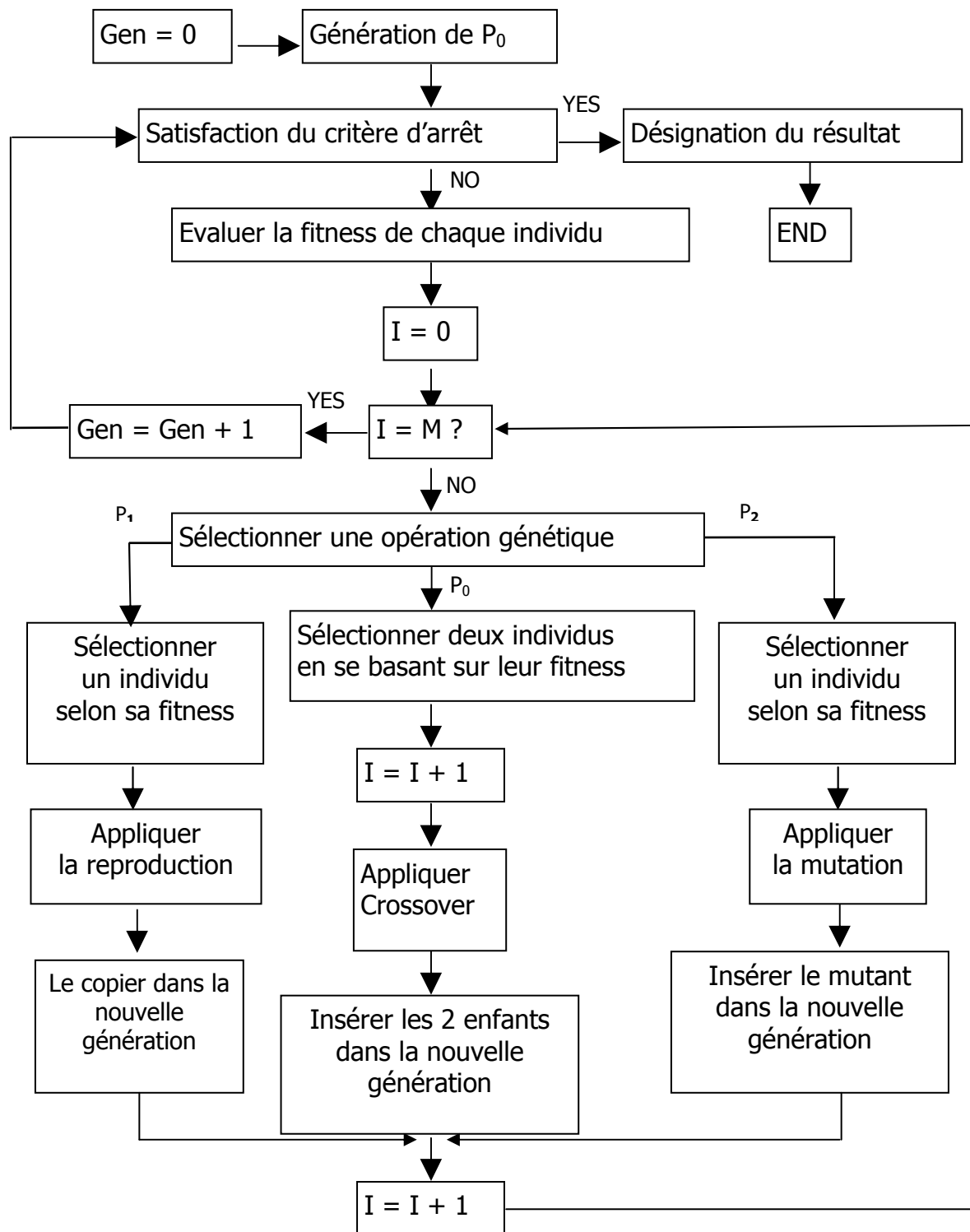


Figure II-10 : Organigramme d'un algorithme génétique type (simple)
 (Gen : numéro de la génération courante, M : taille d'une population)

II-4-1-4 Fonction de mérite (adaptation)

Pour mieux concrétiser le processus d'évolution, il est nécessaire de pouvoir faire la distinction entre les chromosomes les plus adaptés et les moins adaptés. Ceci est possible par l'assignement d'une valeur d'adaptation à chaque chromosome.

La mise au point d'une bonne fonction d'adaptation (fitness fonction) doit respecter plusieurs critères qui se rapportent à sa complexité ainsi qu'à la satisfaction des contraintes du problème. Si le problème doit satisfaire des contraintes et que les chromosomes produits par les opérateurs de recherches codent des individus invalides, une solution parmi d'autres est d'attribuer une mauvaise fitness à l'élément qui a violé les contraintes afin de favoriser la reproduction des individus valides.

II-4-1-5 Sélection

Les individus sont triés par ordre croissant selon la valeur du critère d'optimisation. Les meilleurs individus sont retenus (20% de la population initiale) ainsi que l'individu ayant la plus mauvaise valeur.

II-4-1-6 Croisement

Pendant cette étape une nouvelle population sera générée à partir des individus (parents) sélectionnés dans l'étape précédente. Chaque individu sera créé suivant une règle de croisement.

La figure II-11 illustre une possibilité de croisement. Deux parents (P1, P2) et un site de croisement, sont sélectionnés aléatoirement. Les chromosomes (B_{p1} et B_{p2}) sont coupés au niveau du site choisi. L'individu (B_{F1}) comportera la portion droite du premier chromosome (P1) et la portion gauche du deuxième chromosome (P2). On peut observer sur la figure que la même règle est appliquée pour tous les gènes d'un même chromosome.

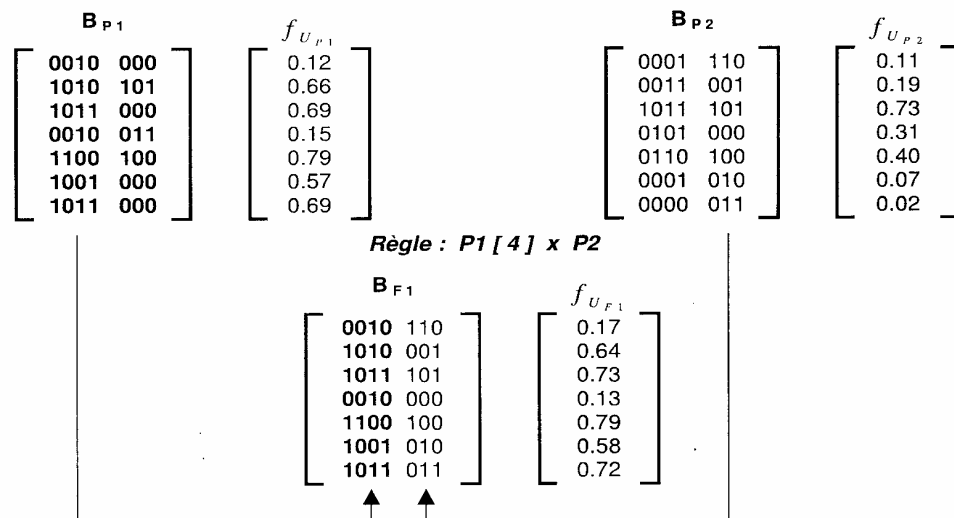


Figure II-11 : Possibilité de croisement

II-4-1-7 Mutation

Cette étape implique le changement de l'information génétique de certains individus de la nouvelle population. La mutation s'effectue au niveau de la chaîne binaire. Elle peut être ponctuelle, ou bien complète (remplacement de l'individu par un autre généré aléatoirement). C'est grâce à l'étape de mutation, que l'algorithme génétique teste, à toute nouvelle génération, de solutions candidates en dehors de la population sélectionnée (recherche globale).

Le nombre d'individus mutés est déterminé par un taux de mutation, qui peut être constant ou variable au cours des générations.

II-4-1-8 Remplacement

La nouvelle population remplace la précédente et le calcul se poursuit jusqu'à la satisfaction d'un critère d'arrêt.

Les champs d'application des AG sont fort diversifiés. On les retrouve aussi bien en théorie des graphes qu'en compressions d'images numérisées ou encore en programmation automatique.

II-5 Conclusion

Après un aperçu de la technique d'essai mécanique choisie dans notre étude qui est l'essai de traction, nous avons présenté dans ce chapitre les bases nécessaires à la compréhension des deux méthodes de simulation : les Réseaux de Neurones Artificiels « RNA » et les Algorithmes Génétiques « AG », pour avoir une approximation de la loi de comportement effective du matériau PMMA M70. Le vocabulaire utilisé par les communautés qui étudient et développent ces deux méthodes est assez vaste et non encore uniformisé. Dans l'étape suivante, nous exhibons les résultats de notre simulation.

III-1 Introduction

Notre but dans ce chapitre est de décrire la loi de comportement du matériau PMMA M70 par un modèle non linéaire de régression, de type feed forward, formé par des valeurs contraintes vraies- déformations vraies prises à une vitesse de déformation constante $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ dans un domaine de température qui varie entre 95°C et 140°C.

III-2 Conception du réseau

L'établissement des réseaux de neurones nécessite plusieurs paramètres (tableau III-1) comme les fonctions d'activation, les algorithmes d'apprentissage, le nombre de couches dans le réseau, etc.

Les possibilités d'arrangements entre les neurones sont multiples. Le réseau utilisé est un Perceptron multicouches (PMC) de type feed-forward, appelé aussi réseau de type Perceptron, la traduction du terme en français est alimentation vers l'avant. C'est un réseau dans lequel l'information se propage de couche en couche sans retour en arrière possible avec un apprentissage supervisé. Dans ce travail le PMC est constitué de trois couches : une couche d'entrée, une couche de sortie et une seule couche cachée, afin d'approximer une fonction non linéaire, et non connue.

La méthode de Rétro-Propagation RP, ou back propagation, fait apprendre une telle fonction à notre réseau facilement. L'algorithme d'apprentissage Levenberg-Marquardt est utilisé plus précisément dans la méthode Rétro-Propagation pour retrouver les poids qui minimisent l'erreur commise.

La fonction d'activation des neurones de la couche cachée est une sigmoïde, celle de la sortie est linéaire. Les neurones d'entrée ont une fonction d'activation « identité », laissant passer l'information sans la modifier. Notre réseau est un approximateur universel: La combinaison linéaire des sigmoïdes permet d'approximer n'importe quelle fonction avec une précision arbitraire, à condition de disposer de suffisamment de neurones sur la couche cachée, car seul le nombre de neurones dans la couche cachée ne peut être fixe (Hagan M.T., Menhaj M. ; 1994).

Le tableau suivant résume le choix des paramètres du réseau :

Paramètres	Choix
Méthode utilisée	RP
Entrées	Températures et déformations
Perceptron multicouches	Feed-forward
Algorithme d'apprentissage	Levenberg -Marquardt
Nombre de couches	3
Fonction d'activation au niveau de la couche cachée	Sigmoïde
Fonction d'activation au niveau de la couche de sortie	Linéaire
Durée d'entraînement	10000 itérations
Performance	10^{-10}

Tableau III-1 : choix des paramètres

Le modèle réalisé par un Réseau de Neurones Artificiels (RNA) dépend de valeurs des coefficients de pondération, c'est-à-dire les poids et biais des neurones de ce réseau. Pour qu'un réseau effectue une tâche donnée, il faut ajuster les valeurs de ces coefficients. La procédure d'ajustement des coefficients de telle sorte que les sorties du réseau soient proches des sorties désirées est appelée apprentissage. Un apprentissage supervisé a pour point de départ un ensemble d'apprentissage, c'est-à-dire un ensemble d'exemples ou couples qui se forment de valeurs d'entrées et de sorties désirées. Le principe général des algorithmes d'apprentissage repose sur la minimisation d'une fonction de coût quadratique des différences entre les sorties du réseau et celles désirées.

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_c - y_d)^2} \quad (III-1)$$

Où : N : Nombre de données des échantillons,

y_c : Sortie calculée (simulée),

y_d : Sortie réelle (désirée).

Le principe de l'estimation des paramètres d'un modèle est montré dans la figure III-1.

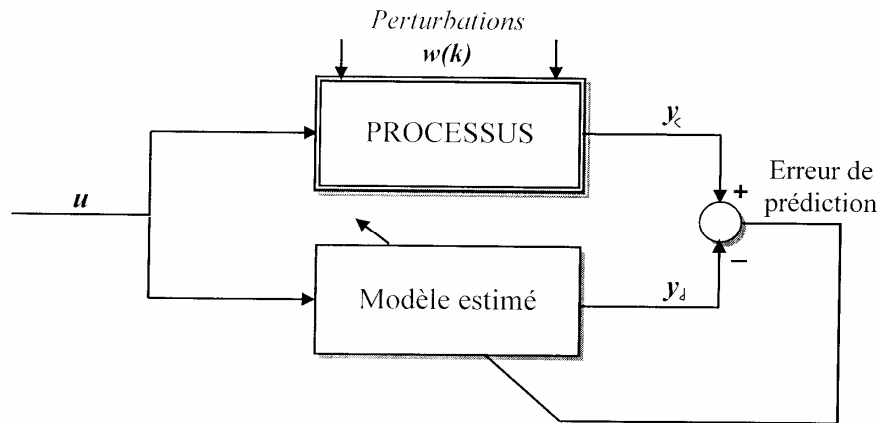


Figure III-1 : Schéma de principe de l'estimation

On doit suivre les étapes d'algorithme suivantes :

- 1- Initialisation des poids à des petites valeurs aléatoires.
- 2- Choisir aléatoirement un pattern d'entrée.
- 3- Propager l'information en avant dans le réseau.
- 4- Présenter le premier exemple et calculer la sortie.
- 5- Comparer la sortie avec la sortie réelle et calculer l'erreur.
- 6- Rétropropager l'erreur et adapter les poids en tenant compte des conditions :
 - ◆ Si l'erreur nouvelle $>$ l'erreur ancienne $\Rightarrow w$ nouveau = w ancien $+\Delta w$ (règle d'apprentissage)
 - ◆ Si l'erreur nouvelle $<$ l'erreur ancienne \Rightarrow Pas de modification de poids
 - ◆ Test si la performance désirée est atteinte \Rightarrow Arrêt
 - ◆ Sinon arrêt avec le nombre d'itérations (Cycles, epochs.)

Où w est le vecteur des poids synaptiques.

III-3 Choix de l'architecture

Le modèle choisi doit être capable de rendre en compte la dynamique du processus ou séquences d'apprentissage pour prédire précisément les sorties et être simple à implanter et à comprendre. Tous les algorithmes de commande de prédiction ne diffèrent entre eux que par le modèle utilisé pour représenter le procédé et par la fonction du coût à minimiser.

A partir d'un ensemble d'apprentissage de N exemples, on tire un sous ensemble N_0 , généralement N_0 représente 10 à 25 % de l'ensemble N . On réserve N_0 et on fait

l'apprentissage des réseaux à partir de la base composée ($N-N_0$) exemples puis on valide le modèle par l'ensemble N_0 . Il y a plusieurs techniques concernant le choix de l'ensemble N_0 , la technique la plus utilisée consiste à tirer N_0 d'une manière à couvrir au maximum l'ensemble d'apprentissage, ce qui est traduit en mathématique par : le facteur de l'espérance mathématique pour l'ensemble N_0 ($N_0 \in N$) est le plus élevé possible. Dans notre travail on utilise la méthode Early Stopping.

III-4 Méthode "Early Stopping"

On s'intéresse d'habitude, lors de l'apprentissage d'un réseau de neurones, à obtenir un réseau avec une performance optimale.

Une méthode est dite Early stopping si c'est pour améliorer la généralisation. Dans cette technique les données disponibles sont divisées en deux sous-ensembles : Le premier est celui d'apprentissage, qui est utilisé pour calculer le gradient et mettre à jour les poids et les biais de réseau. Le deuxième est celui de validation. L'erreur diminuera normalement pendant la phase initiale d'apprentissage, de même que l'erreur de validation. Cependant, quand le réseau commence à l'overfit ou le Sur-apprentissage des données, l'erreur sur l'ensemble de validation commencera typiquement à monter. Quand elle augmente pour un numéro indiqué des itérations, l'apprentissage est arrêté, les paramètres : les poids et les biais sont retournés aux minimums.

Si l'erreur sur l'ensemble du test atteint un minimum à un numéro sensiblement différent d'itération que l'erreur sur celui de validation, ceci peut indiquer une division faible de l'ensemble général des données.

La méthode « Early Stopping » peut être utilisée avec n'importe quelle fonction d'activation qui a été décrite précédemment (chapitre II). On doit simplement passer les données de validation à la fonction de transfert.

De cette façon, l'apprentissage se fait le long des courbes et passe par les trois domaines du matériau : élasto-visco-plastique.

III-5 Résultats de simulation

Le choix du nombre de neurones en couche cachée est déterminé à partir des essais jusqu'à aboutir à une erreur acceptable entre la sortie du réseau et celle attendue.

