

Apport des modèles réduits pour l'identification expérimentale de la diffusivité thermique des métaux liquides

Contribution of reduced models to the experimental identification of thermal diffusivity of liquid metals

Jad HOUSSEIN¹, Frédéric JOLY², Mickaël COURTOIS¹, Thomas PIERRE¹, Olivier QUEMENER², Muriel CARIN¹

¹ Univ. Bretagne Sud, UMR 6027, IRDL, F-56100, Lorient, France, jad.houssein@univ-ubs.fr, thomas.pierre@univ-ubs.fr, mickael.courtois@univ-ubs.fr; muriel.carin@univ-ubs.fr

² Laboratoire de Mécanique et d'Énergétique d'Évry, Univ. Évry Paris-Saclay, 40 rue du Pelvoux, Courcouronnes, 91020 Évry, France, O.Quemener@iut.univ-evry.fr, F.Joly@iut.univ-evry.fr

RÉSUMÉ. Cet article concerne la contribution des modèles réduits dans le cadre global de l'estimation de la diffusivité thermique des métaux liquides. L'identification de cette propriété s'effectue à partir d'un dispositif expérimental adapté aux hautes températures, associé à un processus inverse faisant appel à un modèle numérique qui décrit les phénomènes thermiques instationnaires de conduction et d'advection au sein du métal en fusion. Une technique de réduction modale du modèle numérique est proposée ici, dans laquelle la température et la vitesse sont décomposée sur une base POD. Cette double réduction permet une réduction importante de l'ordre du modèle numérique utilisé dans la procédure inverse, et donc du temps de calcul d'identification par rapport aux modèles classiques éléments finis. Les premiers résultats montrent l'apport de la technique en termes de précision des résultats et de rapidité de calcul.

ABSTRACT. This article deals with the contribution of reduced models in the context of estimating the thermal diffusivity of liquid metals. The identification of this property is carried out using an experimental setup suitable for high temperatures, combined with an inverse process involving a numerical model that describes the transient thermal conduction and advection phenomena within the molten metal. A modal reduction technique of the numerical model is proposed here, in which temperature and velocity are decomposed on a POD basis. This double reduction procedure allows for a significant reduction in the order of the numerical model used in the inverse procedure, and thus in the identification computational time compared to classical finite element models. Initial results demonstrate the benefits of the technique in terms of results accuracy and computational speed.

MOTS-CLÉS. Modèle réduit, diffusivité thermique, métaux liquides, méthode flash, POD.

KEYWORDS. Reduced model, thermal diffusivity, liquid metals, flash method, POD.

1. Introduction

La diffusivité thermique des métaux est un paramètre d'intérêt en simulation numérique de procédés à hautes températures tels que le soudage ou la fabrication additive. Sa connaissance est nécessaire à l'état solide et à l'état liquide. Des premiers travaux en vue de son estimation à l'état solide ont permis de valider un dispositif et un protocole expérimentaux [HOU 23]. La solution analytique purement conductive obtenue a pu être utilisée avec pour conséquence des temps de calcul inférieurs à la minute durant le processus itératif d'estimation de la diffusivité thermique.

Le passage de l'état solide à l'état liquide rend l'identification de la diffusivité plus complexe. Cette fois-ci un modèle numérique, souvent de type éléments finis, doit décrire les phénomènes thermiques instationnaires de conduction et d'advection au sein du métal en fusion. Et dans ce cas de figure, le temps de calcul augmente de plusieurs ordres de grandeur. Par conséquent, la durée du calcul devient handicapante, voire rédhibitoire, pour un processus itératif d'estimation. Les techniques de réduction modale ont prouvé leur efficacité pour réduire drastiquement le temps de calcul de modèle d'advection-diffusion [JOL 08]. Cependant, la difficulté ici réside dans le champ de vitesse qui dépend du temps et de

l'espace. Comme pour les problèmes non-linéaires, cette dépendance spatio-temporelle entraîne une dégradation importante des performances du modèle réduit en termes de temps de calcul.

L'objectif de cet article est de réaliser un comparatif entre le modèle direct numérique qui décrit le plus fidèlement possible la thermique instationnaire de conduction et d'advection avec le même modèle une fois réduit. L'article est décomposé comme suit : La première partie présente le dispositif expérimental. La seconde partie décrit le modèle direct et la procédure de réduction développée spécifiquement pour ce problème. Enfin la troisième partie présente les premiers résultats qui montrent l'apport de la technique, en termes de précision des résultats, de polyvalence du modèle réduit, et de rapidité de calcul.

