

# **Méthode inverse utilisant la régularisation de Tikhonov : Application à la trempe des matériaux à transformation de phases (Aciers)**

A. Azim

Laboratoire de Caractérisation et de contrôle des Matériaux (L.C.C.M)  
Université Chouaib Doukkali, Faculté des sciences, Département de Physique, BP20, El Jadida, Maroc.

P. Archambault

Laboratoire des Sciences et Génie des Matériaux Métalliques (LSG2M)  
Ecole Des Mines Nancy France

M. Maniana

Laboratoire de Caractérisation et de contrôle des Matériaux (L.C.C.M)  
Université Chouaib Doukkali, Faculté des sciences, Département de Physique, BP20, El Jadida, Maroc.

H. Rhanim

Laboratoire de Caractérisation et de contrôle des Matériaux (L.C.C.M)  
Université Chouaib Doukkali, Faculté des sciences, Département de Physique, BP20, El Jadida, Maroc.

## **Résumé**

Une méthode inverse utilisant la technique de régularisation de Tikhonov est développée pour calculer la température et le flux de chaleur en surface d'un solide subissant un traitement thermique. Connaissant la température d'un point à l'intérieure du solide, le flux à la surface est estimé par un algorithme inverse qui tient compte de la non-linéarité du problème et surtout du terme source relatif aux transformations des phases générées lors du traitement thermique. Une validation numérique est effectuée sur le cas de l'acier XC42.

## **Abstract**

An inverse method using Tikhonov regularization technique is developed to calculate the surface heat flux and temperature of a body during heat treatment. Knowing temperature of an inner point of the solid and taking account of the phase transformation non-linearity, the surface heat flux evolution is estimated by an inverse algorithm. The numerical validation of this method is performed in XC42 steel case.

**Mots Clés** : méthode inverse, régularisation, transfert thermique, Trempe, transformations de phase.

## **1. INTRODUCTION**

Les applications industrielles de mise en forme des matériaux nécessitent dans la plupart des cas la prédiction des phénomènes thermiques, mécaniques et métallurgiques au sein des matériaux traités. La simulation numérique de ces phénomènes est devenue à l'heure actuelle une étape incontournable lors du processus de fabrication de tout produit. Ces phénomènes sont souvent modélisés par des équations

différentielles qui font apparaître des paramètres inconnus et inaccessibles aux mesures directes : densité du flux de chaleur sur une frontière, coefficient d'échange avec le milieu extérieur, résistance thermique de contact etc.... L'estimation de ces paramètres fait appel donc à la résolution inverse de l'équation de la chaleur. Face à la montée en puissance des capacités de calcul et à la nouvelle technologie offerte par l'informatique, le besoin de méthodes globales basées sur des démarches rigoureuses s'est fait sentir. La méthode inverse de spécification de fonction utilisant la régularisation de Tikhonov [1] constitue sans doute une des approches les plus globales et les plus adaptées à ce genre de problèmes.

Dans ce présent travail nous décrivons une méthode inverse utilisant la régularisation dans la résolution des problèmes inverses de conduction de la chaleur (avec la prise en compte de l'évolution du terme source lié aux transformations de phase). Cette méthode sera ensuite validée numériquement sur le cas de l'acier XC42.

## 2. POSITION DU PROBLEME

Ici, on s'intéresse plus particulièrement à la détermination de l'évolution de la température et du flux de chaleur à l'interface d'échange entre le matériaux traité et le système extérieur en se basant uniquement sur la mesure de la température au sein du solide (Cylindre de rayon R) voir figure 1.

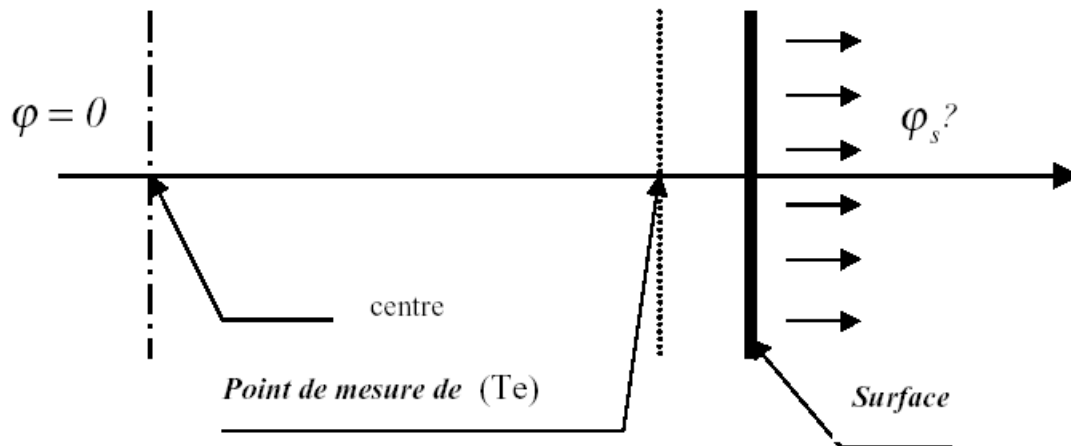


Figure 1: Schéma du problème inverse

L'équation qui gouverne ce phénomène de transfert est donnée par :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \dot{q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