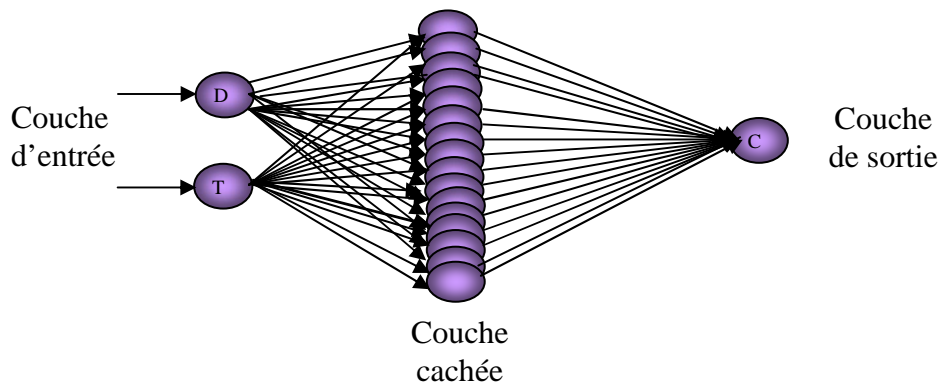
III-5-1 Premier essai

Soit le vecteur qui rassemble les données d'entrée P , les sous ensembles sont construits comme suit : Pour le sous ensemble de validation, on prend la moitié des valeurs de P à partir de la deuxième valeur $P : 2 : 2 : q$. Tel que q est la taille de P . Le reste est pour le sous-ensemble d'apprentissage $P : 1 : 2 : q$.

$P = [1 \ 2 \ 3 \ 4 \dots \dots \dots q]$.

On a réalisé dans ce premier essai 10000 itérations pour déterminer le nombre de neurones dans la couche cachée.

L'architecture que nous avons retenue est un PMC à une seule couche cachée avec 16 neurones dans cette dernière (figure III-2). Le tableau III-2 justifie ce choix.



III-2 Figure : L'architecture choisie

Où D est la déformation, T la température et C la contrainte.

Le tableau III-2 justifie ce choix.

Nombre de neurones de la couche cachée	RMSE due à l'apprentissage (10^{-4})	RMSE due à la validation (10^{-4})
3	31	256
4	17	257
5	16	257
6	14	257
7	7.43	257
8	9.60	257
9	12	257
10	10	257
11	7.43	257
12	6.33	257
13	4.66	257
14	4.16	257
15	4.20	257
16	3.46	257

Tableau III-2: Nombre de neurones choisis dans la couche cachée

En mode d'apprentissage supervisé, le réseau s'adapte par comparaison entre le résultat qu'il a calculé, en fonction des entrées fournies, et la réponse attendue en sortie. Ainsi, le réseau va se modifier jusqu'à ce qu'il trouve la bonne sortie, c'est-à-dire celle attendue correspondant à une entrée donnée. À la fin de l'application de l'ensemble de données d'apprentissage, les valeurs qui sont optimales des poids et biais sont prises en compte pour définir le réseau de neurones.

Les courbes obtenues après apprentissage sont illustrées à la figure III-3.

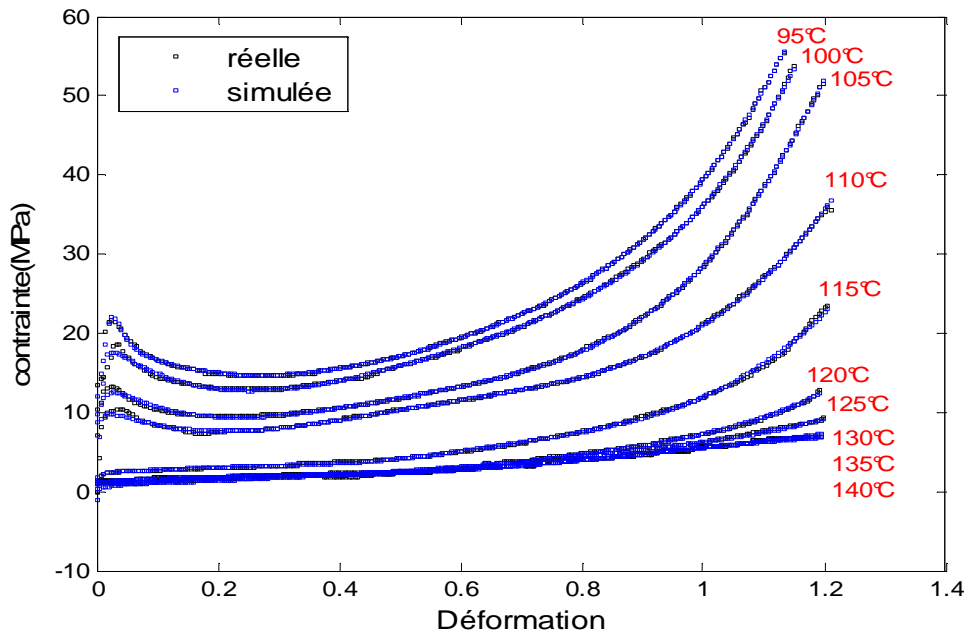


Figure III-3 : Test d'apprentissage

La figure III-3 caractérise la variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie dans les trois domaines du comportement du matériau PMMA M70, on constate alors :

- Aux petites déformations inférieures à 0,02 (domaine visco-élastique), les courbes de simulation se concordent avec les courbes expérimentales aux différentes températures testées dans notre travail.
- La deuxième phase, après la limite élastique où la déformation est inférieure à 0,2, les courbes de simulation se concordent aux températures testées sauf à la température 100°C, 105°C et 110°C. Le matériau présente un adoucissement plus au moins important avec une chute de contrainte.
- La dernière phase commence vers $\epsilon = 0,2$ c'est la phase caoutchoutique, il y a un durcissement du matériau : On observe la concordance de toutes les courbes de simulation avec les courbes expérimentales à différentes températures testées dans le présent travail.

Et on remarque aussi que les courbes caoutchoutiques simulées sont confondues aux faibles déformations mais elles divergent selon la température, tout comme les courbes expérimentales.

Généralement, le réseau apprend bien, avec un écart type d'erreur égal à 3.46×10^{-4} . Il est possible de continuer l'apprentissage afin d'obtenir un écart d'erreur égal à 10^{-10} . Cependant la convergence de la performance après 10000 itérations est lente. Donc, on accepte le résultat sans atteindre le but visé.

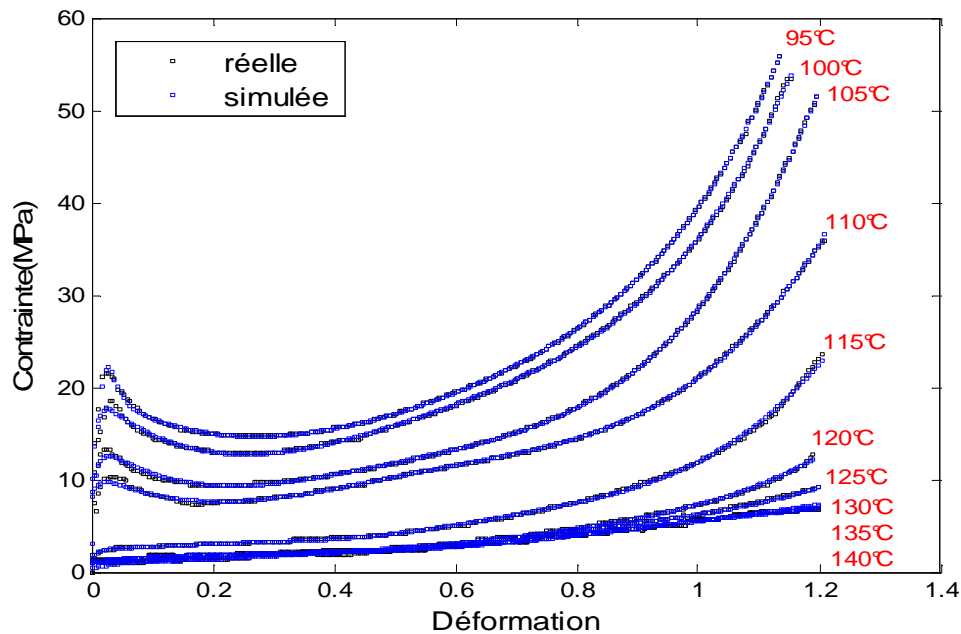


Figure III-4 : Test de validation

D'après la figure III-4, on constate que le réseau valide dans le domaine visco-élastique, après la limite élastique autrement dit : aux déformations inférieures à 0.2 et dans le domaine caoutchoutique aussi, on remarque un petit décalage au niveau du cochet de traction à 100°C, 105°C et 110°C. Le réseau valide avec un écart type d'erreur égal à 257×10^{-4} .

Généralement le réseau apprend et valide bien, les valeurs de simulation par rapport aux valeurs expérimentales pour le test d'apprentissage et validation sont acceptables.

La figure III-5 illustre le test de généralisation pour la température 96°C.

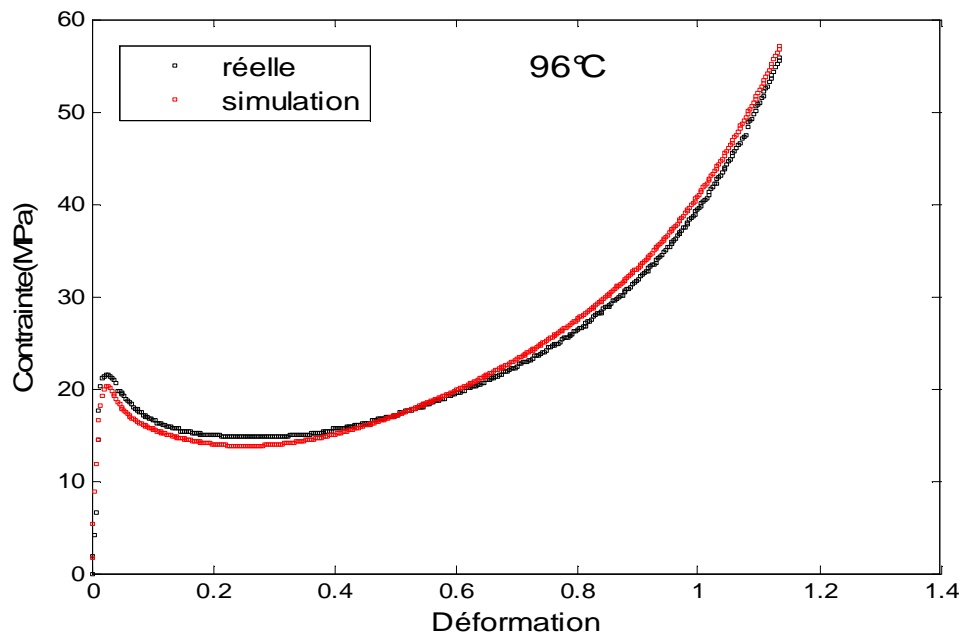


Figure III-5 : Test de généralisation à la température 96°C

III-5-2 Deuxième essai

Soit le vecteur qui rassemble les données d'entrée P , les sous ensembles sont construits comme suit : Pour le sous ensemble de validation on prend chaque trois valeurs une valeur à partir de la première et la deuxième valeur de P : $[1 : 3 : q, 2 : 3 : q]$.

Le reste est pour le sous-ensemble d'apprentissage $P : 3 : 3 : q$.

On a réalisé dans ce deuxième essai 10000 itérations pour déterminer le nombre de neurones dans la couche cachée.

L'architecture que nous avons retenue est un PMC à une seule couche cachée avec 15 neurones dans cette dernière (figure III-6).

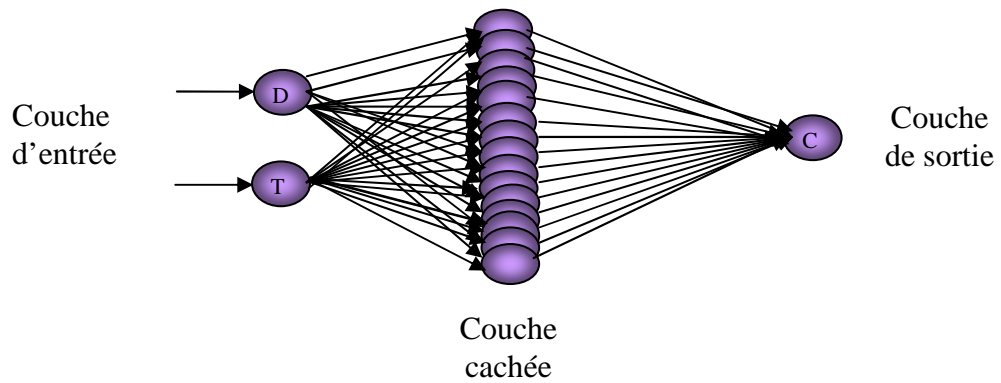


Figure III-6: Architecture choisie

Le tableau III-3 justifie ce choix.

Nombre de neurones de la couche cachée	RMSE due à l'apprentissage (10^{-4})	RMSE due à la validation (10^{-4})
3	20	256
4	18	257
5	17	257
6	15	257
7	10	257
8	13	257
9	6.32	257
10	7.06	257
11	5.81	257
12	5.56	257
13	4.48	257
14	5.76	257
15	3.88	257
16	4.02	257

Tableau III-3 : Nombre de neurones choisis dans la couche cachée

Les courbes obtenues après apprentissage sont illustrées à la figure III-7

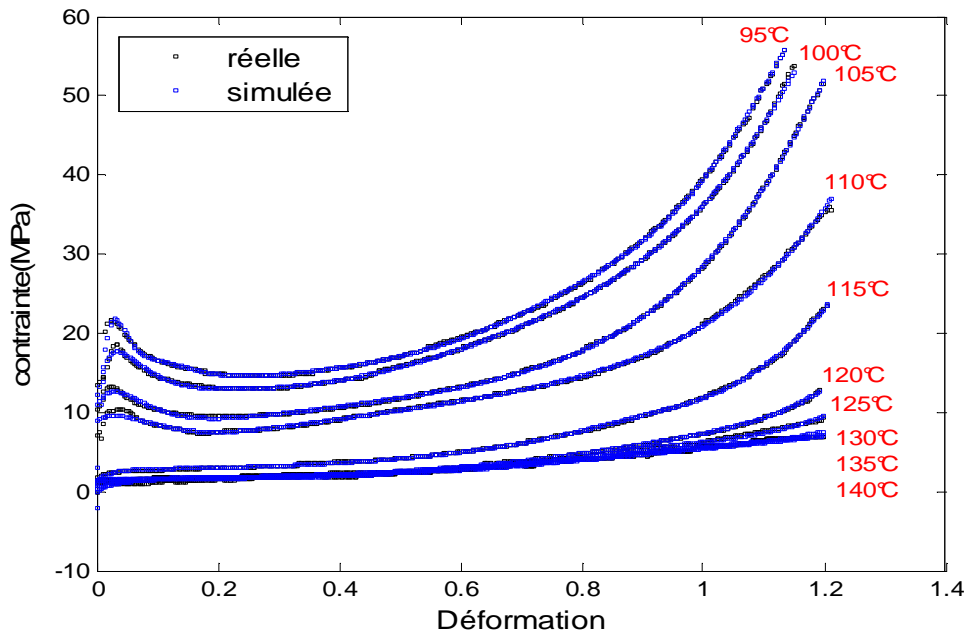


Figure III-7 : test d'apprentissage

Nous avons un comportement visco-élasto-plastique où nous distinguons trois stades. D'abord, aux plus faibles déformations qui sont inférieures à 0.02, les courbes de simulation et expérimentales s'accordent aux différentes températures. Puis, au deuxième domaine, après la limite élastique, les courbes de simulation s'ajustent avec les courbes expérimentales sauf à 100°C, 105°C et 110°C où on remarque un petit décalage. Enfin, au dernier stade, vers $\varepsilon = 0.2$, il existe un grand accord entre les différentes courbes.

Généralement le réseau apprend bien avec un écart type d'erreur égal à 3.88×10^{-4} . Les courbes du test de validation sont illustrées à la figure III-8.

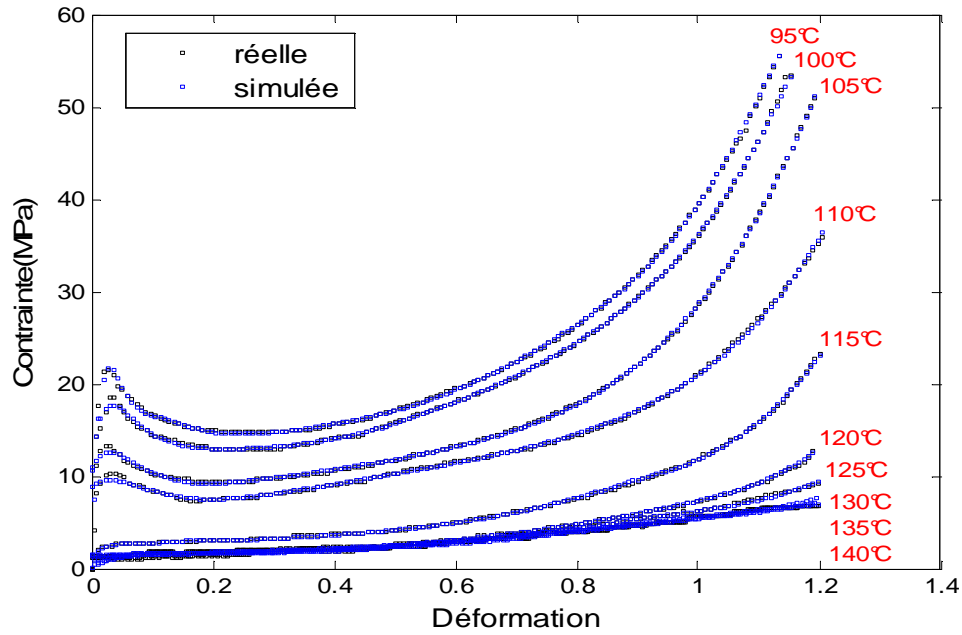


Figure III-8: Test de validation

Le réseau valide aux différentes températures sauf à : 100°C, 105°C 110°C on constate une déviation au niveau du crochet de traction. La validation est faite avec écart type d'erreur : 257×10^{-4} . Globalement le réseau apprend et valide bien dans l'ensemble aux différentes températures.