2. Dispositif expérimentale et expériences

La Figure 1 présente le dispositif expérimental. L'échantillon testé ((a) sur la Figure 1) est une plaque de fer de section $(20 \times 20) \text{ mm}^2$ et d'environ $200 \mu\text{m}$ d'épaisseur placé dans une enceinte cubique en acier inoxydable (b). Un jeu de quatre miroirs et un prisme (c) sont disposés de sorte qu'une caméra haute-vitesse (d) voit simultanément les deux faces de la plaque (e). Un filtre (f) disposé devant la caméra restreint le flux radiatif à la bande spectrale $(880 \pm 35) \text{ nm}$.

Le protocole expérimental consiste faire le vide (g) dans l'enceinte dans un premier temps puis d'ajouter de l'argon (h). Un laser (i) (*IPG Photonics YLR 300/3000 QCW* $\lambda = 1\,070 \text{ nm}$) chauffe pendant environ 30 s à 70 W afin d'avoir une température de plaque la plus homogène possible, puis un pulse est envoyé avec le même laser de 270 W durant 10 ms. Là où la température de fusion de la plaque est dépassée, sa tension de surface permet au métal liquide de ne pas s'effondrer. Cela rend donc possible les mesures à l'état solide, mais surtout à l'état liquide.

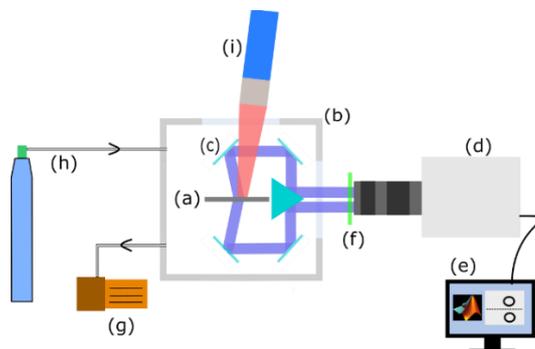


Figure 1. Schéma du dispositif expérimental.

La caméra haute-vitesse enregistre la scène à une fréquence de 10 kHz, sur une image de $640 \times 1\,008$ pixels où chaque pixel représente une surface d'environ $657 \mu\text{m}^2$. Par ailleurs, les niveaux de gris S délivrés par la caméra sont liés par une loi linéaire avec la luminance $I^0(T)$, qui elle-même dépend de la température par la loi de Planck [1]. Les paramètres k et d sont étalonnés à l'aide de mesures de plateaux de solidification sur des métaux purs [MUL 12]. L'incertitude principale repose sur la connaissance de l'émissivité ε'_λ de la surface visée.

$$S = k\varepsilon'_\lambda I^0(T) + d \quad [1]$$

La Figure 2 présente plusieurs séquences où l'on voit le déplacement du bain de fusion au cours du temps. Seule la zone chauffée de l'échantillon (zone cylindrique de 2,5 mm de rayon) fait l'objet de la mesure.

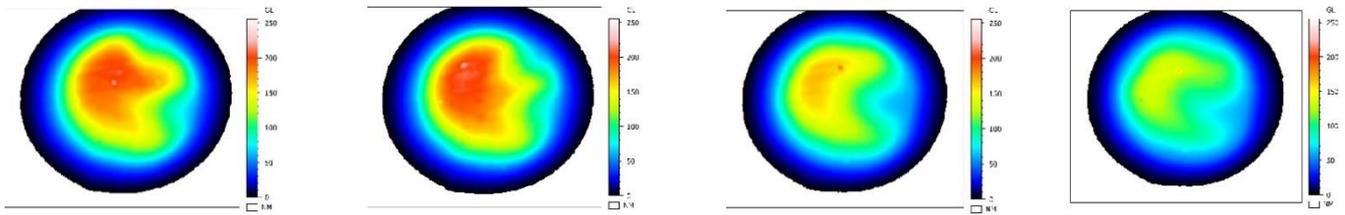


Figure 2. Quatre séquences durant le chauffage (images 1 et 2) et le refroidissement (images 3 et 4).