Conditions aux limites :

$$\text{A } t = 0 \quad T(r, t) = T_0$$

$$\text{A } t > 0 \quad \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{r=0} = 0$$

$$T(r_e, t) = Y(t) \quad (\text{Température mesurée})$$

$$-\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{r=R} = \varphi(T_s) \quad (\text{Flux à déterminer})$$

ou  $r$  est la coordonnée spatiale le long du rayon,  $T_0$  est la température initiale,  $\lambda$  : est la conductivité thermique,  $\rho$  est la masse volumique,  $C_p$  est la chaleur spécifique,  $\dot{q}$  est l'énergie due à la transformation de phase et  $\varphi_s$  est la densité du flux de chaleur à la surface du solide.

### 3. METHODE INVERSE DE SPECIFICATION DE FONCTION AVEC REGULARISATION

Ici, nous supposons que la courbe du flux de chaleur à estimer est une succession de segments de longueurs  $\Delta t$ . Ainsi, nous notons par les vecteurs :  $\varphi(\varphi^1, \varphi^2, \dots, \varphi^j, \dots, \varphi^n)$  et  $Y(Y_e^1, Y_e^2, \dots, Y_e^j, \dots, Y_e^n)$  le flux de chaleur et la température mesurée au point  $r = r_e$  à chaque instant du traitement thermique.

On suppose que, jusqu'à un ordre  $n$ , les composantes du flux  $(\varphi^1, \varphi^2, \dots, \varphi^n)$  sont connues et on cherche à déterminer  $\varphi^{n+1}$  à l'instant  $t^{n+1}$ .

La méthode la plus intuitive correspond à l'algorithme qui consiste à chercher l'évolution du flux de chaleur à la surface, conduisant à une concordance parfaite entre les températures calculées ( $T$ ) et celles mesurées ( $Y$ ) au point  $r = r_e$ . C'est à dire celui qui minimise à chaque instant la fonctionnelle suivante:

$$F(\Phi^{n+1}) = (Y_e^{n+1} - T_e^{n+1})^2$$

Cet algorithme de Stolz [2] serait exact si les solutions exactes du problème étaient connues. Cependant, comme les températures sont calculées à l'aide d'une méthode discrète, les erreurs numériques successives ajoutées aux incertitudes de mesure entraînent une divergence rapide.

Ce problème de stabilité de l'algorithme de Stolz a été résolu par la méthode de spécification [3] qui est fondée sur la même idée de base mais introduit le concept des températures futures. Ainsi, la fonctionnelle à minimiser devient:

$$F(\varphi^{n+1}) = \sum_{j=1}^{j=ntf} (Y_e^{n+j} - T_e^{n+j})^2$$

Elle représente l'écart quadratique entre la température mesurée et celle calculée par la méthode directe en prenant comme flux à la surface le flux  $\varphi^{n+j}$ . On voit que la minimisation de la fonctionnelle  $F$  à l'instant  $t^{n+1}$  utilise des « températures futures » de  $(n+1)$  à  $(n+ntf)$ . « ntf » est le nombre de pas du temps postérieur à l'instant considéré  $t^n$ , ou le nombre de températures futures.  $Y_e^{n+j}$  est la température mesurée au point ( $r = r_e$ ) à l'instant  $(n+j)$ ,  $T_e^{n+j}$  est la température calculée en ce point et au même instant.

La régularisation nous amène à introduire un terme correctif ( $R$ ) tel que:

$$F(\varphi(t)) = \sum_{j=1}^{j=ntf} (Y_e^{n+j} - T_e^{n+j})^2 + R$$

avec:

$$R = \alpha \left\{ w_0 \int_{t_0}^{t_n} \varphi(t)^2 dt + w_1 \int_{t_0}^{t_n} \left( \frac{d\varphi(t)}{dt} \right)^2 dt + w_2 \int_{t_0}^{t_n} \left( \frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} \right)^2 dt + \dots \right\}$$

où  $Y_e^{n+j}, T_e^{n+j}$  sont respectivement la température mesurée et calculée,  $\varphi(t)$  est l'évolution du flux de chaleur désirée et  $\alpha, w_0, w_1, w_2 \dots$  (constantes positives) représentent les paramètres de régularisation zéro, premier et second ordre... Ils sont introduits dans le but de réduire la sensibilité du flux calculé vis à vis aux erreurs de mesure de la température.