La figure III-9 illustre le test de généralisation pour la température 96°C.

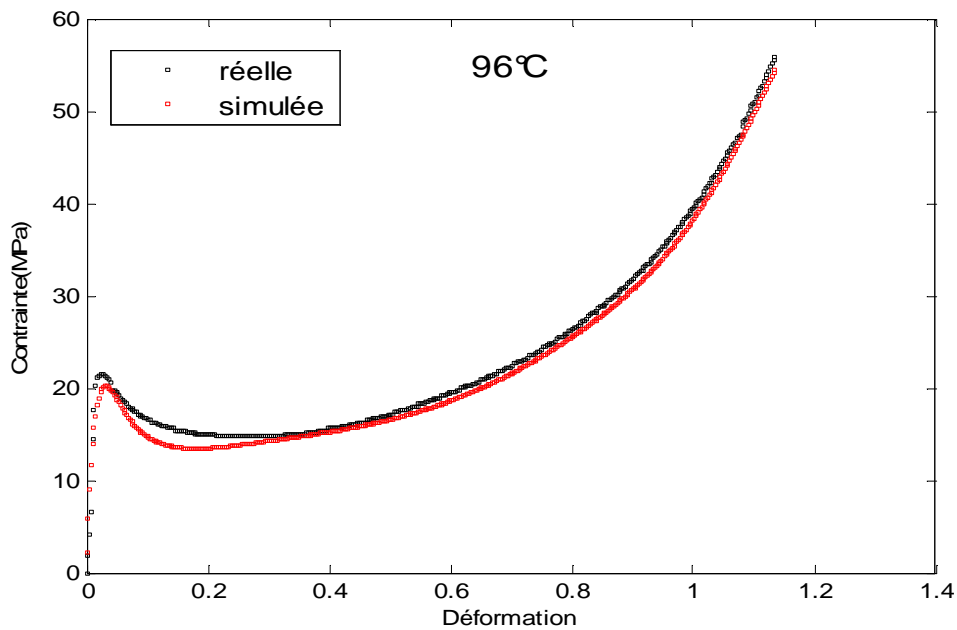


Figure III-9 : Test de généralisation à la température 96°C

III-5-3 Troisième essai

On va appliquer notre méthode de simulation sur un autre PMMA : R249 (voir annexe II).

Soit le vecteur qui rassemble les données d'entrée P , les sous ensembles sont construits comme suit : Pour le sous ensemble de validation on prend la moitié des valeurs de P à partir de la deuxième valeur, $P: 2 : 2 : q$ (q est la taille de P). Le reste est pour le sous-ensemble d'apprentissage, $P: 1 : 2 : q$.

On a réalisé dans cet essai 10000 itérations pour déterminer le nombre de neurones dans la couche cachée. L'architecture que nous avons retenue est un PMC à une seule couche cachée avec 14 neurones dans cette dernière (figure III-10).

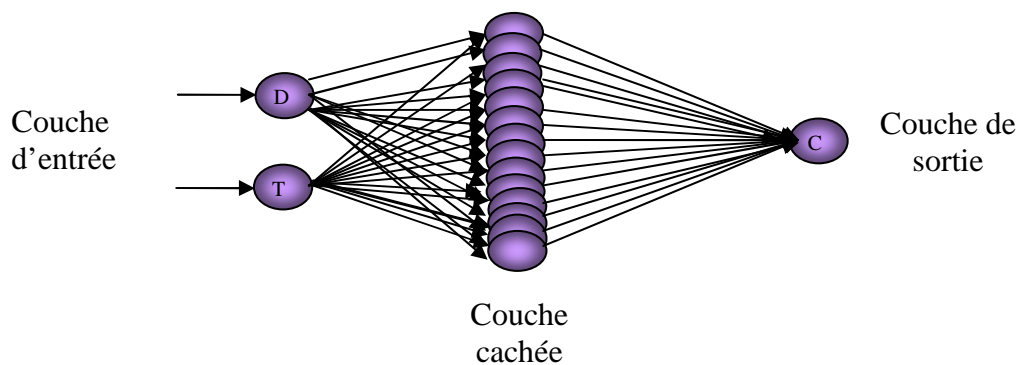


Figure III-10: L'architecture choisie

Le tableau III-4 justifie ce choix.

Nombre de neurones de la couche cachée	RMSE due à l'apprentissage (10^{-4})	RMSE due à la validation (10^{-4})
3	28	217
4	18	218
5	13	219
6	15	219
7	10	219
8	10	219
9	7.70	219
10	7.06	219
11	4.97	219
12	4.83	219
13	9.94	219
14	3.70	219
15	9.32	219
16	9.15	219

Tableau III-4 : Nombre de neurones choisis dans la couche cachée

Les courbes obtenues après apprentissage sont illustrées à la figure III-11.

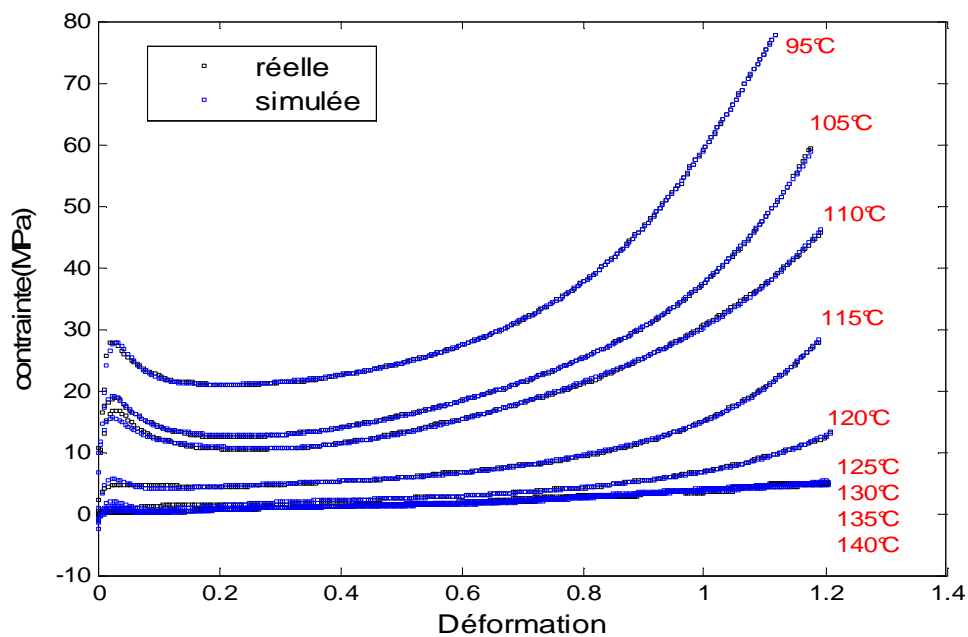


Figure III-11 : Test d'apprentissage

La figure III-11 montre la variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie, on distingue un comportement presque typique à M70, on a trois phases:

- Aux faibles déformations, soit $\varepsilon < 0.02$, on remarque la concordance des courbes de simulation avec les courbes expérimentales.
- La deuxième phase après la limite élastique, les courbes de simulation se concorde avec les courbes expérimentales à différentes températures, contrairement à la température 110°C et 115°C.
- La dernière phase où $\varepsilon = 0.2$, il existe un grand accord entre les courbes de simulation et les courbes expérimentales. Généralement, le réseau apprend bien avec un écart type d'erreur égal à 3.70×10^{-4} .

Les courbes du test de validation sont illustrées à la figure III-12.

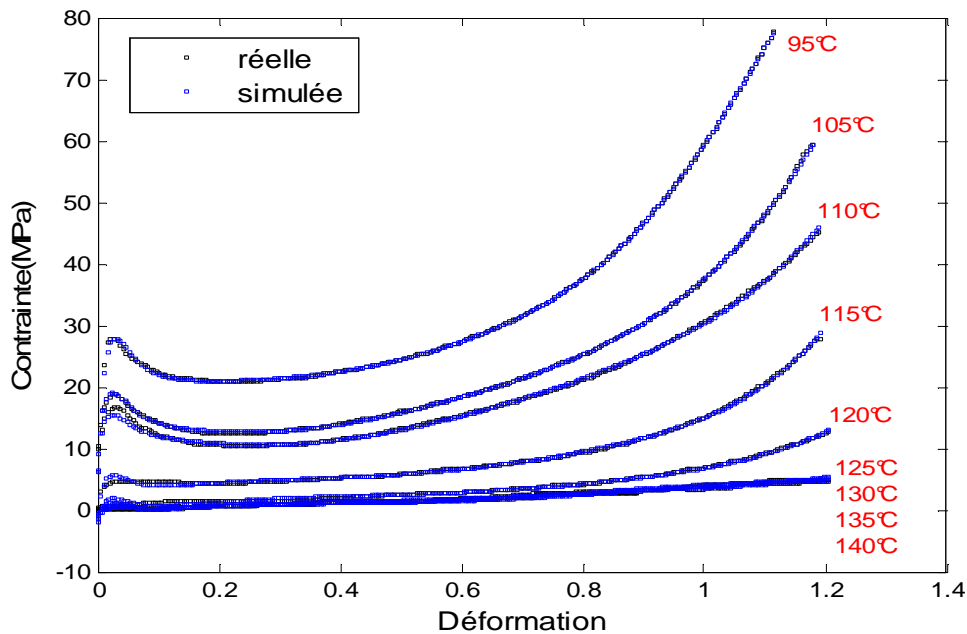


Figure III-12 : Test de validation

Le réseau valide bien aux différentes températures sauf à la température 110°C au niveau du crochet de traction avec un écart type d'erreur de 219×10^{-4} . La figure III-13 illustre le test de généralisation pour la température 96°C.

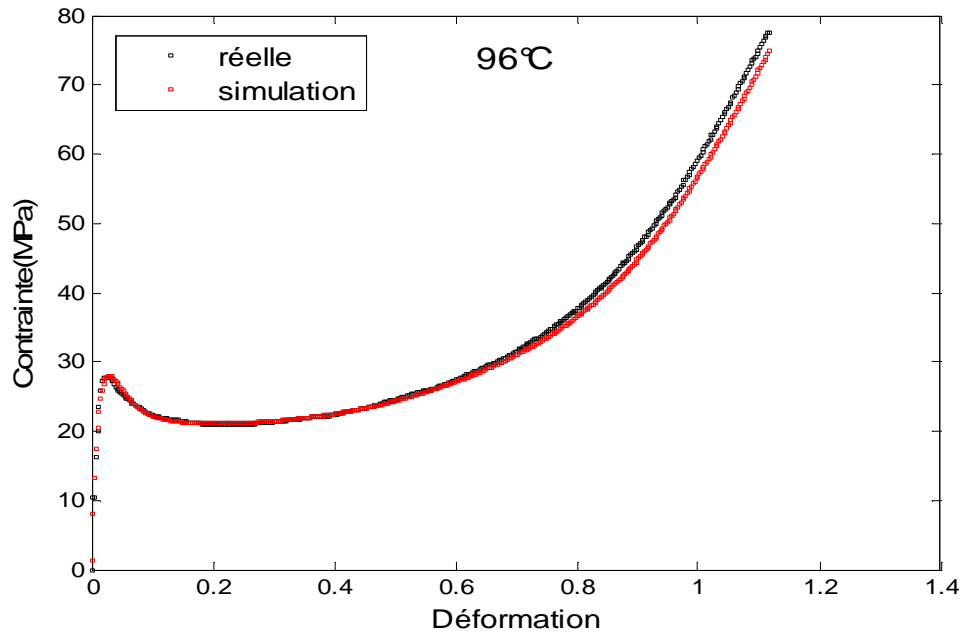


Figure II-13 : Test de généralisation

L'étude du pouvoir de généralisation des réseaux de neurones a été faite dans les trois essais en faisant un test à la température 96°C, pour le premier essai : l'écart type d'erreur de généralisation : est égal à 33×10^{-4} , pour le deuxième essai : il est égal à 20×10^{-4} , et pour le troisième essai : il est égal à 16×10^{-4} .

III-6 Conclusion

Ce chapitre présente l'application de la première méthode RNA. Les réseaux de neurones forment une classe très vaste pour la modélisation des processus non linéaires. Concernant nos matériaux utilisés : le premier est constitué de longues chaînes macromoléculaires linéaires, le second est moyennement réticulé (M70 et R249), la conception d'un réseau de neurones était à une vitesse de déformation constante et à différentes températures ; allant de la température 95°C vers la température 140°C. L'exactitude du modèle neuronale dépend de la qualité d'informations disponibles lors de l'apprentissage et des paramètres choisis.

L'étude de la méthode de Réseaux de Neurones Artificiels pour l'application de prédiction est un domaine très vaste. Cet aspect du travail peut être vu comme un début pour d'autres travaux à venir.

IV-1 Introduction

Dans ce chapitre, on va appliquer la méthode des AG sur le PMMA M70 à une vitesse de déformation constante $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ et aux alentours de sa transition vitreuse T_g . Nous allons détailler les différentes étapes d'application de cette méthode pour trouver une approximation aux courbes expérimentales. En effet, un modèle donné ne s'identifie correctement que si l'on dispose de résultats d'essais en nombre suffisant, mettant en jeu une plage de variation importante de chacun des coefficients à identifier. L'approximation d'une loi de comportement est donc une tâche difficile qui n'obéit pas qu'à des règles rigoureuses et qui doit souvent s'effectuer au cas par cas. Le prix à payer est le nombre de coefficients et les difficultés qui sont liées à ce nombre.

IV-2 Application de la méthode

Dans le présent travail, on utilise la loi de comportement composée suivante (loi de Hook ; loi de Ramberg et Osgood, 1943 ; Treloar, 1973):

$$\sigma_c = E_i \cdot \varepsilon_e(\text{exp}) + \sigma_e \cdot \varepsilon_p(\text{exp})^{1/M} + \sigma_p \cdot d \cdot [\exp(e \cdot \varepsilon_p(\text{exp})) - \exp(-f \cdot \varepsilon_p(\text{exp}))] \quad (\text{IV-1})$$

σ_c : Contrainte calculée par le modèle en MPa.

E_i : Module d'élasticité d'Young (initial) en MPa.

σ_e : Contrainte à la limite élastique en MPa.

σ_p : Contrainte à la striction plastique en MPa.

$\varepsilon_e(\text{exp})$: Déformation élastique expérimentale.

$\varepsilon_p(\text{exp})$: Déformation plastique expérimentale.

$$M = -aT^2 + bT + c$$

T , température, est en °K et a , b , c , d , e et f sont les coefficients du modèle.

Il est indispensable de déterminer les différents coefficients du modèle numérique et de leur faire un ajustement. L'espace de recherche des coefficients pour ce modèle est défini au tableau suivant :

a (K⁻²)	b (K⁻¹)	c	d	e	f
0 < a < 0.00002	0 < b < 0.0015	10 < c < 20	0 < d < 10	1 < e < 2	0 < f < 1

Tableau IV-1 Coefficients du modèle

IV-3 Méthodologie de simulation

On utilise un programme qui va demander d'entrer la taille de population T_{pop} ou «n», celle-ci doit être choisie avec précaution, pour assurer une convergence plus au moins rapide, et l'erreur maximale E_{max} . De même pour le choix de ce paramètre, l'erreur est choisie de la manière suivante : On débute avec une erreur grande puis on la diminue progressivement jusqu'à ce qu'on arrive à l'erreur la plus fine possible, en modifiant aussi d'autres paramètres comme les probabilités de croisement et de mutation. Ensuite, le programme génère la population initiale et procède à son évaluation, en faisant appel à $T_{genererpop}$ et $T_{fitness}$.

Après l'évaluation, nous effectuons le test d'arrêt qui compare l'erreur donnée par l'utilisateur E_{max} avec le minimum de la fitness. Si l'objectif est atteint, le programme s'arrête et nous donne les coefficients du modèle, le nombre de générations effectuées pour arriver à ce résultat et le temps écoulé. Puis, il passe au sous programme de calcul T_{calcul} qui nous permet d'utiliser le modèle obtenu. Sinon, le programme passe aux différents opérateurs, sélection, croisement et mutation, en faisant appel respectivement aux sous programmes $T_{sélection}$, $T_{croisement}$ et $T_{mutation}$. En arrivant à ce calcul, le programme va compter une génération et refaire les mêmes étapes jusqu'à atteindre un nombre de générations limites. Si on voit que l'erreur stagne pendant un certain nombre de générations, on arrête le programme et on choisit d'autres paramètres d'entrées.

IV-3 Description détaillée

IV-3-1 Programme principal

Ce programme va gérer les différents sous programmes nécessaires pour le développement du modèle à partir de quelques paramètres d'entrées qui sont comme suit : le domaine de températures choisies aux alentours de la transition vitreuse, le module d'Young, la limite élastique, la contrainte à la striction. Nous allons expliquer toutes les instructions et les opérations à effectuer pour chaque sous-programme :

IV-3-1-1 Génération de la population initiale

Ce sous programme est très simple, il nous permet de générer la population de départ qui va subir les différents opérateurs d'évolution.