3. Réduction du modèle

3.1. Problème physique

Soit un domaine Ω borné par une frontière $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ (Figure 3). La température est mesurée sur les faces supérieure et latérale et Γ_3 . Sur la face inférieure Γ_2 on considère un coefficient d'échange h . L'origine du repère est placée au centre de la face inférieure Γ_2 .

L'équation de la chaleur s'écrit :

$$\rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{U}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\nabla} T \right) = \underline{\nabla}(\kappa \underline{\nabla} T) + \varpi \text{ sur } \Omega \quad [2]$$

où ω est le terme source (nul dans notre cas). Les conditions aux limites sont :

$$\kappa \underline{\nabla} T \cdot \underline{n} = h(T_{ext} - T) \text{ sur } \Gamma_2 \quad [3]$$

$$T = T_f(\underline{x}, t) \text{ sur } \Gamma_1 \text{ et } \Gamma_3 \quad [4]$$

Dans l'équation [2], le coefficient d'échange est linéarisé. En effet, le protocole expérimental impose un échauffement de l'échantillon inférieur à 50 K. En général, il n'existe pas de solution exacte pour cette équation. Il faut alors passer par une approximation numérique.

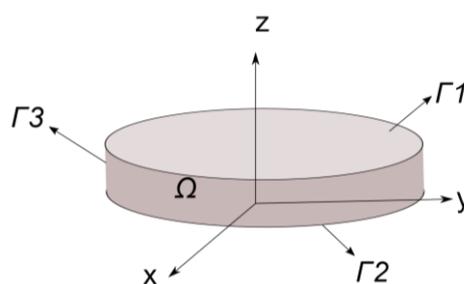


Figure 3. Géométrie.

3.2. Modèle direct original

Le modèle éléments finis est obtenu à partir de la formulation variationnelle des équations [2-4]. L'équation [2] est multipliée par une fonction test g ayant les mêmes conditions aux limites, et est intégrée sur le domaine. Ici, par souci de concision et pour ne perdre le lecteur dans des développements mathématiques fastidieux, nous donnons la méthode pour $T_f(\underline{x}, t) = 0$, c'est-à-dire pour une condition aux limites homogène en Γ_1 et Γ_3 (on aura donc $g \in H_0^1(\Omega)$).

$$\int_{\Omega} \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{U} \cdot \underline{\nabla} T \right) g = \int_{\Omega} \underline{\nabla} (\kappa \underline{\nabla} T) g + \int_{\Omega} \varpi g \quad [5]$$

Le théorème de Green-Ostrogradsky permet de faire apparaître la condition aux limites sur Γ_2 et diminue la contrainte sur T qui n'a plus qu'à être dérivable une fois :

$$\int_{\Omega} \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{U} \cdot \underline{\nabla} T \right) g = - \left(\int_{\Gamma_2} h T g + \int_{\Omega} \kappa \underline{\nabla} T \cdot \underline{\nabla} g \right) + \int_{\Omega} \varpi g + \int_{\Gamma_2} h T_{ex} g \quad [6]$$

En définissant les matrices suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \int_{\Omega} \rho c g g & \mathbf{U}(t) &= \int_{\Omega} \rho c \underline{U}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\nabla} g g \\ \mathbf{K} &= \int_{\Omega} \kappa \underline{\nabla} g \cdot \underline{\nabla} g & \mathbf{H} &= \int_{\Gamma_2} h g g \end{aligned} \quad [7]$$

Ainsi que le vecteur de sollicitations :

$$B = \int_{\Gamma_2} h T_{ex} g + \int_{\Omega} \varpi g \quad [8]$$

On obtient alors le système matriciel suivant :

$$\mathbf{C} \dot{T} + \mathbf{U}(t)T = -(\mathbf{K} + \mathbf{H})T + B \quad [9]$$

Notons que la matrice $\mathbf{U}(t)$ est non-symétrique.