La détermination de la solution du problème revient ici à minimiser la fonctionnelle suivante :

$$F(\varphi^{n+1}, \dots, \varphi^{n+j}, \dots, \varphi^{n+ntf}) = \sum_{j=1}^{j=ntf} (Y_e^{n+j} - T_e^{n+j})^2 + R$$

avec:

$$R = \alpha \left[ w_0 \sum_{j=1}^{j=ntf} (\varphi^{n+j})^2 + w_1 \sum_{j=2}^{j=ntf} (\varphi^{n+j} - \varphi^{n+j-1})^2 + w_2 \sum_{j=3}^{j=ntf} (\varphi^{n+j-2} - 2\varphi^{n+j-1} + \varphi^{n+j})^2 \right]$$

Le développement en série de Taylor du terme  $T_e^{n+j}(\varphi^{n+j})$  autour  $\varphi^n$  s'écrit :

$$T_e^{n+j} = T_e^{n+j}(\varphi^n) + S_{ij}(\varphi^{n+1} - \varphi^n) + \dots + S_{kj}(\varphi^{n+k} - \varphi^n) + \dots + S_{jj}(\varphi^{n+j} - \varphi^n)$$

où

$$T_e^{n+j} = T_e^{n+j}(\varphi^n) + \sum_{k=1}^{k=j} S_{kj}(\varphi^{n+k} - \varphi^n)$$

Avec :  $S_{ij} = \frac{\partial T_e^{n+j}(\varphi^{n+j})}{\partial \varphi^{n+i}}$  représentent les coefficients de sensibilité. Ils sont déterminés par :

$$S_{kj} = \begin{cases} = 0 \dots \dots \dots j \in [1, k] \\ = \frac{T_e^{n+j}(\varphi^n + \delta\varphi) - T_e^{n+j}(\varphi^n)}{\delta\varphi} \dots \dots \dots j \in [k, ntf] \end{cases}$$

avec :

$$\delta\varphi = \begin{cases} = \zeta\varphi^n \dots \dots \dots t \in [t_{n+k-1}, t_{n+k}] \\ = 0 \dots \dots \dots t \notin [t_{n+k-1}, t_{n+k}] \end{cases} \quad \zeta \text{ est un nombre petit.}$$

En minimisant la fonctionnelle F par rapport à  $\varphi^{n+1}, \dots, \varphi^{n+ntf}$ , on obtient le système suivant :

$$\left\{ {}^t[S][S] + \alpha(w_0 {}^t[H_0][H_0] + w_1 {}^t[H_1][H_1] + w_2 {}^t[H_2][H_2]) \right\} . [\varphi] = {}^t[S] \left\{ [Y_e] - [T_e^*] + [S][\varphi^*] \right\}$$

$$[S] = \begin{bmatrix} S_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ S_{12} & S_{22} & 0 & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ S_{1ntf} & \dots & \dots & \dots & S_{ntf,ntf} \end{bmatrix} \quad [H_1] = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

$$[H_{2n}] = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & & \dots & & & 0 \\ 0 & & & \dots & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$[\varphi] = \begin{bmatrix} \varphi^{n+1} \\ \varphi^{n+2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi^{n+ntf} \end{bmatrix} \quad [T^*] = \begin{bmatrix} T^{n+1}(\varphi^n) \\ T^{n+2}(\varphi^n) \\ \vdots \\ \vdots \\ T^{n+ntf}(\varphi^n) \end{bmatrix} \quad [Y_e] = \begin{bmatrix} Y_e^{n+1} \\ Y_e^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ Y_e^{n+ntf} \end{bmatrix} \quad [\varphi^*] = \begin{bmatrix} \varphi^n \\ \varphi^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \varphi^n \end{bmatrix}$$

Ici  $[H_{2n}]$  est telle que:  $[H_2] = {}^t [H_{2n}]^* [H_{2n}]$

La résolution de ce système permet de calculer  $\varphi^{n+1}$ ,  $\varphi^{n+2}$  ...  $\varphi^{n+ntf}$ . Seule la valeur est retenue. On reprend la même procédure pour estimer de proche en proche  $\varphi^{n+1}$ ,  $\varphi^{n+3}$  jusqu'à  $\varphi^N$ .