IV-3-1-2 Evaluation

La fonction d'évaluation, appelée fonction Tfitness, joue un rôle important dans l'évolution de l'algorithme génétique. Elle permet de le faire avancer et nous indique la convergence du programme ainsi qu'une estimation d'une erreur de plus en plus fine ou grande qui nous permet d'affirmer que l'algorithme est performant. Cette fonction d'évaluation est basée sur une fonction d'écart où cette dernière est comprise entre les valeurs données par le modèle et celles de la base de données représentées par la fonction fitness qui nous permet aussi d'arrêter le programme principal lorsque l'erreur donnée par l'utilisateur est atteinte.

IV-3-1-3 Sélection

Après l'évaluation de la population, une opération de sélection doit être exécutée en éliminant les mauvais éléments de la matrice Tpop pour les remplacer par d'autres éléments mieux adaptés. Dans ce sous programme, on calcule les deux probabilités 'p' et 'q' définies comme suit :

$$P(i) = \text{fitness}(i) / \left[\sum_{j=1}^n \text{fitness}(j) \right] \quad (\text{IV-2})$$

$$q(i) = \sum_{j=1}^n p(j) \quad (\text{IV-3})$$

Telles que « n » est la taille de la population, « i » est l'indice de la ligne.

Nous générons après un vecteur r_s qui a la taille de la population et est constitué d'élément « rand ». Chaque élément de ce vecteur va être borné par les probabilités du vecteur q. Le programme va choisir l'indice de la borne supérieure et copie la ligne de Tpop qui est la ligne choisie et qui correspond à cet indice. En ce qui concerne la ligne qui correspond à l'indice de l'élément du vecteur r_s borné, elle va disparaître. Cette opération s'exécute seulement si la fitness de la ligne choisie est inférieure à celui qui va disparaître.

IV-3-1-4 Croisement

Afin d'améliorer la fitness qui est l'erreur de chaque individu, on utilise l'opérateur de croisement, en combinant deux coefficients de la même colonne. On obtient ainsi deux individus différents. Nous définissons la probabilité de croisement P_c qui nous permet de choisir les individus qui vont admettre ultérieurement un croisement. Le programme les regroupe ensuite deux par deux, sachant que le croisement se fait entre deux individus qui

échangent leur patrimoine génétique. Puis, on opère à un croisement conformément à nos données. La probabilité de croisement est fixée habituellement à 0.75, ou entre 0.5 et 1.

IV-3-1-5 Mutation

La mutation joue un rôle du bruit qui empêche la population de se cailler, puisque elle engendre des modifications aléatoires. La procédure est la suivante : on génère le vecteur r_m de taille « n » et aussi le vecteur de probabilité P_m de taille '6', la taille '6' représente le nombre de colonnes de la matrice T_{pop} , et « n » représente le nombre de lignes. Selon la probabilité, on va choisir les éléments qui vont permettre une mutation. Après le choix de ces éléments, on fait la mutation conformément dite. En premier, on transforme l'élément en entier par la formule de codage ; En second, on le transforme en binaire.

IV-3-1-6 Calcul

Ce sous programme permet de calculer à partir du modèle la propriété étudiée « le calcul de la contrainte ». Pour cela, il faut donc introduire les valeurs expérimentales de la contrainte et de la déformation du PMMA M70. A partir de ces données, le programme va calculer la valeur de la contrainte donnée par le modèle et, en plus, si on connaît la valeur expérimentale de la contrainte du PMMA M70, le programme donnera l'écart entre les valeurs expérimentales et calculées à partir du modèle choisi.

IV-4 Résultats de simulation

Pour l'exécution du programme, on utilise notre fonction principale en tapant $P_{principal}$ (Annexe III) et en entrant la température, les déformations, les contraintes, le module d'Young expérimental du matériau étudié, la limite élastique et la contrainte à la striction. Sachant que le critère d'arrêt dans notre méthode est l'erreur maximale. La probabilité de croisement est égale à 80% parce que c'est la valeur la plus convenable et qui donne les meilleurs résultats, avec une probabilité de mutation égale à 0.1%.

IV-4-1 A T inférieur à T_g :

Dans le domaine vitreux, nous commençons par la température de 95°C, en augmentant progressivement de 5°C, chaque fois, jusqu'à 105°C.

Tout d'abord, à 95°C, on obtient les résultats suivants (voir figure IV-1) qui montrent une superposition parfaite dans le domaine élastique. Puis, on constate un décalage dans le

deuxième domaine. Enfin, il y a une allure de la courbe simulée différente de la courbe expérimentale dans le troisième domaine. Notre modèle converge avec $E_{max} = 9.5\%$ qui est notre erreur soutenue, un $minfitness$ égal à 3.6% et un temps écoulé de 29 secondes.

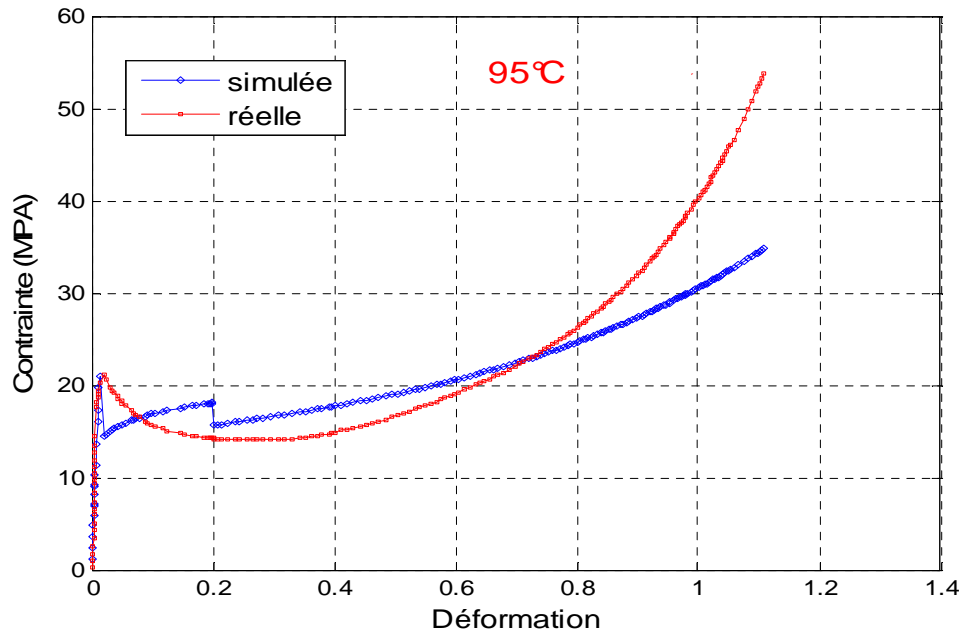


Figure IV-1 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 95°C

A $T=100^{\circ}\text{C}$, on réussit à trouver les résultats illustrés à la figure IV-2.

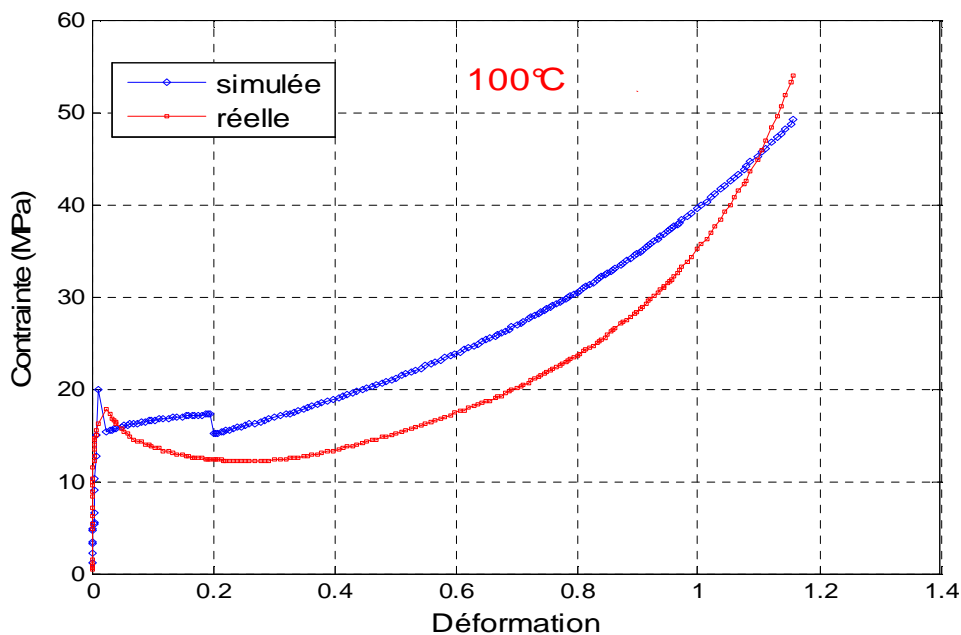


Figure IV-2 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 100°C

On remarque un décalage dans le deuxième et le troisième domaine, le modèle est retenu avec minfitness égal à 0.18 %, $E_{max} = 9.5\%$ et un temps de calcul de 40 secondes.

Enfin, à 105°C , les résultats sont comme suit (figure IV-3) : Avec une erreur maximale de 9.5 % souhaitée, on remarque un décalage de la courbe de simulation par rapport à la courbe expérimentale dans le deuxième et troisième domaine. Le modèle est simulé après 52 secondes, avec une valeur de minfitness égale à 0.2 %.

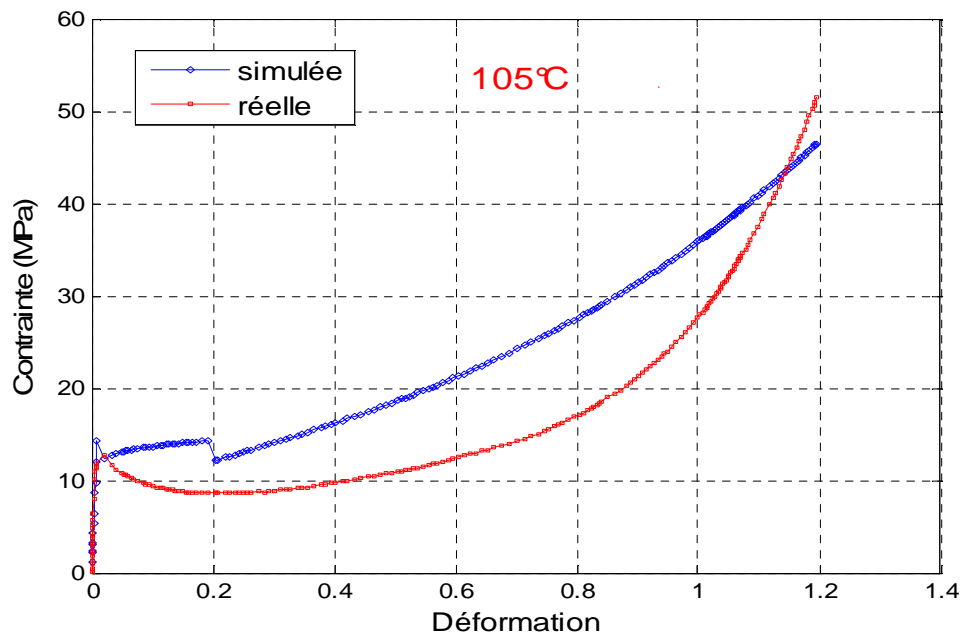


Figure IV-3 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 105°C

Ce tableau illustre les coefficients des modèles simulés aux températures inférieures à T_g .

Coefficients T ($^{\circ}\text{C}$)	a (10^{-6} K^{-2})	b (10^{-5} K^{-1})	c	d	e	f
	95	7,60	119,4	12,49	5,09	1,93
100	19,8	136,4	12,86	7,91	1,56	0,13
105	3,85	88,9	15,58	9,76	1,31	0,74

Tableau IV-2 : Valeurs de coefficients des modèles à $T < T_g$

Aux figures IV-1, IV-2 et IV-3, nous avons présenté les variations de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie aux basses températures, relativement. On a constaté qu'il y a eu une concordance des courbes de simulation avec les courbes expérimentales, dans le domaine élastique. Pour la limite élastique, on remarque la même valeur à 95°C mais un petit décalage à 100°C et à 105°C. Dans le domaine plastique, les courbes de simulation sont différentes par rapport aux courbes expérimentales avec un écart remarquable d'erreur.

IV-4-2 Dans le domaine caoutchoutique :

Au dessus de T_g , entre 110°C et 140°C, on obtient les résultats ci-dessous :

A 110°C, les résultats de la figure IV-4 montrent qu'il y a une concordance dans le domaine linéaire entre la courbe simulée et expérimentale. Les contraintes calculées s'approchent des valeurs expérimentales surtout dans le domaine $0 < \epsilon < 0.9$ de déformation. On remarque la superposition presque parfaite de la courbe simulée avec la courbe expérimentale dans l'intervalle de déformation [0.50, 0.90].

Avec une erreur maximale $E_{max} = 6.5 \%$, on a une $minfitness = 0.33 \%$, après 33 secondes de temps de calcul.

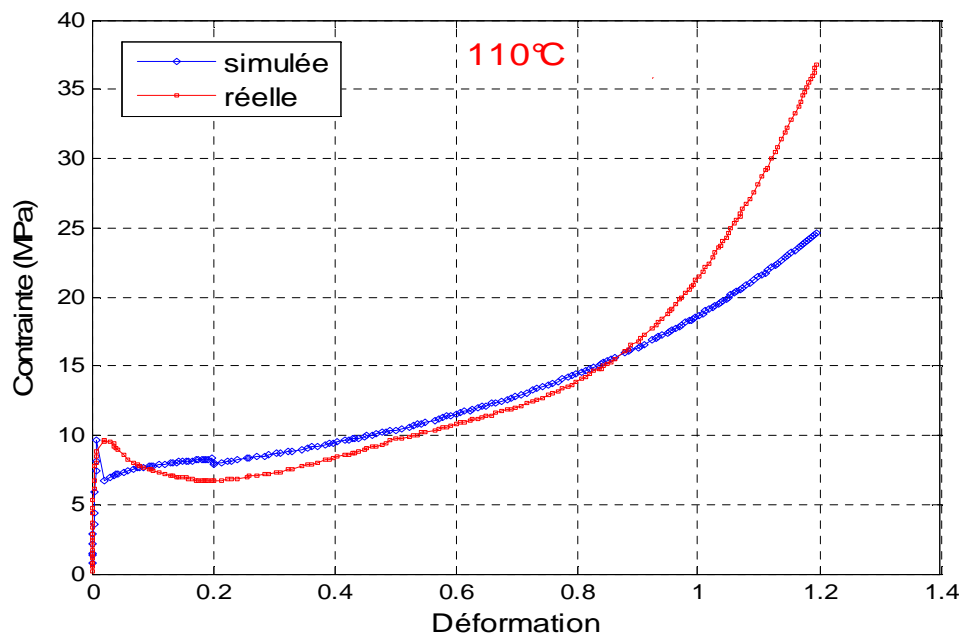


Figure IV-4 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 110°C

A 115°C (figure IV-5), un décalage positif dans le domaine élastique est évoqué, suivi d'un autre négatif dans le deuxième domaine $[0.02, 0.2]$. On remarque que les courbes de simulation et expérimentales sont confondues dans la plage de déformation $0.2 < \varepsilon < 1$, et à partir de $\varepsilon = 1$ un décalage négatif est remarqué, avec une erreur $E_{\max} = 12\%$ et $\text{minfitnes} = 0.99\%$, pour un temps de calcul égal à 32 secondes.

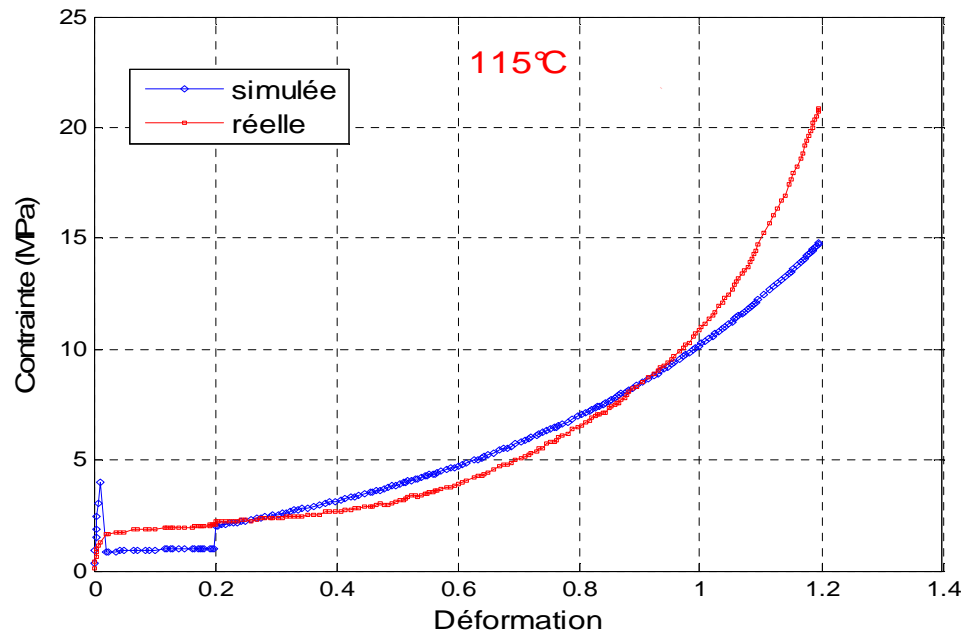


Figure IV-5: Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 115°C

A 120°C (figure IV-6), pour une erreur maximale souhaitable de 14.5%, $\text{minfitnes} = 0.56\%$ et un temps de calcul égal à 34 secondes, on observe un décalage positif dans le petit domaine linéaire (caractérisé par une faible limite élastique) : $0.02 < \varepsilon < 0.2$. Une concordance est vue les deux courbes simulée et expérimentale sont presque superposées dans les deux domaines de déformation : $0.02 < \varepsilon < 0.2$ et $0.2 < \varepsilon < 1.2$.

