



**Master de Calcul Scientifique et Mathématiques de l'Innovation
(CSMI)**

Présenté par:
Chahid RAHOUTI

◀ ◻ ▶ ◀ ◻ ▶ ◀ ≡ ▶ ◀ ≡ ▶ ≡ 🔍 ↺

CONTENTS

1 Introduction

- Contexte
- Objectifs

2 Extrusion et rhéologie de polymères et modélisation mathématique

- Extrusion de polymères
- Rhéologie des polymères
- Modélisation mathématique des écoulements de polymères

3 Outils open-source

4 Méthodes de modèle réduit

- Paramétrisation de problème
- POD
- Autoencodeur

5 Résultats

- Cavity 2D
- Cas simple de profilé
- Profilé axisymétrique

6 Conclusion et perspectives

CONTEXTE

ACOME est un leader mondial dans la conception et la fabrication de câbles. La production de ces câbles repose sur l'extrusion de polymères, un procédé de mise en forme de matériaux plastiques qui implique un ensemble d'étapes de transformation complexes. Parmi ces étapes, le flux de matière dans l'outillage constitue un phénomène physique important qui peut être modélisé par les équations de la mécanique des fluides.



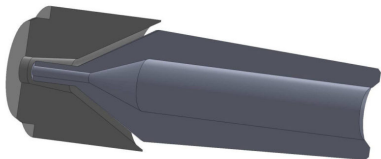
INTRODUCTION

Objectifs

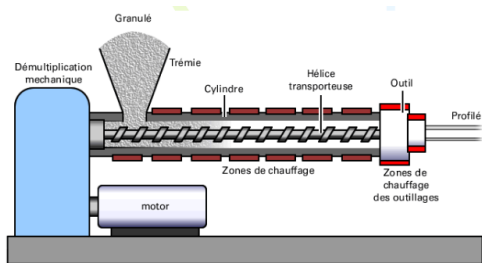
- Explorer la littérature sur l'extrusion de polymères et la modélisation mathématique des écoulements non linéaires.
- Comprendre les outils d'OpenFOAM pour la simulation de l'extrusion de polymères
- Développer un algorithme de simulation numérique pour l'extrusion de polymères, en tenant compte des interactions thermiques et mécaniques.
- Appliquer des méthodes de réduction (POD, AE).
- Analyser et discuter des résultats obtenus, en mettant en évidence les avantages et les limites des modèles réduits par rapport aux simulations complètes.

EXTRUSION DE POLYMÈRES

L'extrusion de polymères est un procédé industriel où des granulés de polymère sont chauffés et fondus par une vis d'extrusion pour être ensuite poussés à travers une filière, formant ainsi des produits en continu (câbles, tubes, etc).



L'intérieur de la tête d'extrusion



Extrudeuse monovis

RHÉOLOGIE DES POLYMÈRES

La rhéologie est définie comme "l'étude de la déformation et de l'écoulement de la matière".

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y} = \mu \dot{\gamma}, \quad (2.1)$$

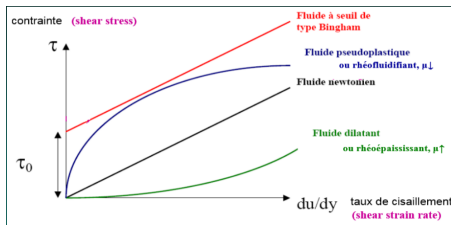


Figure: Dépendance de la contrainte de cisaillement par rapport au taux de cisaillement pour différents fluides

Loi de Carreau-Yasuda

La loi de Carreau-Yasuda est un modèle rhéologique couramment utilisé pour décrire le comportement des fluides non-Newtoniens, en particulier les polymères.

$$\mu(\dot{\gamma}, T) = \mu_{\infty} \alpha_T + \alpha_T (\mu_0 - \mu_{\infty}) [1 + (\lambda \alpha_T \dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}}. \quad (2.2)$$

où n est l'indice de puissance qui distingue le genre de comportement du fluide.

Dans le cadre de l'extrusion de polymère, nous faisons un couplage entre la mécanique des fluides et la thermodynamique. Elles se composent de trois équations principales:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.3)$$
$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \bar{\tau} \quad (2.4)$$
$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \hat{\Phi} \quad (2.5)$$

NOMBRE DE REYNOLDS

Nombre de Reynolds et simplification des équations

Le nombre de Reynolds est un paramètre sans dimension qui caractérise le régime d'écoulement. Dans l'extrusion de polymères, il est faible, ce qui implique un écoulement laminaire. On peut alors simplifier les équations de Navier-Stokes en l'équation de Stokes.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.6)$$

$$\nabla p = \nabla \cdot (\mu(\dot{\gamma}, T)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)). \quad (2.7)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \Delta T + \frac{\mu(\dot{\gamma}, T)}{\rho C_p} \dot{\gamma}^2, \quad (2.8)$$