#### 4. MODELISATION DES TRANSFORMATIONS DE PHASES

Ce modèle a été développé au LSG2M par S.Denis et Coll. de manière à décrire les transformations de phases associées à l'évolution thermique continue [4] d'un acier. Le terme source généré pendant les transformations de phase est relié à leurs cinétiques suivant la formule :

$$\dot{q} = \sum \Delta H_k \frac{dy_k}{dt}$$

où  $\Delta H_k$  est l'enthalpie de transformation et  $y_k$  est la fraction volumique du constituant k. Ce terme assure le couplage entre la thermique pure et les transformations de phases. Pendant le chauffage, la cinétique de transformation isotherme est approchée par une loi de Jonson – Mehl - Avrami [5]:

$$y_k = y_{\max k} [1 - \exp(-b_k * t^{n_k})]$$

où  $y_k$  est la fraction volumique du constituant k (perlite ou ferrite) qui s'est transformée en Austénite et  $y_{\max k}$  la fraction maximale qui peut être transformée,  $n_k$  et  $b_k$  des paramètres dépendants de la température. La progression de la transformation martensitique pendant le refroidissement est décrite par la relation de Koistinen et Marburger [6]:

$$Y_k = 1 - [\exp(-A_m(M_{sk} - T))]$$

où  $A_m$  est le coefficient de Koistinen,  $M_{sk}$  est la température de début de transformation martensitique et  $T$  est la température courante.

#### 5. VALIDATION NUMERIQUE

##### 5.1 Procédure de validation

Connaissant l'évolution « fictive » du flux de chaleur  $\varphi_s(t)$  imposé à la surface de l'échantillon nous calculons à l'aide de la méthode directe, qui tient compte de la métallurgie, l'évolution de la température en un point à l'intérieur du solide ( $r = r_c$ ). Cette évolution de température  $T(r_c, t)$  en ce point « de mesure » devient la donnée « expérimentale » d'entrée de la méthode inverse pour recalculer l'évolution fictive de la température de surface et du flux de chaleur de départ.

## 5.2 Paramètres nécessaires au calcul

Notre validation numérique portera sur une éprouvette de diamètre  $\varnothing 16\text{mm}$  en acier hypoeutectoïde de type XC42, pour le quel nous connaissons toutes les caractéristiques thermiques et métallurgiques au chauffage et au refroidissement. Leurs valeurs sont extraites de la littérature [7]. Elles sont introduites dans le programme sous formes des polynômes de troisième degré.

Le cycle thermique retenu pour cette validation est défini par l'évolution du flux de chaleur et de la température par rapport au temps (figures 2 et 3).

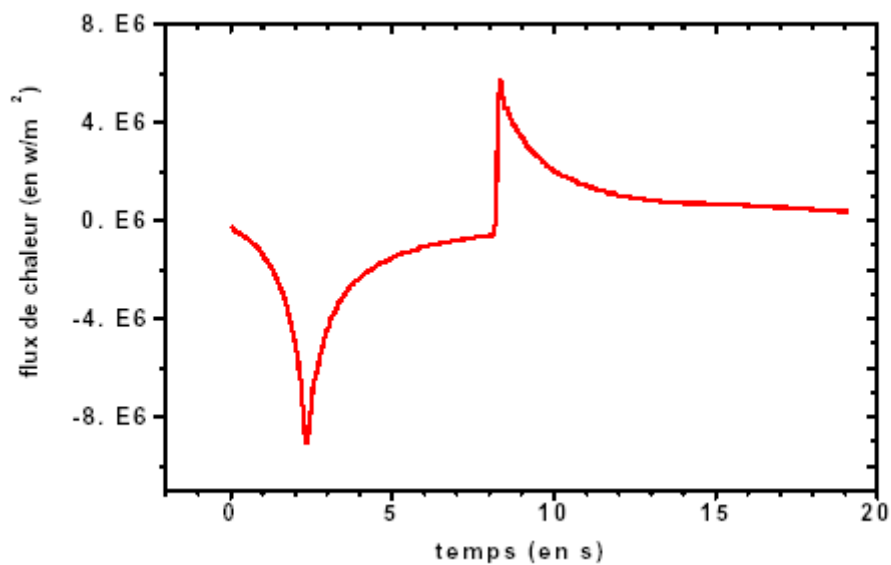
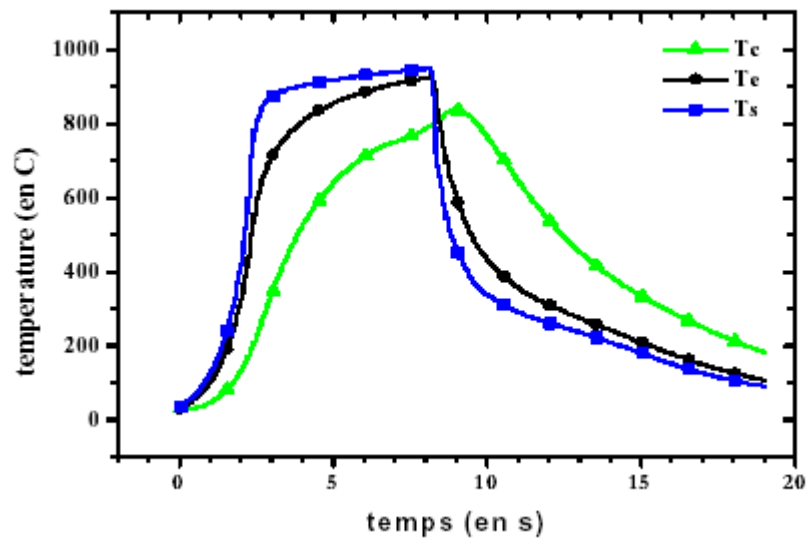