3.3. Modèle réduit

3.3.1. Réduction de la température

L'idée des méthodes de réduction modale est de décomposer la température sous la forme :

$$T(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^{\tilde{N}} V_i(\underline{x}) \times x_i(t) \quad [10]$$

Les fonctions $V_i(\underline{x})$ sont pré-calculées et sont appelées les modes. Les coefficients $x_i(t)$ sont les inconnues du problème et sont appelés les états d'excitation. Pour obtenir l'équation d'état permettant de déterminer les coefficients $x_i(t)$, on reprend la formulation variationnelle dans laquelle on remplace les fonctions test g par les modes V et T par sa formulation modale :

$$\begin{aligned} \sum_i \frac{\partial x_i}{\partial t} \int_{\Omega_0} \rho c V_i V_j + \sum_i x_i \int_{\Omega_0} \rho c \underline{U} \cdot \underline{\nabla} V_i V_j \\ = - \sum_i x_i \int_{\Omega_0} \kappa \underline{\nabla} V_i \cdot \underline{\nabla} V_j - \sum_i x_i \int_{\Gamma_2} h V_i V_j + \int_{\Omega_0} \varpi V_j + \int_{\Gamma_2} h T_{ext} V_j \end{aligned} \quad [11]$$

On peut écrire cette équation sous forme matricielle

$$\mathbf{C}_r \dot{X} + \mathbf{U}_r(t)X = -[\mathbf{K}_r + \mathbf{H}_r]X + B_r \quad [12]$$

où les matrices suivantes ont été définies :

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_r &= \int_{\Omega} \rho c V_i V_j = \mathbf{V}^t \mathbf{C} \mathbf{V} & \mathbf{U}_r &= \int_{\Omega} \rho c \underline{U}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\nabla} V_i V_j = \mathbf{V}^t \mathbf{U}(t) \mathbf{V} \\
\mathbf{K}_r &= \int_{\Omega} \kappa \underline{\nabla} V_i \cdot \underline{\nabla} V_j = \mathbf{V}^t \mathbf{K} \mathbf{V} & \mathbf{K}_r &= \int_{\Omega} \kappa \underline{\nabla} V_i \cdot \underline{\nabla} V_j = \mathbf{V}^t \mathbf{K} \mathbf{V}
\end{aligned} \tag{13}$$

ainsi que le vecteur de sollicitations :

$$\mathbf{B}_r = \int_{\Gamma_2} h T_{ex} V_j + \int_{\Omega} \varpi V_j = \mathbf{V}^t \mathbf{B} \tag{14}$$

Le terme de transport \mathbf{U}_r augmente considérablement le temps de calcul du modèle réduit : à chaque itération, il faut non seulement recalculer la matrice $\mathbf{U}(t)$, mais en plus faire le produit matriciel $\mathbf{V}^t[\mathbf{U}(t)]\mathbf{V}$.

3.3.2. Réduction de la vitesse

Examinons le terme « problématique » \mathbf{U}_r . Il est dérivé de la formulation variationnelle :

$$\mathbf{U}_r = \int_{\Omega} \rho c \underline{U}(\underline{x}, t) \cdot \underline{\nabla} V_i V_j \tag{15}$$

L'idée est d'exprimer aussi la vitesse $\underline{U}(\underline{x}, t)$ sous forme modale :

$$\underline{U}(\underline{x}, t) = \sum_{k=1}^{\tilde{M}} \underline{W}_k(\underline{x}) \times y_k(t) \tag{16}$$

En remplaçant la formulation modale de la vitesse (Eq. [16]) dans l'équation [15] :

$$\mathbf{U}_r = \sum_{k=1}^{\tilde{M}} y_k(t) \int_{\Omega} \rho c \underline{W}_k(\underline{x}) \cdot \underline{\nabla} V_i V_j \tag{17}$$

On définit alors les matrices $\mathbf{U}^k = \int_{\Omega} \rho c \underline{W}_k(\underline{x}) \cdot \underline{\nabla} V_i V_j$. Le terme de transport peut alors s'exprimer selon une somme pondérée de matrices calculée en avance :

$$\mathbf{U}_r = \sum_k y_k(t) \mathbf{U}^k \tag{18}$$

Le système à résoudre devient alors :

$$\mathbf{C}_r \dot{X}_i = - \left[\mathbf{K}_r + \mathbf{H}_r + \sum_{k=1}^{\tilde{M}} y_k(t) \mathbf{U}^k \right] X_i + B_r \tag{19}$$

D'un point de vue dimensionnel, $\mathbf{C}_r, \mathbf{K}_r, \mathbf{H}_r$ et \mathbf{U}_r^k sont de dimensions $[\tilde{N} \times \tilde{N}]$ avec \tilde{N} le nombre de modes de température retenu. Bien sûr, la formulation modale de la vitesse n'a de sens que si un très faible nombre de modes est nécessaire pour reproduire correctement le champ de vitesse.