OUTILS OPEN-SOURCE

- OpenFOAM : simulation numérique (MVF)
- SimpleFoam : écoulements incompressibles
- Gmsh : génération de maillages
- EZyRB : réduction de modèle
- ParaView : visualisation des résultats
- GitHub : partage de code et collaboration

OpenFOAM



Gmsh



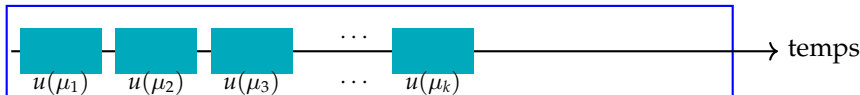
PARAMÉTRISATION DU PROBLÈME

Nous considérons les équations 2.3, 2.4, 2.5, et la loi de 2.2 qui modélise notre problème d'extrusion de polymères, telle que

$$F(U(\mu), \mu) = 0$$

avec $U(\mu)$ un snapshot et $\mu = (v, T, \mu_0, \mu_\infty, \lambda, n, a, b)$

Multi-simulations avec modèle haute fidélité:



Multi-simulations avec modèle réduit:



Figure: Gain de temps du modèle RB dans les scénarios multi-requêtes.

POD

On définit la matrice des snapshots A comme suit :

$$A = [u^{(1)} \quad u^{(2)} \quad \dots \quad u^{(N)}] \in \mathbb{R}^{n \times N} \quad (4.1)$$

On peut appliquer la SVD sur la matrice des snapshots A pour obtenir sa factorisation

$$A = U \Sigma V^T \quad (4.2)$$

où $U = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n]$ et $V = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N]$ sont des matrices orthogonales. La base de POD, $Z \in \mathbb{R}^{n \times m}$ de dimension m est construite en prenant les m premiers vecteurs singuliers droits de U

AUTOENCODEUR

L'idée générale est d'apprendre simultanément un opérateur de compression (encodeur) et un opérateur de reconstruction (décodeur) de sorte que leur composition soit la plus proche possible de l'identité, sous contrainte de réduction de dimension.

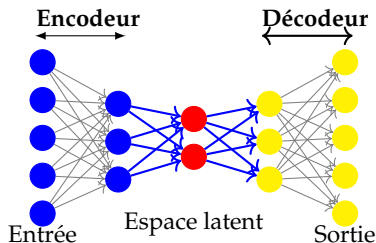


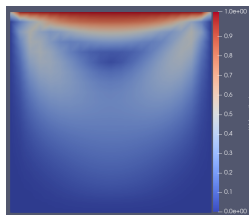
Figure: Schéma d'un autoencodeur.

SIMULATION DE LA CAVITÉ 2D

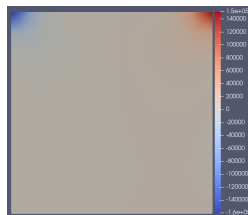
On commence par une simulation de la cavité 2D afin de tester notre solveur développé sous OpenFOAM. Le fluide est mis en mouvement par le déplacement horizontal de la paroi supérieure de la cavité, ce qui induit une rotation dans le domaine. Les paramètres d'entrée sont $\mu = (U, T, A, k)$, où U est la vitesse, T la température, $A = \mu_0$ et $k = \lambda$ sont des paramètres de la loi de Carreau-Yasuda. La plage des valeurs utilisées pour ces paramètres est présentée dans le tableau suivant

Paramètre	Minimum	Maximum	Unité
U	0.9	1.1	m/s
T	443.15	463.15	K
A	14000	16000	Pa·s
k	0.10	0.14	s

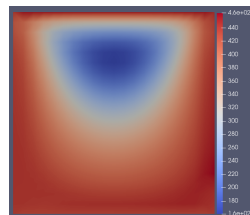
SOLUTION DE HAUTE FIDÉLITÉ



U



P

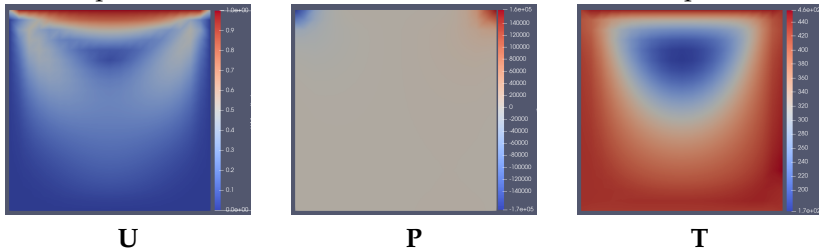


T

Simulation de la cavité 2D pour les trois variables U en m/s , P en Pa et T en K.