Figure 2 : Cycle thermique subi par l'échantillon



**Figure 3:** L'évolution de la température en fonction du temps à la surface, au point d'abscisse  $r = r_e$  et au centre du solide.

### 5.3 Calcul sans régularisation

Sur la figure 4, nous avons tracé l'évolution de la température en surface, au centre et au point  $r = r_e$  en fonction du temps. Ces grandeurs sont calculées à la fois par la méthode directe et par la méthode inverse sans régularisation ( $\Delta t = 0.035s$ ,  $\Delta r = 0.1mm$  et  $ntf = 3$ ). L'évolution du flux à la surface correspondante est représentée sur la figure 5. Il en ressort que le calcul inverse sans régularisation donne d'une part des résultats très stables (pas d'instabilités apparentes) ce qui est normal car nous avons utilisé une évolution lisse (pas de bruit de mesure) de la température du point  $r = r_e$ . Et d'autre part des résultats satisfaisant sur toute la partie du chauffage. Après la transition chauffage-refroidissement, ce calcul devient de plus en plus imprécis notamment en fin de refroidissement. Ce décalage entre le calcul inverse sans régularisation et le calcul direct s'amplifie de façon significative quand on s'approche de la surface (gradient thermique très important).

### 5.4 Calcul avec régularisation

Nous avons repris le même calcul avec les mêmes paramètres de maillage mais cette fois avec la régularisation. Les paramètres de la régularisation utilisés sont :  $\alpha = 10^1$ ,  $w_0 = 10^9$ ,  $w_1 = 10^{-10}$  et  $w_2 = 0$ . Nous avons représenté sur la figure 6 l'évolution des températures et sur la figure 7 l'évolution du flux de surface. Il ressort de ces figures que la régularisation apporte une nette amélioration des résultats, en effet le mauvais accord observé pendant le refroidissement entre le calcul direct et le calcul inverse est presque annulé. Cette amélioration du calcul est due conjointement à l'effet des termes de premier et de second ordre.



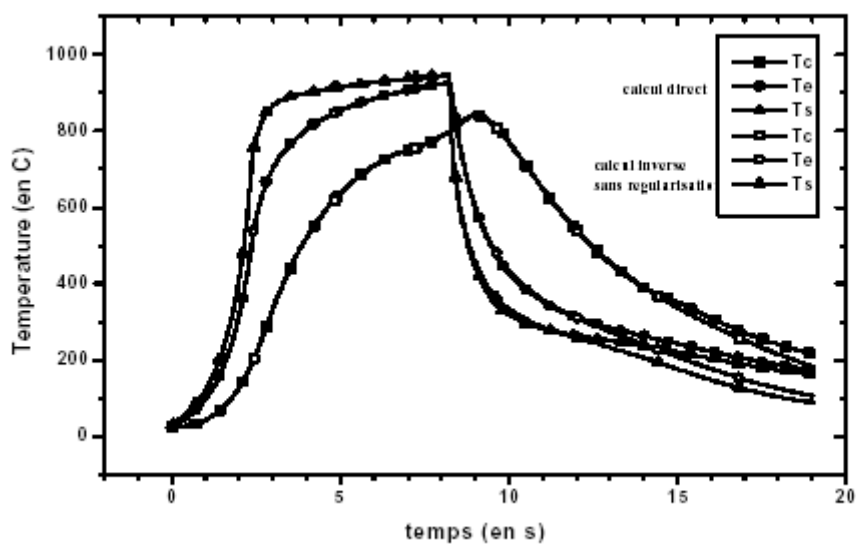


Figure 4 : Comparaison des résultats du calcul de la température par la méthode directe et celle inverse sans régularisation