3.3.3. Quels modes choisir ?

Plusieurs approches existent pour obtenir une base réduite, qui peuvent être plus pertinentes selon le type de problème posé (invariance des conditions aux limites, non-linéarité, etc.).

Nous souhaitons extraire du champ de vitesse expérimental les modes spatiaux les plus significatifs, qui représentent les principaux motifs des données. La P.O.D fournit une base 'optimale' du point de

vue énergétique pour représenter l'écoulement. Un nombre de modes relativement peu élevé permet donc de capturer les aspects-clés du signal [POD 20]. De la même manière, comme la condition aux limites en température est issue de l'expérience, nous choisissons d'utiliser les fonctions de la P.O.D pour construire une approximation de type Galerkin de l'équation de la chaleur. Cette méthode suppose l'existence d'un champ de référence. Pour la température, il s'agit d'une simulation éléments finis effectuée avec comme entrée une valeur supposée de la conductivité (ici nous prendrons $\kappa_0 = 47 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), et la température supérieure $T_f(\underline{x}, t)$ est issue de l'expérience.

4. Résultats et discussion

4.1. Simulations éléments finis : influence de la conductivité

La simulation éléments finis (EF) est caractérisée par un maillage comportant 8 721 degrés de libertés formant 14 752 éléments de type prisme droit dont les dimensions ne dépassent pas $30 \mu\text{m}$ verticalement et $160 \mu\text{m}$ horizontalement. Le temps de calcul nécessaire à une simulation EF est de l'ordre de 90 s dans l'environnement de calcul SAMBA développé au LMEE.

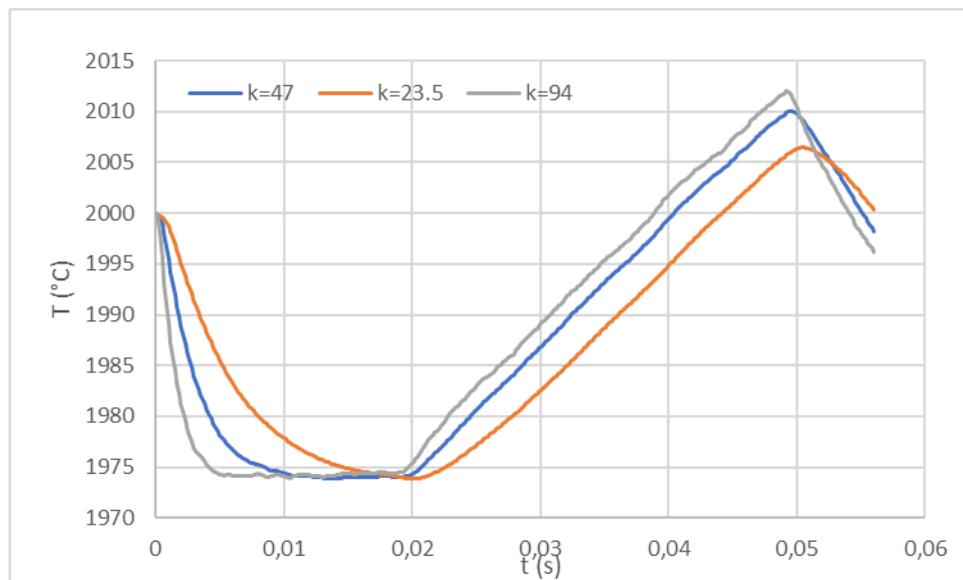


Figure 4. Evolution de la température au centre de la face inférieure pour trois conductivités différentes $\frac{\kappa_0}{2}$, κ_0 et $2\kappa_0$.

Nous commençons par étudier la sensibilité de la conductivité (et non la diffusivité pour le moment) sur la température. La Figure 4 représente l'évolution de la température au centre de la face inférieure obtenue avec une simulation éléments finis pour trois conductivités différentes, $\kappa = \kappa_0 = 47 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, $\kappa_0/2$ puis $2\kappa_0$. On remarque que la conductivité joue plusieurs rôles :

- temps de relaxation (au début de la simulation) ;
- temps de réponse à la sollicitation en température et à l'arrêt de cette sollicitation ;
- température maximale atteinte en ce point.