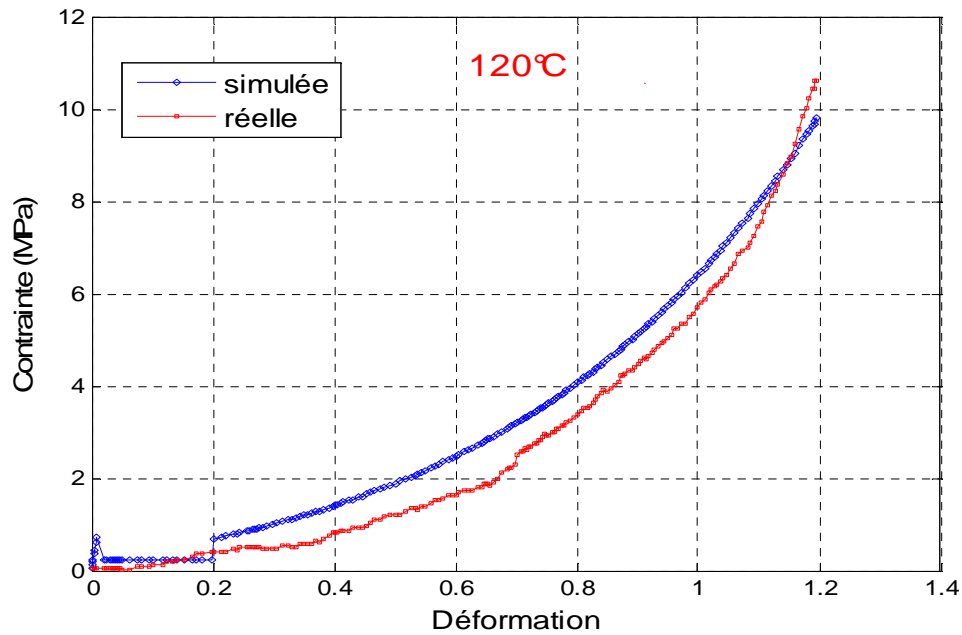


Figure IV-6: Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 120°C

A 125°C (figure IV-7), on remarque une concordance dans le premier et deuxième domaine de déformation, puis un décalage dans le troisième domaine entre les courbes simulée et expérimentale. Avec $E_{max} = 14.5\%$ souhaitée, minfitness qui est égal à 1.29 %, après un temps de calcul égal à 31.03 secondes.

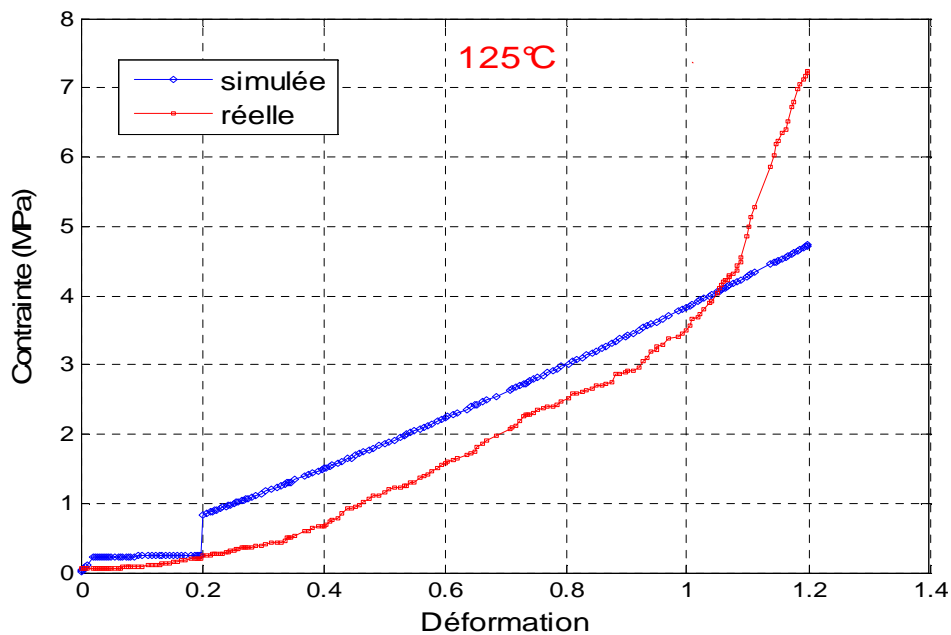


Figure IV-7 : Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 125°C

A 130°C (figure IV-8), on constate des résultats presque semblables aux précédents vus à la température 125°C. L'erreur maximale de ce modèle égale à 15.5 % et une valeur de minfitness égale à 0.52 % après un temps de calcul pris de 36.77 secondes.

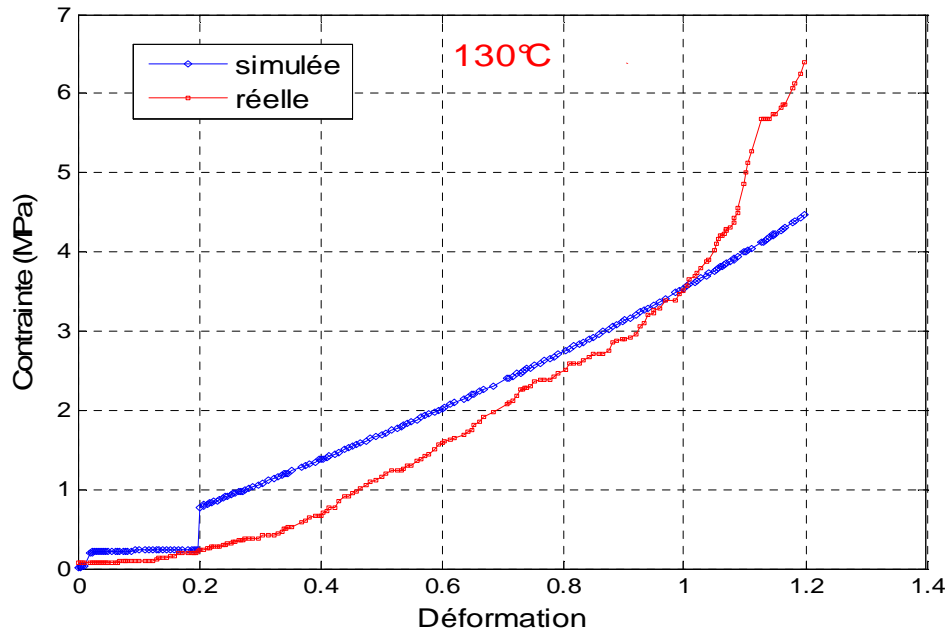


Figure IV-8: Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 130°C

Aux températures 135°C et 140°C (figure IV-9), on remarque que les résultats s'améliorent surtout dans le troisième domaine de la déformation. Cela en se fixant à une erreur maximale de 12 %, on obtient un minfitness = 0.84 % et un temps écoulé de 28.42 secondes.

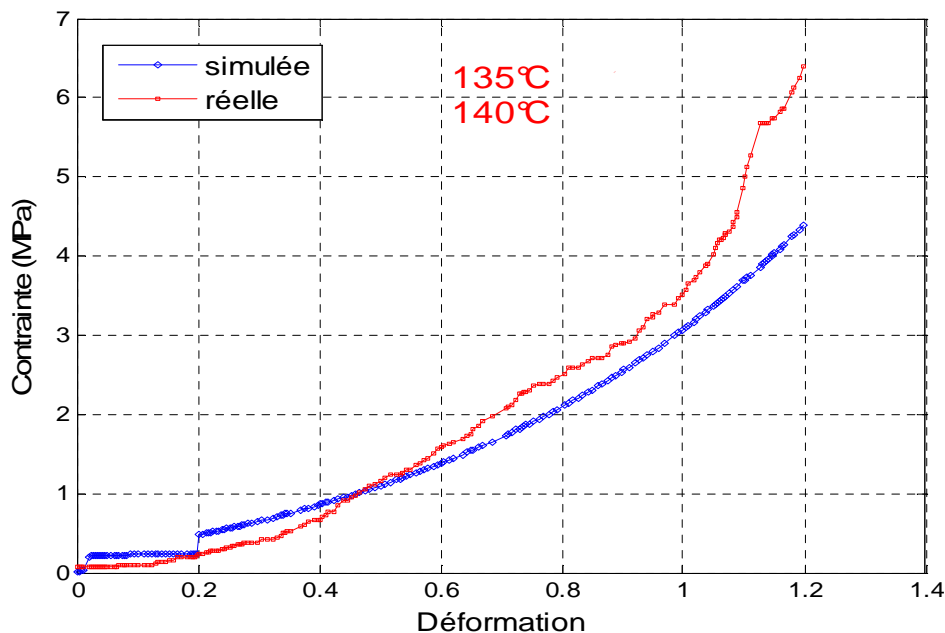


Figure IV-9: Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie à 135°C et 140°C

Ce tableau illustre les coefficients des modèles simulés aux températures supérieures à T_g .

Coefficients T (°C)	a ($10^{-6} K^{-2}$)	b ($10^{-5} K^{-1}$)	c	d	e	f
	110	14,5	80,6	17,79	9,10	1,11
115	7,39	66,7	15,01	7,41	0,96	0,64
120	9,87	30	11,15	6,03	0,73	0,32
125	11,21	118	11,41	5,58	0,41	0,86
130	9,45	117	16,94	1,19	1,49	0,29
135	17,6	123	17,02	7,91	0,15	0,75
140						

Tableau IV-3 : Valeurs de coefficients des modèles à $T > T_g$

Nous avons également évoqué aux figures précédentes, l'évolution de la contrainte vraie de notre matériau avec la déformation vraie. En s'éloignant de la température de transition vitreuse T_g , on note que le domaine élastique des courbes simulées est similaire à celui des courbes expérimentales aux températures élevées : [110, 140]. Seulement à la température 115°C et 120°C on remarque un écart. Pour le deuxième et le troisième domaine de déformation, on remarque que l'écart d'erreur diminue en augmentant la température.

Sachant que le but de notre programme appliqué est de trouver un écart d'erreur minimal entre la contrainte calculée et la contrainte expérimentale et que les courbes expérimentales et simulées s'approchent.

IV-5 Conclusion

Nous avons détaillé les différentes étapes d'application de la méthode des AG au cours de ce chapitre. On a constaté la forte influence de la température sur l'approximation de la loi de comportement mécanique du matériau étudié, une amélioration des résultats vue dans les courbes testées aux températures supérieures à la température de transition vitreuse T_g .

V-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons discuter et comparer les résultats obtenus dans les deux parties précédentes, en présentant les avantages et les inconvénients de chaque méthode de simulation.

V-2 Discussion

V-2-1 Méthode de Réseaux de Neurones Artificiels (RNA)

Comme on l'a déjà vu, cette méthode utilise un réseau de neurones non bouclé muni de deux variables pour la couche d'entrée, une seule couche cachée et une seule variable dans la couche de sortie linéaire, c'est-à-dire qu'elle réalise une somme pondérée de ses entrées avec linéarité. C'est le Perceptron multicouches PMC.

Dans le présent travail, on a réalisé des mesures, en un nombre fini de 10000 itérations, des entrées et des sorties de la contrainte vraie que l'on cherche à modéliser. Cela consiste alors à approcher une fonction de régression inconnue à l'aide de fonctions paramétrées (RNA). L'apprentissage des RNA est la procédure algorithmique par laquelle les poids du modèle sont estimés, à partir des mesures des entrées et des sorties correspondantes du processus. Durant l'apprentissage, on cherche à minimiser la fonction coût des moindres carrés, c'est-à-dire la somme des carrés des erreurs de modélisation pour tous les exemples utilisés pour l'apprentissage, ou l'ensemble d'apprentissage. La méthode d'optimisation dite méthode de gradient, du second ordre, telle que la méthode de Levenberg^o-Marquardt, est l'algorithme utilisé dans notre travail.

D'après les résultats obtenus au chapitre III, on a prédit la loi de comportement du matériau PMMA dans trois essais. On a constaté dans le premier essai que le réseau neuronal imite bien le comportement du PMMA M70, matériau étudié. Dans le deuxième essai, le réseau apprend et valide globalement bien dans l'ensemble aux différentes températures, cela en prenant les sous ensembles d'apprentissage et de validation différents du premier essai. Dans le troisième essai appliqué au PMMA R249 qui est réticulé, le réseau apprend en général avec un écart type d'erreur égal à 3.7×10^{-4} et valide mieux aux différentes températures, sauf à la température 110°C où on remarque un petit décalage dans le deuxième domaine de déformation. Les RNA sont mieux adaptés au PMMA R249.

Cette méthode de simulation a plusieurs avantages. Tout d'abord, elle présente une tolérance très élevée aux incertitudes, avec une grande facilité d'application et de très bonnes capacités de généralisation et auto-adaptation aux changements dans l'environnement. De plus, nous disposons de choix variés de réseaux, de types d'architectures et de fonctions d'activations diverses, nécessitant une solide base théorique, capables de généraliser et/ou d'interpoler dans le cadre des données utilisées pour l'apprentissage. Enfin, étant une multiple copie d'une unité simple, le neurone est facilement extensible.

Par contre, nous rencontrons quelques inconvénients :

- Facilité d'applications donnant lieu à de nombreux ajustements, ou arrangements, et choix pas toujours justifiés.
- Choix du réseau retombe souvent sur l'utilisateur car il n'existe pas de guide prouvé pour toute utilisation.
- Nature non linéaire des réseaux de neurones artificiels qui peut piéger l'utilisateur dans un minimum local.
- Volume important d'apprentissage pour atteindre une bonne précision.

V-2-1 Méthode des Algorithmes Génétiques (AG)

En appliquant cette méthode, on déduit qu'elle adopte l'utilisation de plusieurs paramètres ou variables comme l'erreur maximale, la taille de la population, la température, le module d'Young, la limite élastique, la contrainte à la striction, la contrainte vraie expérimentale et la déformation vraie expérimentale.

Nous devons respecter les points suivants :

- Les parents générés sont adjacents, car le nombre de population est égal à 205 individus.
- Le croisement a été fait sur les nouveaux nés avec une probabilité de croisement $P_c = 80\%$.
- La mutation se fait sur les nouveaux nés qui ont subi un croisement avec une probabilité de mutation $P_m = 0.1\%$.
- Après la sélection, on doit refaire le croisement et la mutation.
- Le codage est binaire.

Les résultats nous montrent la fiabilité du programme principal ainsi que les sous programmes appelés par celui-ci. On aperçoit que dans le domaine vitreux les résultats sont

moins performants. Par conséquent, les courbes de simulation s'approchent des courbes expérimentales dans le domaine caoutchoutique.

Les AG diffèrent fondamentalement des autres méthodes selon quatre axes principaux (Lerman et Ngouenet, 1995) :

- Ils utilisent un codage des paramètres et non pas les paramètres eux-mêmes.
- Ils travaillent sur une population de points au lieu d'un point unique.
- Ils ne font appel qu'à des valeurs de la fonction étudiée, pas à sa dérivée ou à une autre connaissance auxiliaire.
- Ils ont des règles de transition probabilistes et non déterministes.

Ces quatre points fondamentaux ont été appliqués soigneusement dans notre étude.

V-3 Comparaison

En utilisant la méthode des RNA, on a remarqué une très bonne superposition des courbes simulées et expérimentales dans les domaines vitreux et caoutchoutique du matériau. Alors qu'avec la technique des AG, on note un décalage entre ces courbes dans tout le domaine des températures étudiées qui diminue néanmoins considérablement au dessus de Tg. Nous allons donc considérer deux cas typiques : Le premier à 95°C, au dessous de Tg, le second au dessus de Tg à 120°C.

Donc, on constate à 95°C une concordance pour les courbes des RNA, contrairement à celles des AG (voir figure V-1) où subsiste un décalage dans les deuxième et troisième domaines de déformation. Cet écart est en moyenne de 10%.

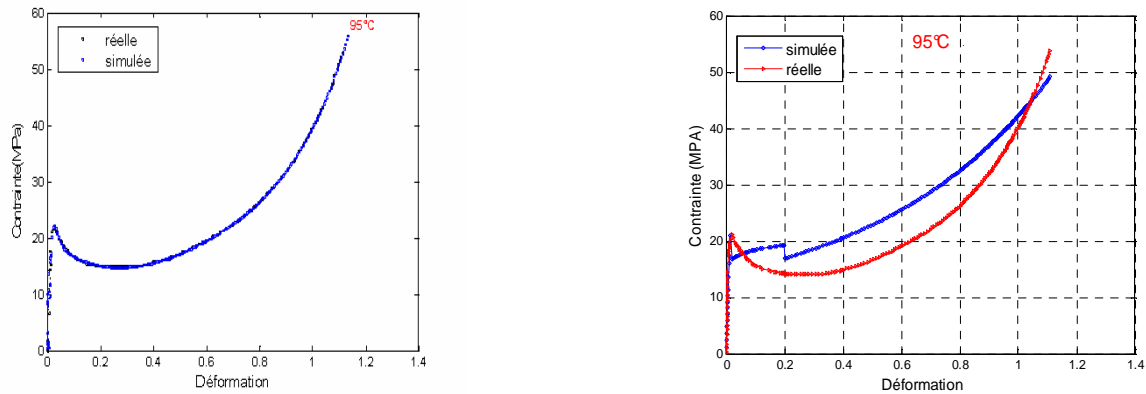


Figure V-1 : Comparaison du test de validation des RNA
avec les résultats des AG à 95°C

Pour les RNA, à $T = 120^\circ\text{C}$, c'est-à-dire au domaine caoutchoutique, les courbes simulées et expérimentales sont confondues tandis que les AG connaissent une amélioration substantielle (Conférer figure V-2). En effet, l'écart n'est plus que de 7 %, en moyenne.