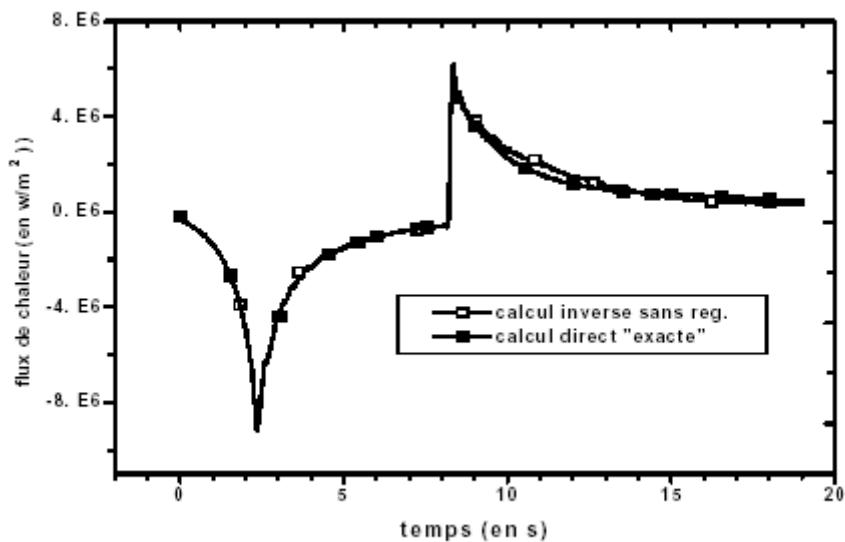


Figure 5 : Comparaison des résultats du calcul du flux de chaleur par la méthode directe et par celle inverse sans régularisation

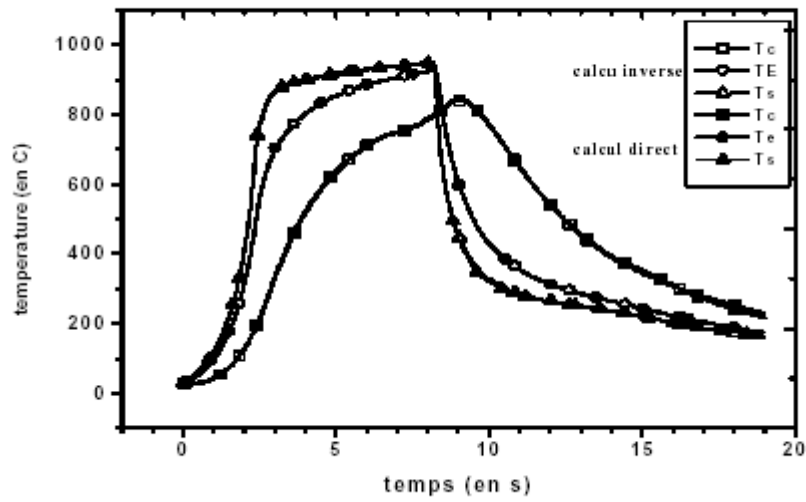


Figure 6 : Comparaison des résultats du calcul de la température par la méthode directe et celle inverse avec régularisation