4.2. Modèle réduit

Une fois le modèle éléments finis calculé, l'obtention du modèle réduit, c'est-à-dire le calcul des modes de vitesse et de température ainsi que le calcul des matrices réduites est très rapide (entre 1 et 2 secondes selon le nombre de modes retenus). Ainsi, le temps d'obtention du modèle réduit est celui d'un seul calcul éléments finis. Notons que pour chaque nouveau jeu de sollicitations ($U(\underline{x}, t)$ et $T_f(\underline{x}, t)$), ce calcul devra être réeffectué. Nous représentons dans le Tableau 1 l'influence du nombre de modes de

température retenus sur la précision du modèle et son temps de calcul lorsque le nombre de modes de vitesse est égal à 5. Les températures de références pour le calcul des écarts sont celles de la simulation éléments finis utilisée pour le calcul des modes de température. Nous définissons :

$$\varepsilon_{max} = \max_t [T_{EF}(\underline{x} = 0, t) - T_{MR}(\underline{x} = 0, t)] \quad [20]$$

$$\varepsilon_{quad}^2 = \frac{1}{\tau} \int_{t=0}^{\tau} [T_{EF}(\underline{x} = 0, t) - T_{MR}(\underline{x} = 0, t)]^2 dt \quad [21]$$

	5	10	20	30	50	100
ε_{max}	5,57	0,77	0,60	0,45	0,49	0,43
ε_{quad}	2,29	0,29	0,21	0,20	0,18	0,17
Temps CPU (s)	0,13	0,15	0,21	0,30	0,67	1,54

Tableau 1. Performances du modèle réduit en fonction du nombre de modes de température.

Les performances du modèle réduit sont excellentes, puisque même avec 5 modes en température, l'écart maximum sur l'observable choisi (la température au centre de la face inférieure) est inférieur à l'incertitude sur la mesure de température estimée à $\Delta T = 10$ K. Le temps de calcul a quant à lui été diminué d'un facteur de 670. Notons toutefois que la comparaison des temps de calcul est faussée : le calcul éléments finis est effectué à partir d'un programme C++ avec un schéma à pas de temps variable, alors que le modèle réduit est effectué à partir de MATLAB avec un schéma temporel à pas de temps fixe. Plus l'ordre du modèle réduit augmente, et plus l'écart avec la référence se réduit. Nous avons choisi 30 modes de température et 5 modes de vitesse.

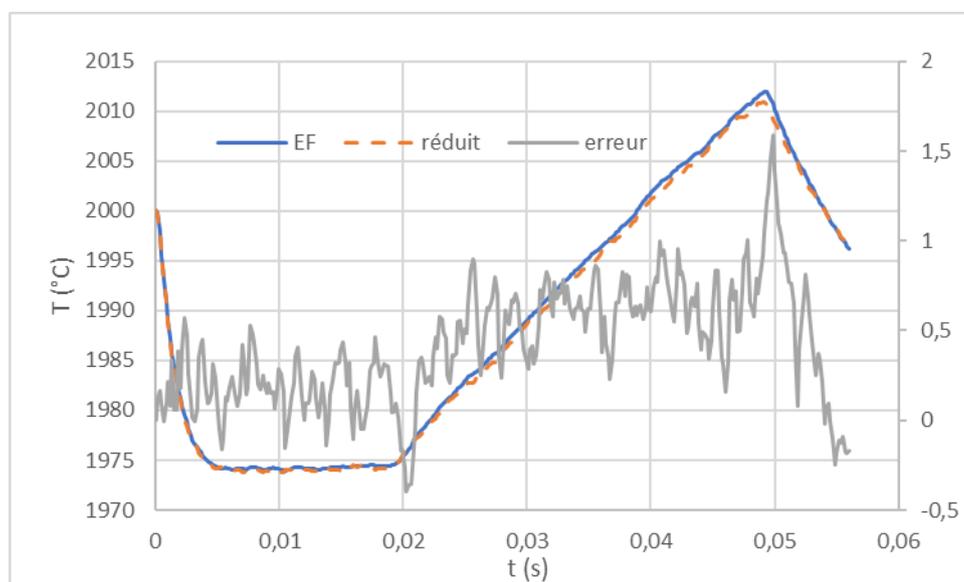


Figure 5. Evolution de la température au centre face inférieure pour pour $\kappa = 2 \kappa_0$. Comparaison entre le modèle réduit et le modèle EF.