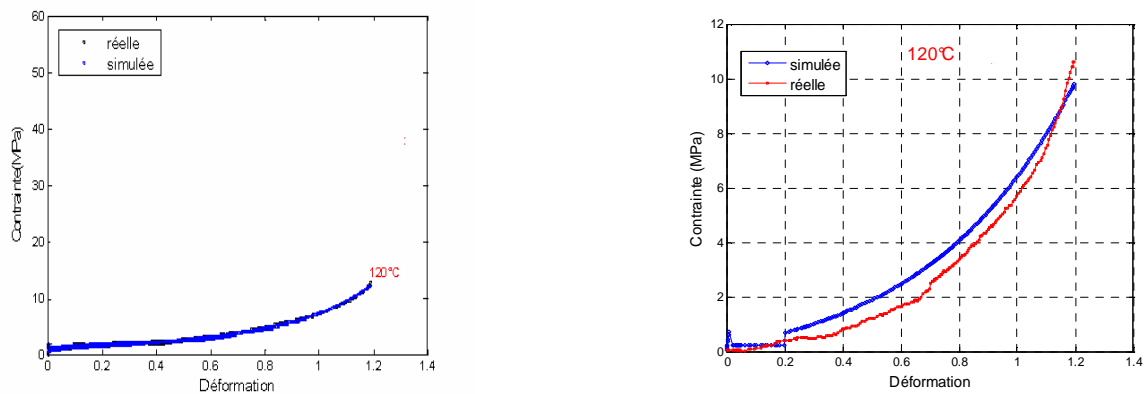


Figure V-2 : Comparaison du test de validation des RNA
avec les résultats des AG à 120°C

V-4 Conclusion

A partir des données expérimentales du PMMA, on a estimé, par utilisation des RNA et AG, une loi de comportement aux alentours de sa température de transition vitreuse T_g , dans trois domaines de déformation. Les deux techniques RNA et AG, considérées comme boîtes noires, font partie des méthodes métaheuristiques.

Les RNA ont une capacité à modéliser, dans le sens d'approximation universelle. Ils sont aussi un outil rigoureux aux bases démontrées. Nous avons pris dans cette étude, comme méthode, la parallélisation de l'algorithme de rétro-propagation (RP), avec comme objectif l'approximation d'une loi de comportement du PMMA. En utilisant un réseau de neurones particulier, le Perceptron Multicouches PMC qui a une structure organisée en couche, on trouve d'abord une couche cachée où chaque neurone calcule une fonction non linéaire des variables du réseau, puis une couche de sortie linéaire qui calcule la combinaison linéaire des grandeurs calculées par les neurones cachées. Nous avons utilisé dans notre travail la fonction d'activation sigmoïde pour la couche cachée. Nous notons la présence de connexions entre la première entrée du réseau, supposée constante et de valeur 1, et la couche de sortie. Celles-ci ont pour but d'autoriser l'ajout d'un terme constant, appelé biais, aux sorties du réseau. Les modèles réalisés par le réseau dépendent des valeurs des coefficients de pondération, poids et biais des neurones. On a réalisé trois essais en se basant sur la minimisation d'une fonction de coût quadratique des différences entre les sorties du réseau et celles désirées avec un apprentissage supervisé. Notre application est parcimonieuse, c'est à dire qu'on n'a pas beaucoup utilisé de paramètres. Ce réseau nous a permis donc de faire un meilleur usage des mesures disponibles que les méthodes de régression non linéaires conventionnelles. Les résultats semblent mieux adaptés à ce type de modélisation en terme de performance et de facilité de mise en œuvre. Les RNA demandent cependant à être mieux compris afin que l'on puisse prévoir plus facilement l'architecture à utiliser.

Dans le but de minimiser l'écart entre les courbes réelles et simulées, la méthode des AG est particulièrement adaptée aux problèmes d'optimisation comportant plusieurs paramètres, comme dans notre cas. On a utilisé beaucoup de paramètres en employant un programme principal qui gère un ensemble de sous programmes, avec une banque de données assez riche. Les résultats obtenus par cette méthode s'améliorent au fur et à mesure en augmentant la température, et surtout au dessus de la température de transition vitreuse T_g .

En effet, les justifications théoriques de la validité des AG sont incomplètes et peu précises quand il s'agit de passer en pratique. De nombreux paramètres doivent encore être déterminés après expérience, ce qui demande du temps et ne donne aucune assurance de réussir.

CONCLUSION GENERALE

L'approximation d'une loi de comportement est au cœur de notre étude. L'essai de traction est la technique expérimentale choisie pour décrire le comportement du matériau le polyméthacrylate de méthyle PMMA, connu par sa transparence optique supérieure au verre ordinaire, par sa facilité de coloration, de décoration, de métallisation, de formage, d'usinage et de collage, son excellente tenue au vieillissement et aux ultra violet, ainsi que sa rigidité.

Deux méthodes de simulation sont étudiées et élaborées sur le PMMA, les RNA ou Réseaux de Neurones Artificiels et les AG ou Algorithmes Génétiques.

La première a fait l'objet de beaucoup d'attention au cours des deux dernières décennies, en raison de sa capacité à résoudre des problèmes non linéaires. Bien qu'un large éventail de types de réseaux de neurones puisse être trouvés, le Perceptron MultiCouches (PMC) est l'un des plus utilisés. Appelé aussi le feed-forward, le PMC est constitué d'une couche d'entrée, d'une seule couche cachée activée par une fonction sigmoïde et d'une couche de sortie linéaire. Il fournit une structure simple et flexible. Le choix du nombre de neurones en couche cachée est déterminé à partir des essais pour aboutir à une erreur acceptable entre la sortie du réseau et celle attendue. On a effectué trois essais dans notre travail où le troisième a été réalisé sur un grade moyennement réticulé du PMMA pour tester l'efficacité des RNA.

L'exactitude du modèle neuronale dépend de la qualité d'informations disponibles lors de l'apprentissage et des paramètres choisis. D'après les résultats obtenus par la première méthode, on a approximé la loi de comportement du PMMA dans trois essais. On a constaté pour le M70 dans le premier essai que le réseau neuronal imite bien le comportement du matériau étudié. Dans le deuxième, globalement le réseau apprend et valide bien dans l'ensemble aux différentes températures. Dans le troisième essai appliqué au R249, on a constaté que, généralement, le réseau apprend et valide bien aux différentes températures sauf à 110°C. L'application de cette méthode est mieux ajustée pour le R249. L'étude du pouvoir de généralisation des réseaux de neurones a été faite dans les trois essais en faisant un test à la température 96°C, pour le premier essai l'écart type d'erreur est égal à 33×10^{-4} , pour le deuxième essai 20×10^{-4} et pour le troisième essai 16×10^{-4} .

La seconde méthode est une technique de recherche optimale basée sur la sélection naturelle et la suivie du fort, travaillant avec une taille fixe de la population où les solutions possibles d'un problème sont appelées individus et évoluent dans le temps. On doit disposer des cinq éléments suivants : Un principe de codage de l'élément de population, un mécanisme de génération de la population initiale, une fonction de mérite, des opérateurs permettant de diversifier la population au cours des générations et d'explorer en théorie la quasi-intégralité de l'espace d'état, l'opérateur de croisement et l'opérateur de mutation et des paramètres de dimensionnement du problème, tels que la taille de la population, le nombre total de générations ou critère d'arrêt de l'algorithme, les probabilités d'application des opérateurs de croisement et de mutation.

En appliquant la méthode des AG, on a déduit qu'elle adopte l'utilisation de plusieurs paramètres ou variables, en nous demandant une banque de données pratique. On a adopté beaucoup de paramètres en utilisant un programme principal qui gère un ensemble de sous programmes, les résultats obtenus par cette méthode s'améliorent au fur et à mesure de l'augmentation de la température.

Pour prévoir la différence entre les deux méthodes, une comparaison a été faite. On a pris deux cas typiques, au dessous et au dessus de T_g . On a remarqué que la première technique est mieux ajustée que la seconde pour simuler la loi de comportement mécanique du PMMA.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

Afnor

« Détermination des caractéristiques en traction des matières plastiques ». (1968), Norme Française Homologuée, NF T 51-034, Juillet 1968.

Aly-Helal N.A.

« Etude et simulation du développement de la striction dans le polyéthylène à haute densité ». (1982) Thèse de Docteur-Ingénieur, I.N.P.L., Nancy.

Andrews E.H.

« Fracture in polymers ». (1968) Oliver and Boyd, Edinburgh.

Bahadur S.

“Strain hardening equation and the prediction of tensile strength of rolled polymers”. (1973) Polym. Eng. Sci. , 13, 266.

Bauwens J.-C.

« Déformation plastique des hauts polymères vitreux soumis à un système de contraintes quelconque ». (1967) J. Polym. Sci. A-2, 5, 1145.

Bauwens J. –C.

« Plastic deformation : experimental data and constitutive equations ». (1982) in « Plastic deformation of amorphous and semi-cristalline materials », Ed. By ESACAIG B. and G’SSELL C., les Editions de Physique, Les Ulis, 175.

Bauwens-Crowet C. , OTS J.M. and Bauwens J. –C.

“The strain rate and temperature dependence of yield of polycarbonate in tension, tensile creep impact tests”. (1974) J. of Mater.Sci., 9, 1197.

Battiti R.

« First and second order methods for learning : Between steepest descent methods and newton’s methods ». Neural Computation, Vol. 4, No. 2, 1992, pp. 141-166.

Billings S.A., H.B., Jamaluddin N H.B. and Chen S.

“Properties of neural networks with applications to modelling non-linear dynamical systems” Int. Journal Of Control, Vol. 55, N°1, 1992, pp. 193-224.

Bishop C.

“Neural networks for pattern recognitions”. Clarendon Press-Oxford New-York, 1995.

Bridgman P. W.

“The stress distribution at the neck of tension specimen”. (1944) Trans. Am. Soc. Metals, 32, 553.

Broutman L.J. and Kalpakjian S.

(1969) SPE Journal, 25, 46.

Brydson J.A.

“Plastics Materials”. (1982) Butterworth Scientific, 4th Edition, London GB.

Bryson A.E and JR. YU C.H.

“Applied optimal control. Optimization, estimation and control”. By Ginn and Company Waltham, Massachusetts, 1969.

Bueche F.

“Physical properties of polymers”. (1962) Interscience Publishers, New-York.

Caspary W. and Tollens B.

“Der β -biprompionsäure in acrylsäure”. (1873) Ann., 167, 241.

Cross A. and Haward R.N.

“Thermal fracture of plastics”. (1973) J. Polym. Sci. , 11, 2423.

Cybenco G.

« Approximation by superposition of sigmoïde function ». Math. Of Control, Signals and Systems, Vol. 2(4), 1989, pp.303-314.

Davis, L.

“The handbook of genetic algorithms”, Von Nostrand Reinhold, New York. (1991)

Davis L.A. and Pampillo C.A.

“Kinetics of deformation of PTFE at high pressure”. (1972) J. Appl. Phys., 43 (11), 4285.

Delbosq R.

(1970) in “Materiali e applicazioni poliplasti e plastici”, 28 (149), 13.

Dreyfus G., Idan Y.

« The canonical form of nonlinear discrete-time models ». Neural Computation Vol. 10. N°1, 1998, pp.133-164.

Fittig R.

“Ueber polymerisirte ungesättigte säuren”. (1879) Ber. , 12, 1739.

Fittig R. and Engelhorn E.

“Untersuchungen über die ungesättigten säuren, dritte abhandlung. 2. Zur kenntnifs der methacrylsäure”. (1880) Ann. , 200, 65.

Fletcher R.

« Practical methods of optimisation ». Jhon Wiley and Sons Ltd, second edition, New-York, USA, 1987.

Flick J.R and Petrie S.E.B.

(1974) BULL. Amer. Phys. Soc. , 19, 238.

Funahachi K.

« On the approximate realisation of continuous mappings by neural networks ». Neural networks, Vol. 2, 1989, pp. 183-192.

Gallinari P.

Heuristiques pour la généralisation, S. Thiria, Y. Lechevalier, O. Gascuel et S. Canu editeurs. « Statistiques et méthodes neuronales », Dunod, Paris, 1997, Chapitre 14, pp. 230-243.

Gayner R.J. and Downs T.

“On the properties of error functions that affect the speed of backpropagation learning”. In Marinaro M. and Morasso P. G., editors, ICANN'94, Proceeding of the International Conference on Artificial Neural Networks; 26-29 May 1994, Sorrento, Italy, 1994, pp.557-560.

Goldberg D.E.

Genetic algorithms in search, Optimization and Machine Learning. Addison Wesley, New-York, NY, 1989.

G'Sell C.

“Instabilités de déformation pendant l'étirage des polymères solides” Revue Phys. Appl. 23 (1988) page 1089.

G'Sell C., Aly-Helal N.A. and Jonas J.J.

“Effect of stress triaxiality on the neck propagation during the tensile stretching of solid polymers”. (1983) J. Mater. Sci., 18, 1731.

G'Sell C., Boni S. and Shrivastava S.

“Application of the plane simple shear test for determination of the plastic behaviour of solid polymers at large strain”. (1983) J. Mater. Sci., 18, 903.

G'Sell C. and Gopez J.R.

“Plastic banding in glassy polycarbonate under plane simple shear”. (1985) J. Mater. Sci., 20, 3462.

G'Sell C. and Jonas J.J.

“Yield and transient effects during the plastic deformation of solid polymers”. (1981) J. Mater. Sci., 23, 4209.

G'Sell C. Marquez-Lucero A., Gilormini P. and Jonas J.J.

”Flow localisation and the determination of constitutive relations in highly draw polymers: one dimensional eulerian formulation of the effect of stress triaxiality”. (1985) Acta metal., 33, 759.

G'Sell C., Hiver J.M., Dahoun A. and Souahi A.

“Video-controlled tensile testing of polymers and metals beyond the necking point”. (1992) J. Mater. Sci., 27, 5031.

Hagan M.T. and Mehaj M.

“Training feed-forward networks with the Marquardt Algorithm”. IEEE Transactions and Neural Networks, 5(6), 1994, pp.989-993.

Hassibi B. and Stork D.

“Second order derivatives for network pruning: Optimal brain surgeon”. In S.J. Hanson, J.D. Cawnan, and C.L. Giles, Editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 5*, Morgan Kaufmann, San Mateo, CA, 1993, pp. 164-171.

Hornik K., Stinchcombe M. and White H.

“Universal approximation of an unknown mapping and its derivatives using multiplayer feedforward networks”. *Neural Networks*, Vol. 3, 1990, pp. 551-560.

Hornik K., Stinchcombe M. and White H. and Auer P.

“Degree of approximation results for feed-forward networks approximating unknown and their derivatives”. *Neural Computation*, Vol.6, 1994, pp. 1262-1275.

J.-S. Yang and M.L. West.

“A Case Study of PID Controller tuning by Genetic Algorithm”, *Proceeding of the IASTED International Conference on Modelling Identification Control*, Innsbruck, 2001.

Jacobs R.A.

« Increased rates of convergence through learning rate adaptive ». *Neural Networks*, Vol. 1, 1988, pp. 295-307.

J. Holland

“Adaptation in Natural and Artificial Systems” University of Michigan Press, Ann Arbor, MI, 1975; MIT Press, Cambridge, MA, 1992.

Kurz W., Mercier J. P. and Zambelli G.

« Introduction à la science des matériaux ». (1987) *Presse polytechniques romandes*, Lausanne.

Le Cun Y.

« Une procédure d'apprentissage pour réseau à seuil asymétrique ». In *Cognitiva 85 : A la Frontière de l'Intelligence Artificielle des Sciences de la connaissance des Neurosciences*, Paris : CESTA, Paris, 1985, pp. 599-604.

Le Cun Y. Boser B., Denker J.S., Hendersen D., Howard R.E., Hubbard W., Jackel L.D.

« Backpropagation applied to handwritten zip code recognition ». *Neural Computation*, Vol. 1, 1989, pp. 541-551.

Lerman, I. & Ngouenet, F.

« Algorithmes génétiques séquentiels et parallèles pour une représentation affine des proximités ». (1995), *Rapport de Recherche de l'INRIA Rennes - Projet REPCO 2570*, INRIA.

Mark C et Coll.

« Matériaux industriels, Matériaux polymères ». *Dunod*, Paris, 2000.

McCulloch W. and W. Pitts.

“A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity”. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, Vol. 5, 1943, pp. 115-133.

Minsky M., et Papert S.

“Perceptrons”. MIT Press, Cambridge, MA, 1969.

Moussaoui A.K

« Contribution à la Modélisation et la Commande des Processus Industriels par Réseaux de Neurones ». Thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba, (2006).