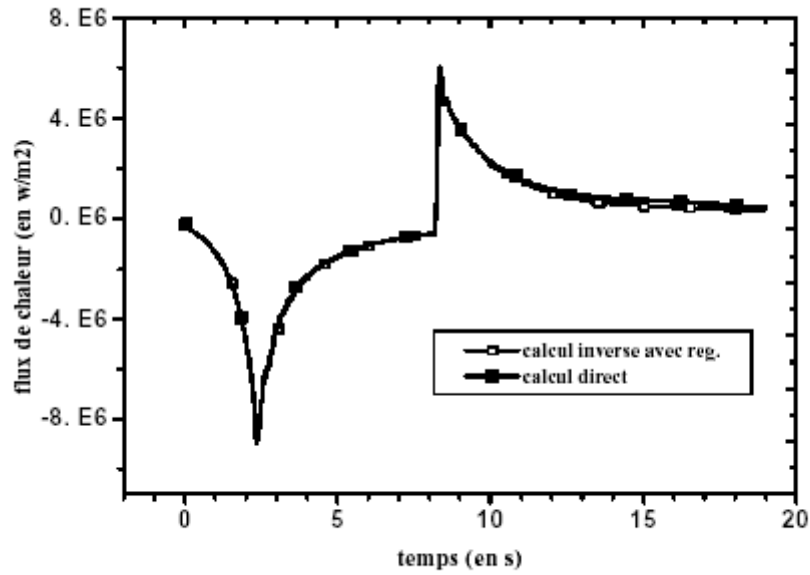
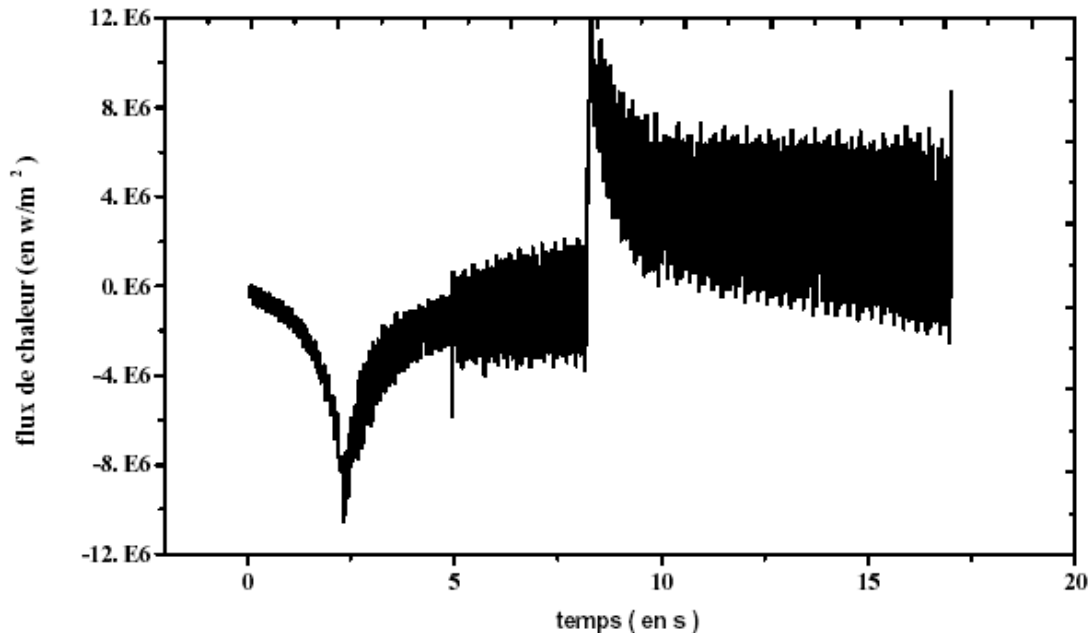


Figure 7 : Comparaison du calcul inverse avec régularisation du flux de la chaleur avec le calcul direct « exact »

### 5.5 Influence du bruit de mesure de la température

En général le succès de toute méthode inverse est mesuré suivant son comportement vis à vis du bruit de mesure de la température au point  $r = r_c$ . Afin de tester ce comportement, nous avons simulé ce

bruit de mesure en ajoutant à l'évolution de température  $T(r_e, t)_{\text{exacte}}$  (supposée exacte) un bruit généré par une fonction aléatoire. Ainsi la donnée d'entrée  $T(r_e, t)$  pour le calcul inverse devient :  $T(r_e, t) = T(r_e, t)_{\text{exacte}} + \varepsilon \delta_{\text{max}}$  avec  $\varepsilon$  : variable aléatoire comprise entre  $-1$  et  $+1$ ,  $\delta_{\text{max}}$  : amplitude maximale du bruit et  $T(r_e, t)_{\text{exacte}}$  : température supposée exacte en  $r = r_e$ .



**Figure 8** : Calcul du flux de chaleur à partir des données bruitées par la méthode Inverse sans régularisation

Sur la figure 8 nous avons tracé l'évolution du flux de chaleur calculée sans régularisation et en utilisant des données bruitées dans  $T(r_e, t)_{\text{exacte}}$  ( $\delta_{\text{max}} = 2^\circ\text{C}$ ). Comme nous pouvons le remarquer sur cette figure, la méthode inverse sans régularisation est très sensible aux bruits de mesure. Les instabilités causées peuvent dépasser les 100% ce qui rend dans ces conditions très difficile l'identification du flux de surface. Afin de mettre en évidence l'effet de la régularisation, nous avons repris le même calcul en choisissant les valeurs optimales des termes de régularisation :  $\alpha = 10^1$ ,  $w_0 = 10^{-9}$ ,  $w_1 = 10^{-3}$  et  $w_2 = 0$ . Nous avons tracé les résultats trouvés sur la figure 9. Nous remarquons alors que les instabilités sont significativement atténuées et que les instabilités de hautes fréquences sont contrôlées par le terme du premier ordre. Nous notons aussi que la réduction des instabilités se fait au détriment de la précision. Ceci nous suggère donc à établir une stratégie de calcul qui consiste à définir et à rechercher un compromis entre la précision et la stabilité qui conduira à résultats « acceptables » satisfaisants à la fois les exigences numériques et physiques.