L'objectif de la réduction de modèle dans cette étude est l'identification de la conductivité d'un métal liquide à partir de la mesure de température au centre de la face inférieure. La difficulté est donc dans la capacité d'un même modèle réduit à simuler des champs de température pour différentes valeurs de la conductivité. Nous nous servons alors du modèle réduit pour réaliser deux autres simulations avec $\kappa =$

$\kappa_0/2$, et $\kappa = 2 \kappa_0$. Les résultats sont présentés dans le Tableau 2. Les écarts croissent lorsque l'on s'éloigne de la simulation de référence, mais restent toutefois inférieurs à l'incertitude expérimentale.

Cet excellent accord est illustré par la Figure 5, dans laquelle on compare l'évolution temporelle de la température au centre de la face inférieure obtenue avec les deux modèles pour $\kappa = 2\kappa_0$. Le modèle réduit reproduit parfaitement la dynamique temporelle. Ainsi, le modèle réduit est capable de se substituer au modèle EF pour une large gamme de conductivité (du simple au quadruple dans l'exemple présenté ici) avec un gain en temps de calcul de l'ordre de 300. Le modèle réduit est donc un candidat crédible pour être utilisé dans un processus d'identification de la conductivité.

	ϵ_{max}	ϵ_{quad}
$\frac{\kappa_0}{2}$	2,16	1,25
$2 \kappa_0$	1,60	0,53

Tableau 2. Écarts entre le modèle réduit et le modèle éléments finis pour différentes conductivités

5. Conclusion

Le travail présenté dans cet article a pour objectif de construire un modèle réduit performant pour simuler des phénomènes conductifs et advectifs d'un métal à l'état liquide. La difficulté de la réduction provient du champ de vitesse qui dépend à la fois du temps et de l'espace. Cette difficulté a été levée en effectuant une double réduction modale, en température et en vitesse. La technique de réduction propose de décomposer les champs de température et de vitesse sur une base POD.

Ce modèle réduit doit servir pour l'estimation de la diffusivité du métal à l'état liquide par techniques inverses. Il est donc nécessaire que le modèle réduit soit capable de simuler correctement le champ de température pour plusieurs valeurs de la conductivité, le tout dans un temps de calcul acceptable.

Les analyses ont montré que le gain de temps est avéré, quel que soit le nombre de modes testé. En effet, le rapport entre les temps de calcul du modèle sans et avec réduction est de plusieurs centaines, le tout en s'assurant que la différence entre les températures simulées pour les deux modèles était inférieure à l'incertitude expérimentale sur la température, et ce dans une vaste gamme de conductivité.

Les perspectives sont les suivantes. À court terme l'utilisation du modèle réduit doit servir à l'estimation de la diffusivité du métal à l'état liquide. À moyen et long terme il est envisagé de modifier le modèle afin de réaliser l'identification simultanée de la conductivité et de la capacité thermique du métal liquide.

Bibliographie

- [HOU 23] HOUSSEIN J., PIERRE T., COURTOIS M., LE GOIC G., CARIN M., «A novel apparatus dedicated to the thermal diffusivity estimation of metals at high temperature», *International Journal of Thermal Science*, 191, 2023, 108359.
- [JOL 08] JOLY F., QUEMENER F., NEVEU A., «Modal Reduction of an Advection-Diffusion Model Using a Branch Basis», *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 53 (5), 2008, p. 466-485
- [MUL 12] MULLER M., FABBRO R., EL-RABII H., HIRANO K., «Temperature measurement of laser heated metals in highly oxidizing environment using 2D single-band and spectral pyrometry», *Journal of Laser Applications*, vol. 24, n° 2, 2012, p. 022006.
- [POD 20] PODVIN B., PELLERIN S., FRAIGNEAU Y., EVRARD A., CADOT O., «Proper orthogonal decomposition analysis and modelling of the wake deviation behind a squareback Ahmed body», *Phys. Rev. Fluids* 5, 2020, 064612.