Moussaoui A.K., Bouazza S.E. and Abbassi H.A

“Feedforward control of hot strip thickness process using neural networks”. Proceeding du Séminaire National sur l’Automatique et les Signaux, SNAS’99, U.B.M. Annaba, Algérie, 1999, pp.237-241.

Neelakantan R. and Guiver J.

“Applying neural networks”. Hydrocarbon Processing, Gulf Publishing Company, Houston, September 1998, pp. 91-96.

Parker D.B.

“Learning-logic”. Technical Report TR-47, Center for Computational Research in Economics and Management Sci., MIT, April, 1985.

Plaut D.C., Nowlan S.J. and Hinton G.E.

“Experiments on learning by back-propagation”. Technical Report CMU-CS-86-126, Carnegie Mellon University- Pittsburgh, PA 15213, 1990.

Pollock D. and Kratz R.F.

“Polymer molecular weights”. (1980) in “Methods of experimental physics”, Ch. 16, Marton L. and Marto C. Ed. Academic Press, New-York.

Ramberg et Osgood.

W.Ramberg, W.R.Osgood; NACA Technical Note N: 902 ; (1943)

Robbins H. and Monro S.

“A stochastic approximation method”. Annals of Maths Stat., Vol. 22, 1951, pp. 400-407.

Roylance M.E., Roylance D.K. and Sultan J.N.

(1976) in “Troughness and brittleness of plastics”, DEANIN R.D. and CRUGNOLA A.M. editors, Amer. Chem. Soc., Washington D.C., 192.

Rumelhart D.E. Hinton G.E., and Williams R.J.

“Learning internal representations by error propagation in parallel distributed processing”. Explorations in the Microstructures of Cognition, Vol. 1, D. Rumelhart and McClelland Eds. Cambridge: MIT Press, 1986, pp. 318-362.

Silva F.M., Almeida L.B.

“Speeding up backpropagation”. In R.Eckmiller, editor, Advanced Neural Computers, Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland, 1990, pp. 151-158.

Sjöberg J., Hjamerson H., and Ljung L.

“Neural networks in system identification”. Preprints 10th IFAC symposium on SYSID, Copenhagen, Denmark. Vol. 2, 1994 , pp. 49-71.

Souahi A.

« Effet de la triaxialité des contraintes pendant la striction diffuse en traction dans le polyéthylène à haute densité ». (1986) Thèse de Magister, Université d’Annaba.

Souahi A.

« influence de la réticulation sur le comportement mécanique des polymères amorphes au voisinage de la température de transition vitreuse (application PMMA) » (1993) Thèse de Doctorat, Université d’Annaba.

Smith M.

“Neural networks for statistical modelling”. Von Nostrand Reinhold, New York. (1993)

Tollennaere T., SuperSAB.

« Fast adaptive back propagation with good scaling properties ». Neural Networks, Vol. 3, 1990, pp. 561-573.

Treloar

L.R.G Treloar, Rep. Prog. Phy., 36, p. 755, (1973).

Ward I.M., Rabinowitz S. and Parry J.S.C.

“The effect of hydrostatic pressure on the shear yield behaviour of polymers”. (1970) J. Mater. Sci., 5, 29.

Werbos P.

“Beyond regression: new tools for prediction and analysis in the behavioural sciences”, PhD thesis, Harvard University, Cambridge, MA. , 1974.

Yannick T.

« Identification par analyse inverse du comportement mécanique des polymères solides, application aux sollicitations multiaxiales rapides » (1998). Thèse de Doctorat, l’Ecole Nationale Supérieure de Mines de Paris.

Calcul du facteur de triaxialité d'après Bridgman

I-1 Introduction

Le développement d'une instabilité plastique dans un matériau polymère a fait l'objet de plusieurs études (MILLS , 1978 ; HUTCHINSON et NEAL , 1983 ; HAUDIN et al. , 1984 ; ESTRIN et al. , 1991)) L'analyse la plus simple consiste à considérer le champ de contraintes uniaxial . Cependant, les composantes non-axiales du tenseur des contraintes cessent d'être négligeables dès que la courbure relative R/R_C du profil de l'éprouvette devient importante au niveau de l'instabilité. R et R_C sont le rayon courant et le rayon de courbure de l'éprouvette. Comme le montre la figure1, il apparaît, au centre de l'éprouvette, une striction.

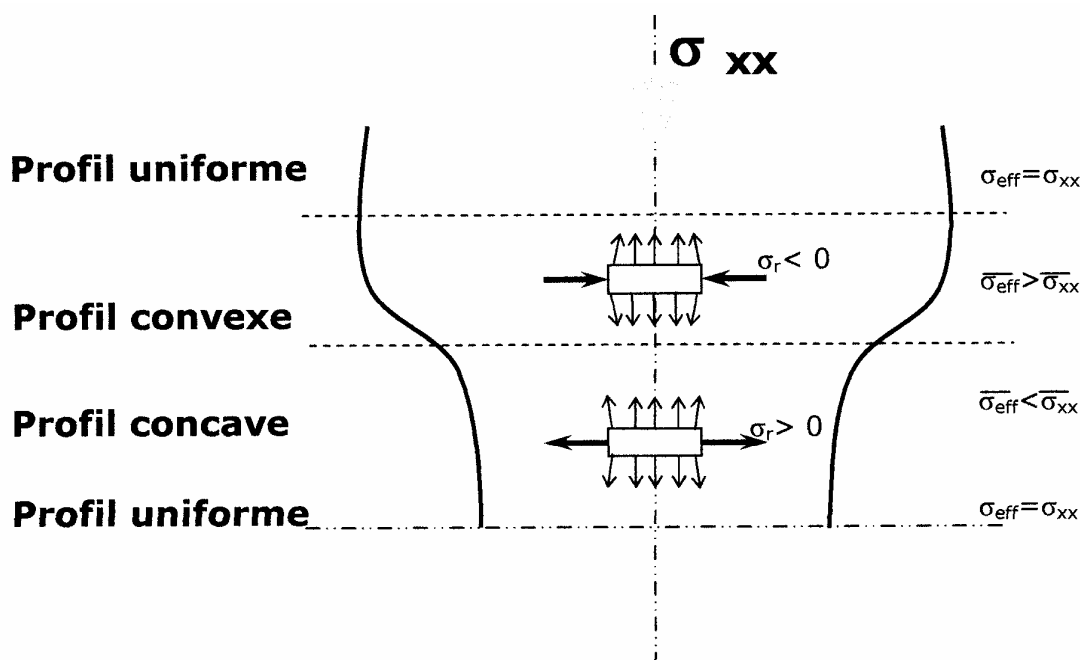


Figure 1 : Influence du profil sur la contrainte effective dans le cas de la traction

Le phénomène de triaxialité affecte donc l'écoulement plastique car la vitesse de déformation plastique est sensible au déviateur de contraintes. Pour comparer le régime plastique en contraintes triaxiales à celui dans un essai purement uniaxiale, on introduit la contrainte effective σ_{eff} qui est la contrainte de traction uniaxiale qui produirait la même vitesse de déformation effective que le champ de contraintes réel triaxial (DIETER, 1961).

La courbure est au centre de la striction et les contraintes transversales σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ sont positives. Par conséquent, σ_{eff} est inférieur à σ_{xx} , ce qui entraîne une certaine stabilisation de la striction. Au contraire, au niveau des épaules de la striction, la courbure est convexe avec

σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ négatives. La contrainte effective est donc supérieure à σ_{xx} . On a alors une accélération locale de la déformation, ce qui favorise la propagation de la striction vers les extrémités de l'éprouvette.

L'effet de triaxialité se traduit par l'apparition de contraintes transversales qui modifient la contrainte effective qui, à son tour, contrôle la déformation généralisée du matériau. Il semble donc bien que cet effet soit en mesure de rendre compte du phénomène de l'instabilité plastique et de combler les insuffisances de l'analyse uniaxiale qui n'explique que de manière incomplète ce processus.

Pour cela, on introduit un paramètre scalaire qui exprime l'effet des contraintes transversales : $F_T = \sigma_{eff} / \sigma_{xx}$, appelé Facteur de Triaxialité. En toute rigueur, ce facteur est fonction de la géométrie du profil et des propriétés du matériau. Cependant, plusieurs auteurs ont montré que l'influence de la géométrie est prépondérante quand on considère le cas d'une striction symétrique et d'un rapport R/R_c assez faible (BRIDGMAN, 1964 ; ALLY-HELAL, 1982 ; SOUABI, 1986).

Dans la littérature, nous trouvons plusieurs descriptions des contraintes transversales dans une striction axi-symétrique, mais toutes reposent sur des hypothèses simplificatrices. SIEBEL (1925) ainsi que DAVIDENKOV ET SPIRIDONOVA (1946) se sont fondés sur le critère de plasticité de TRESKA. Ils trouvent $F_T = 1 / \left(\frac{1+R}{3R_c} \right)$. L'analyse la plus couramment utilisée est celle de BRIDGMAN (1944) qui semble la plus réaliste. Dans une étude détaillée qui reste la plus citée un demi-siècle plus tard, BRIDGMAN a dérivé une autre expression du facteur de triaxialité en se fondant sur une loi d'écoulement déduite du critère de VON MISES.

I-2 Facteur de triaxialité de BRIDGMAN

Dans une analyse classique, BRIDGMAN (1944 et 1964) a considéré théoriquement le problème des effets de triaxialité dans une éprouvette axi-symétrique présentant une courbure de profil, lors d'un essai de traction. Ce calcul suppose les hypothèses suivantes:

HYPOTHESE 1 : le matériau a un comportement rigide-plastique isotrope sans écrouissage.

HYPOTHESE 2 : le comportement plastique est régi par la loi de LEVY-MISES.

HYPOTHESE 3: le matériau est insensible à la vitesse de déformation.

HYPOTHESE 4: la courbure relative du profil est modérée.

HYPOTHESE 5: la géométrie de l'éprouvette est axi-symétrique.

BRIDGMAN s'est intéressé à la distribution des contraintes locales dans le plan médian de l'éprouvette, c'est-à-dire dans la section la plus faible surface, compte tenu de ces hypothèses. L'analyse montre que, dans ce plan, les axes cylindriques x , θ et r représentent les directions principales des contraintes et que les composantes σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ sont égales et positives. Elles sont maximales près de l'axe et décroissent jusqu'à une valeur nulle au voisinage de la surface libre.

D'après la loi de LEVY-MISES, la contrainte effective (ou généralisée) s'écrit en chaque point de la section par relation:

$$\sigma_{eff} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\sigma_{xx} - \sigma_{rr})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

BRIDGMAN écrit que la contrainte effective est constante dans toute la section, d'après l'hypothèse n°1, et que la valeur moyenne de la contrainte axiale supporte la charge $F = \overline{\sigma_{xx}} \pi R^2$. Par conséquent, il trouve:

$$F_T = \frac{1}{[1 + \frac{2R_c}{R}] \log[1 + \frac{R}{2R_c}]} \quad (2)$$

On remarque que cette expression ne dépend pas des paramètres mécaniques du matériau mais uniquement du facteur géométrique R/R_c . Elle est donc applicable de manière très commode et a été fréquemment utilisés dans la littérature pour corriger la contrainte de traction des métaux après l'apparition de la striction (NEEDLEMAN, 1972 ; SEMIATIN et al, 1985 ; ...).

I-3 Calcul dans le cas général

Le calcul de BRIDGMAN n'est valide, de façon stricte que dans le centre d'une striction diffuse, et pour un matériau parfaitement plastique et isotrope. Cependant, il a donné d'excellents résultats dans de nombreux travaux précédents ou aucune restriction n'a semblé

prohibitive (ALLY HELAL, 1982 ; G'SELL et al, 1985 ; SOUABI, 1986), malgré les hypothèses très simples qui le sous-tendent. Dans ces travaux, la validité du facteur de triaxialité calculé théoriquement a été vérifiée de manière très satisfaisante dans toute la gamme des courbures choisies. A cet effet, on reprend en détail le calcul de BRIDGMAN en l'appliquant pour la striction. On avait représenté schématiquement l'allure d'une instabilité lors d'un étirage (figure II.13).

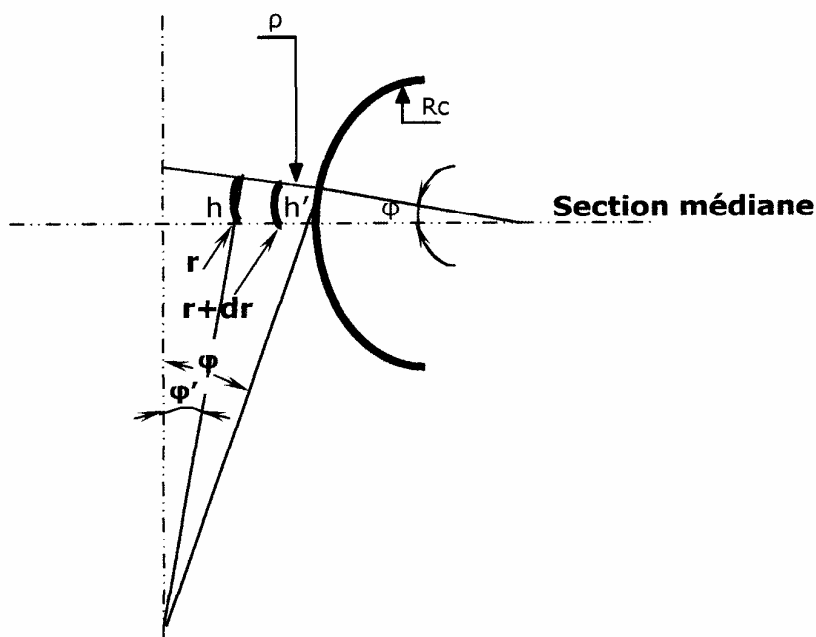


Figure 2 : diagramme pour l'analyse géométrique approximative des conditions sur les contraintes dans le voisinage d'une stabilité plastique

Comme le montre cette figure, on suppose que le profil de l'éprouvette, dans la section médiane, est un arc de cercle ainsi que les lignes de d'écoulement des contraintes principales. Pour des considérations de symétrie autour de l'axe de l'éprouvette, on avait opté pour un système de coordonnées cylindriques r, θ et x . de plus, les grandeurs sont exprimées en valeur algébriques car, certaines variables changent de signe lorsqu'on passe d'une courbure concave à une courbure convexe. Par exemple, le rayon de courbure R_c est positif pour un profil concave et négatif pour un profil convexe.

Dans cette méthode, on va faire des calculs géométriques simples. Considérons un élément infinitésimal de surface dont nous avons représenté la moitié, par souci de clarté, dans la figure 2.

Cet élément dont le centre est situé dans la section médiane de l'éprouvette, est délimité par les lignes d'écoulement des contraintes principales. Il y a d'abord deux cercles, concentriques avec le profil de l'instabilité plastique, situés à distance r et $r+dr$ de l'axe et, deux autres cercles qui sont situés de part et d'autre de la section médiane. Ces derniers sont centrés sur l'axe et sont normaux à la fois au profil et à l'axe de l'éprouvette. Ils ont pour δ et sous-tendent un angle φ par conséquent, on $\delta=R/\varphi$ si l'on considère un point distant de r par rapport à l'axe, il sous-tend un angle φ' avec l'axe de telle façon que $\varphi' = \varphi (r/R)$. On peut alors déduire les demi hauteur h et h' :

$$\begin{cases} h = R_c \varphi + \delta(\cos \varphi' - \cos \varphi) \\ h' = R_c \varphi + \delta(\cos(\varphi' + d\varphi') - \cos \varphi) \end{cases} \quad (3)$$

Où :

$d\varphi'$ est l'incrémentation infinitésimale de l'angle φ' lorsque l'on passe de r à $r+dr$.