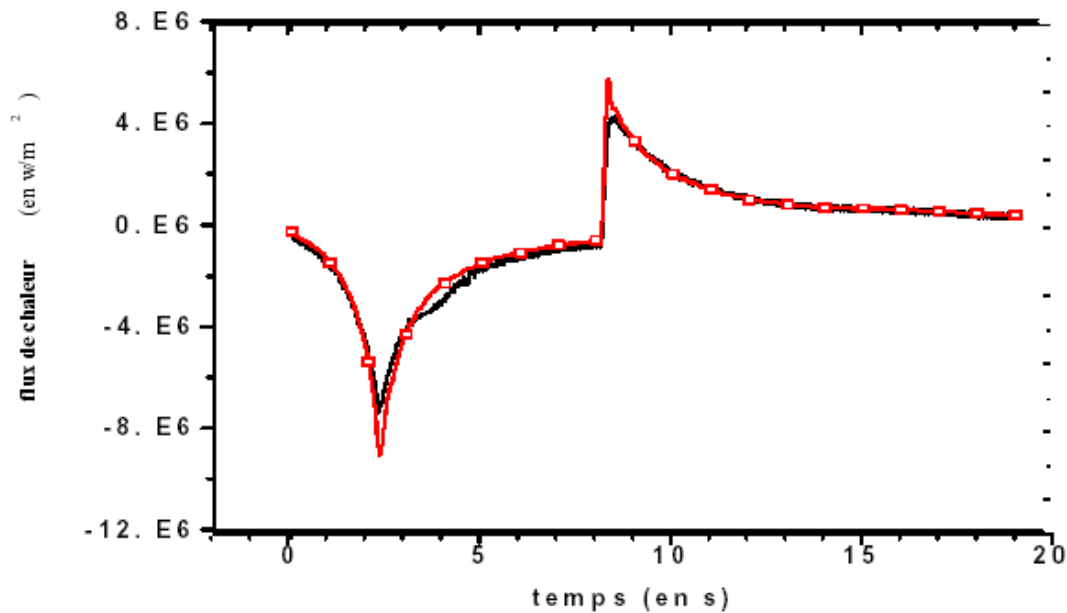


Figure 9 : Calcul du flux de chaleur à partir des données bruitées par la méthode Inverse avec régularisation

## 6. CONCLUSIONS

Le thème général de notre travail rentre dans le cadre de la modélisation des phénomènes thermiques de conduction et des transformations de phases mis en jeu lors d'un traitement thermique des aciers. La résolution de notre problème inverse nous a amené à développer la méthode de spécification de fonction avec régularisation qui a pour but de réduire les instabilités et d'augmenter la précision du calcul inverse. Ce travail est achevé par la mise en évidence de l'effet utile de la régularisation sur la stabilisation des résultats du calcul inverse utilisant des données bruitées. La difficulté de cette méthode réside dans la recherche de la valeur optimale de chaque terme de la régularisation pour chaque cycle thermique. L'étude de l'influence de chaque terme de la régularisation sur les résultats du calcul inverse, et l'élaboration d'un programme informatique automatisant cette recherche fera l'objet des études à venir.

## REFERENCES

- 1 Tikhonov A.N. et Arsenin V.Y., Solution of III-posed problems, V.H. Winston & Sons, Washington, D.C., 1977.
- 2 Stolz G., Numerical solutions to an inverse problem of heat conduction for simple shapes, Journal of heat transfer 82, 20-26, 1960.
- 3 Azim A., Archambault P., Denis S., Inverse resolution of heat-transfer equation with internal heat source : application to the quenching steels with transformations, Journal of materials engineering and performance, Vol 6 (2) April 1997.
- 4 Fernandes F. et Denis S. et Simon A., Prévission de l'évolution thermique et structurale des aciers au cours de leur refroidissement continu, M.E.S - Revue de métallurgie, p.355-366, 1986.

- 5 Jonson W.A. et Mehl R.F., Reaction kinetics in processes of nucleation and growth, Trans. of AIME, 135, p. 416 – 458, 1939.
- 6 Koistinen D.F. et Marberger R.E., A general equation prescribing extent of the austenite-martensite transformation in pure Fe-C alloys and plain carbon steels. Acta Metall, 7, p. 59 – 60 , 1959.
- 7 Dardel Y., La transmission de la chaleur au cours de la solidification, du réchauffage et la trempe de l'acier, Edition de la revue de métallurgie, 1964.