On va maintenant faire un bilan des contraintes. Lorsqu'on écrit les équations d'équilibre des contraintes, nous remarquons qu'elle se simplifient puisque toutes les dérivées par rapport à θ s'annulent, à cause de la symétrie axiale. Pour la même raison, les composantes $\sigma_{r\theta}$ et $\sigma_{x\theta}$ sont nulles. Les trois équations d'équilibre ne subissent donc que ces deux relations :

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{rx}}{\partial x} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{rx}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{rx}}{r} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

A la surface de l'éprouvette qui est libre de contraintes, les conditions aux limites s'écrivent :

$$\begin{cases} \sigma_{rr} \cos \alpha - \sigma_{rx} \sin \alpha = 0 \\ \sigma_{rx} \cos \alpha - \sigma_{xx} \sin \alpha = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Où :

α représente l'angle entre la génératrice du profil et l'axe de l'éprouvette (figure 2 et 3) on simplifie ces deux relations en écrivant σ_{rr} et σ_{rx} en fonction de σ_{xx} , on obtient :

$$\begin{cases} \sigma_{rr} = \sigma_{xx} \operatorname{tg}^2 \alpha \\ \sigma_{rx} = \sigma_{xx} \operatorname{tg} \alpha \end{cases} \quad (6)$$

A ces deux équations, il faut ajouter la condition imposée par la force résultante F :

$$F = 2\pi \int_0^R r \sigma_{xx} dr = \text{constante} = F \quad (7)$$

De plus, dans la section médiane, on a quatre conditions. Les deux premières sont issues de considérations de symétrie lorsqu'on passe de $+x$ à $-x$. la troisième équation stipule que la surface est libre. Quant à la quatrième relation, elle déduit de la première équation d'équilibre énoncée plus haut, dans le but d'éviter des infinités sur l'axe x . ces conditions s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} = 0 \\ \sigma_{rx} = 0 \\ \sigma_{rr}(r=R) = 0 \\ \sigma_{rr}(r=R) = \sigma_{\theta\theta}(r=0) \end{array} \right. \quad \text{Quelque soit } r \quad (8)$$

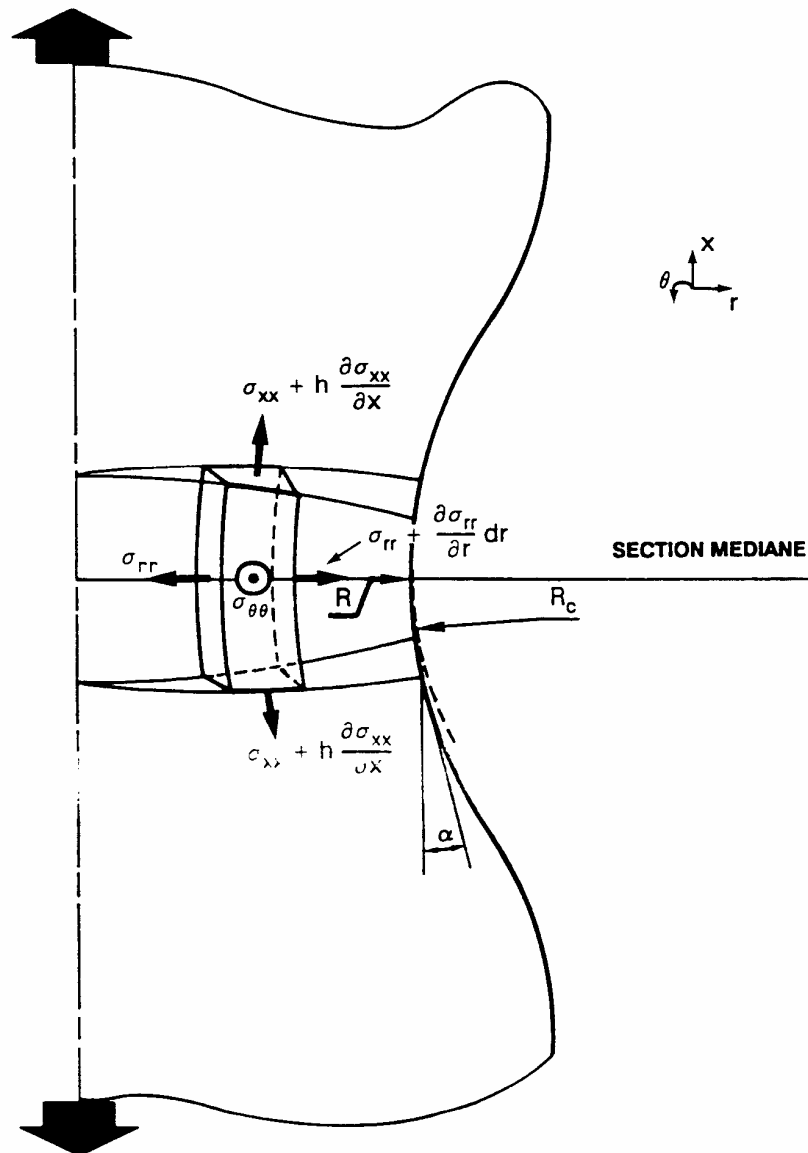


Figure 3 : Equilibre des contraintes dans le plan d'une éprouvette soumise à un étirage

La grandeur, pour laquelle $r=R$, est estimée à la surface de l'échantillon, alors qu'elle est calculée au centre de l'axe, lorsque $r=0$. Nous remarquons que la composante orthogonale σ_{rx} est nulle, dans la section médiane, au niveau du profil de l'éprouvette. On va donc éliminer σ_{rx} des équations d'équilibre, énoncées plus haut. Il ne resterait plus que les trois composantes orthogonales σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$, et σ_{xx} reliées entre elles par une seule équation :

$$\frac{\partial(r\sigma_{rr})}{\partial r} = \sigma_{\theta\theta} + \int_0^R r \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial x^2} \quad (9)$$

Cette condition ne suffit pas pour déterminer une solution. On doit donc considérer les lois de comportement plastique du matériau qui obéit au critère de VON MISES (hypothèse 2) :

$$(\sigma_{xx} - \sigma_{rr}) + (\sigma_{xx} - \sigma_{\theta\theta}) + (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 = C \quad (10)$$

Où :

C est une fonction qui dépend du matériau. S'il est idéalement plastique, C est une constante. Cette supposition donne habituellement une première approximation. Cependant, les matériaux polymères présentent en générale, un durcissement aux fortes déformations : C dépend donc des déformations présentes. Cette dépendance est très complexe et n'a pu être déterminée complètement, quelque soit le matériau considéré. On est donc obligé de faire une seconde approximation. Dans cette nouvelle approche, on reconnait la dépendance de C par rapport aux déformations mais on supposera que celles-ci varient de manière très progressive dans une section donnée ; au niveau de la striction. Par conséquent, C est supposé indépendant de r dans toute la section.

De plus, on peut aussi écrire les conditions sur les déformations qui doivent être satisfaites dans le domaine plastique. Lorsque l'on suppose une isotropie du durcissement du matériau (hypothèse 1), elles deviennent :

$$\begin{cases} e_r = \beta(\sigma_{rr} - \frac{1}{2}(\sigma_{\theta\theta} + \sigma_{xx})) \\ e_\theta = \beta(\sigma_{\theta\theta} - \frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{rr})) \\ e_x = \beta(\sigma_{xx} - \frac{1}{2}(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta})) \end{cases} \quad (11)$$

Où :

β représente une fonction qui dépend des déformations et que l'on détermine expérimentalement. Ces déformations sont sujettes à une condition supplémentaire puisque e_x est supposée constante le long de la section comme on l'a énoncé précédemment. De plus, on doit tenir compte de la condition de conservation volumique. Pour un déplacement radial p elle s'écrit sous ces conditions : $p = -e_x r/2 + c/r$. c est une constante. Pour éviter une infinité dans les axes, c est égal à 0. Il vient alors : $p = -e_x r/2$. On a finalement :

$$e_r = e_\theta = -1/2 e_x$$

Si l'on pose $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta}$, on peut satisfaire la condition sur e_r et e_θ . Encore, le critère de plasticité de VON MISES est vérifié lorsqu'on écrit : $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(r=R) + \sigma_{rr}$. Ce système de contraintes se décrit simplement. C'est une tension longitudinale, toujours uniforme, dans la section médiane avec une tension hydrostatique superposée ($\sigma_{rr} = \sigma_{xx} - \sigma_{xx}(r=R) = \sigma_{\theta\theta}$). Cette dernière diminue lorsqu'on s'approche de la surface ou elle s'annule ($\sigma_{rr}(r=R)=0$) et à son maximum dans l'axe. Pour compléter la détermination de la solution, on a une relation entre $\partial^2 \sigma_{xx} / \partial x^2$ et σ_{rr} , déjà explicitée précédemment. A cause des conditions qu'on a posé auparavant, on a deux équations qui concernent les grandeurs $\partial^2 \sigma_{xx} / \partial x^2$ et σ_{rr} . Il n'y a pas de méthode relativement simple qui permet de résoudre ces équations de manière rigoureuse. Pour cela, on se contente d'une méthode de résolution approximative qui n'est pas valide qu'au voisinage immédiat de l'instabilité plastique. Cependant, ceci est acceptable puisque on s'intéresse au comportement intrinsèque du matériau (au voisinage de la striction).
Considérons maintenant un élément de matière ayant pour épaisseur $d\theta$

Et pour surface l'élément décrit précédemment (figure3). Après avoir fait le bilan des forces, on décrit les équations d'équilibre :

$$\left(\sigma_{xx} + h \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}\right) \sin \varphi \left(r + \frac{dr}{2}\right) dr = \sigma_{rr} h r - \left(\sigma_{rr} + \frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial x} dr\right) (r+dr) h' + \sigma_{\theta\theta} h \frac{\sin \theta}{\theta} dr \quad (12)$$

Lorsqu'on ne tient compte que des termes de plus bas ordre, on trouve après simplification :

$$\sigma_{xx} \frac{r^2}{R} = \sigma_{rr} \left(\frac{3r^2}{2R} - \frac{R}{2} - Rc\right) - \left(r \frac{d\sigma_{rr}}{dr} - \sigma_{\theta\theta}\right) \left(Rc + \frac{R^2 - r^2}{2R}\right) \quad (13)$$

Comme on l'a vu précédemment, on a : $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta}$ et $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}(r=R) + \sigma_{rr}$ ou $\sigma_{xx}(r=R)$ est la contrainte longitudinale sur la surface externe pendant que les deux autres composantes $\sigma_{\theta\theta}$ et σ_{rr} sont nulles. $\sigma_{xx}(r=R)$ est la contrainte d'écoulement lors d'un essai purement uniaxial. On la remplace par σ_{eff} et on obtient alors une équation comprenant une seule composante σ_{rr} :

$$\frac{d\sigma_{rr}}{dr} \left(Rc + \frac{R^2 - r^2}{2R}\right) + \frac{r}{R} \sigma_{eff} = 0 \quad (14)$$

Afin d'intégrer cette équation, on sépare les variables en tenant compte des conditions aux limites déjà énumérées précédemment.

On a par conséquent : σ_{eff}

$$\sigma_{rr} = \sigma_{eff} \log \frac{R^2 + 2R.Rc - r^2}{2R.Rc} \quad (15)$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{eff} \left(1 + \log \frac{R^2 + 2R.Rc - r^2}{2R.Rc} \right) \quad (16)$$

On déduit alors l'expression de la force F en intégrant σ_{xx} sur toute la section :

$$F = 2\pi \int_0^R r \sigma_{xx} dr = \pi \sigma_{eff} (R^2 + 2R.Rc) \log \left(1 + \frac{R}{Rc} \right) \quad (17)$$

De cette dernière relation, on a le facteur de triaxialité F_T il est supérieur à 1 pour un profil convexe et inférieur à 1 pour un profil concave.

$$F_T = \frac{1}{\left(1 + \frac{2Rc}{R} \right) \log \left(1 + \frac{R}{2Rc} \right)}$$

I-4 Conclusion

On a donc parvenu à trouver une solution qui satisfait les équations d'équilibre, les conditions aux limites et la loi de plasticité de VON MISES. Mathématiquement, ces conditions déterminent une solution unique. On a abouti à cette solution en supposant d'une part que les contraintes sont constantes dans toute la section et, d'autre part, que les contraintes sur la surface sont nulles.

Bibliographie Annexe I

Aly-Helal N.A

« Etude et simulation du développement de la striction dans le polyéthylène à haute densité ».
(1982) Thèse de Docteur-Ingénieur, I.N.P.L. , Nancy.

Bridgman P.W.

“Studies in large plastic flow and fracture”.

(1964) Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts

Bridgman P.W.

“The Stress Distribution At The Neck Of a Tension Specimen”.

(1944) Trans. Am. Soc.Metals, 32, 553.

Davidenkov N.N and Spiridonova N.I.

“Mechanical methods of testing- Analysis of state of stress in the neck of a tension test specimen”.

(1946) Proc.Am. Soc.Test.Mat. , 46, 1147.

Dieter G.E.

“Mechanical Metallurgy”.

(1961) Mc Graw HILL, New York.

Estrin Y., Ling C.P. and McCormick P.G.

“Localisation of plastic flow: spatial vs temporal instabilities”.

(1991) Acta Metall. Mater., 39(11). 2943.

G'Sell C. , Marquez-Lucero A. , Souahi A. and Tong Y.S.

“Determination of stress triaxiality during the necking of high-density polyethylene”

(1985) dans “Instabilités plastiques”, Presses des Ponts et Chaussées, Paris, 165-174.

Haudin J..M. , Cotto D. and Monhellet F.

“Application of SWIFT criterion to the theoretical study of biaxial stretching instability in polymeric films”.

(1984) C.R. Acad. Sc. , Paris, 298 (2), 511.

Htchinson J.W. and Neal K.W.

“Neck propagation”.

(1983)J. Mech. Phys. Solids, 31, 405.

Mills. N. J.

“Theory of neck development in tensile tests on thermoplastics”

(1978) Bri. Polym. J., 10 (3), 1.

Needleman A.

“A numerical study of necking in circular cylindrical bars”

(1972) J. Mech. Phys. Solids, 20, 11.

Smatin S.L ., Ghosh A.K. and Jonas J.J.

“A simplified numerical analysis of the sheet tensile test”

(1985) Metall. Trans. A,

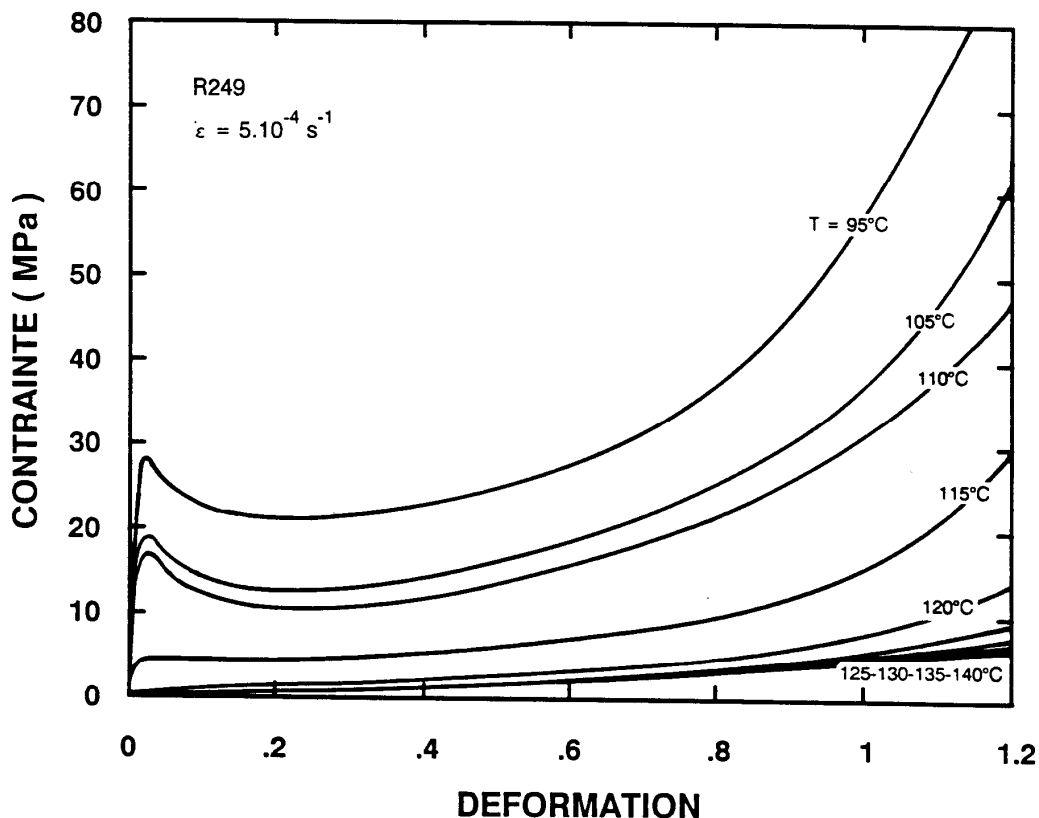
Siebel E.

(1925) Werkstoffaus, 71.

Souahi A.

« Effet de la triaxialité des contraintes pendant la striction diffuse en traction dans le polyéthylène à haute densité ». (1986) Thèse de Magister, Université D'Annaba.

Variation de la contrainte vraie en fonction de la déformation vraie (résultat expérimental pour le polymère PMMA R249, Souahi A., 1993)



Le PMMA : R249 est un matériau polymère réticulé par l'agent réticulant appelé : Triallyl Gyanurate (Burchill et al, 1987), ce matériau est produit en vue d'applications dans le thermoformage de pièces de haute technologie (verrière d'avion de chasse), avec une masse volumique $\rho = 1.18 \text{ g}\times\text{cm}^{-3}$, la température de transition vitreuse $T_g=112^\circ\text{C}$.

Bibliographie Annexe II

Burchill P.J., Mathys G. and Stacewicz R.H.

“Analysis and properties of some commercial poly(methylmethacrylate) based materials”. J. Mater. Sci., 22, 483. (1987).

Programme principal

```

clear all
clc
tic;
a=((2^32)-1);
disp('donner la taille de la population')
n=input('n =');
Emax=input('Emax=');
T=[368;373;378;383;388;393;398;403;408;413];
Ei=[1600;1600 ;1500; 1000; 400; 80; 10 ;3.98; 2.70 ;2.70];
Ke=[21.2300;19;16.0001;9.6651;1.1480;0.2665;0.2665;0.2665;0.2665];
Kp=[14.0588;12.3000;8.7100;6.8189;1.73;0.19;0.19;0.19;0.19];
T=input('T=');
Ei=input('Ei=');
Ke=input('Ke=');
Kp=input('Kp=');
Tgenererpop
Tfitnessse
generation = 0;
while 1
    minfitness=min(fitness);
    for L=1:n
        if fitness(L)==minfitness
            break
        end
    end
    if Emax > minfitness
        coefficient=Tpop(L,:)
        break
    else
        Tselection
        Tcroisement
        Tmutation
        Tfitnessse
    end
    generation=generation+1;
    generation
    min(fitness)
end
toc
generation
while 2
    if Emax > minfitness
        Tcalculer
        plot(Dexp,Ccal);hold on,grid on
        plot(Dexp,Cexp,'r');
    end
end
end

```