RÉSULTATS DE POD

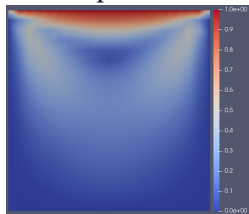
La prédiction de la solution avec la méthode POD est réalisée pour les mêmes paramètres, afin de réduire la dimensionnalité du problème.



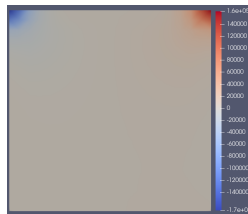
Solution prédite par la méthode POD

RÉSULTATS DE AE

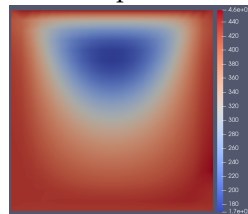
La prédiction de la solution avec la méthode AE est réalisée pour les mêmes paramètres, afin de réduire la dimensionnalité du problème.



U



P



T

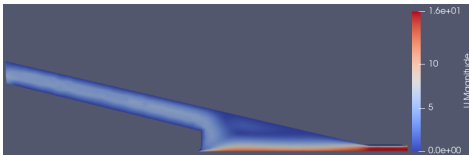
Solution prédite par la méthode AE

COMPARAISON DES RESULTATS

Table: Comparaison des erreurs entre POD et AE ($U = 1.0$, $T = 450.0$, $A = 15000$, $k = 0.12$), l'erreur est calculée entre la solution obtenue sous OpenFOAM et la prédiction du modèle réduit avec EZyRB.

Variable	Erreur relative L2 POD	Erreur relative L2 AE
U (vitesse)	0.1060	0.1060
P (pression)	0.0198	0.0210
T (température)	0.0026	0.0393

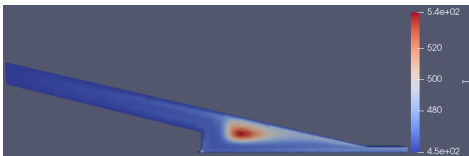
SOLUTION DE HAUTE FIDÉLITÉ



U

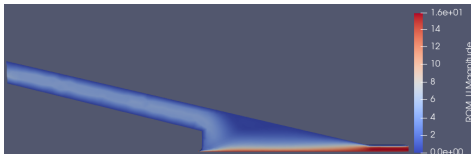


P



T

RÉSULTATS DE POD



U

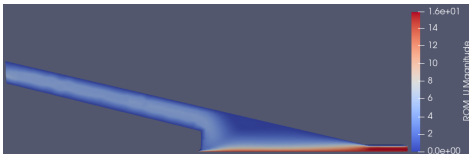


P



T

RÉSULTATS DE AE



U



P



T

COMPARAISON DES RESULTATS

Table: Comparaison des erreurs entre POD et AE pour deux cas différents

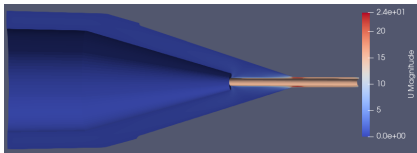
Variable	Erreur relative L2 POD	Erreur relative L2 AE
U (vitesse)	0.083	0.0831
P (pression)	0.497	0.4978
T (température)	0.0350	0.03507
U (vitesse)	0.0837	0.08308
P (pression)	0.497	0.4978
T (température)	0.03506	0.03506

SIMULATION DE PROFILÉ AXISYMÉTRIQUE

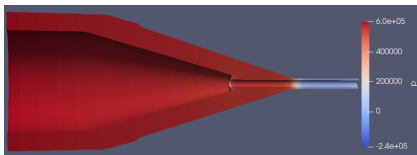
Nous avons construit une base de 50 snapshots sous OpenFOAM. Pour la prédiction, quatre matériaux différents sont considérés, ce qui permet une diversité des paramètres $\mu = (A, k, n, a, b)$, où tous sont des paramètres de la loi de Carreau-Yasuda. La plage des valeurs utilisées pour ces paramètres est présentée dans le tableau suivant

Paramètre	Minimum	Maximum	Unité
A	1687.88	17111.9	Pa·s
k	0.03003	0.18211	s
a	0.50188	3.9756	-
n	0.1	0.3323	-
b	0.01776	0.03370	k ⁻¹

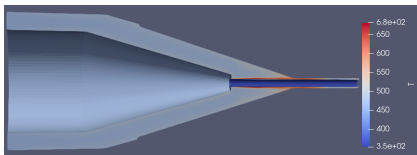
SOLUTION DE HAUTE FIDÉLITÉ



U

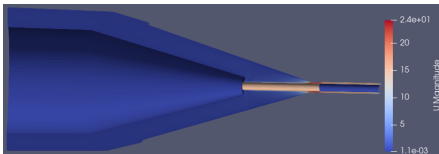


P

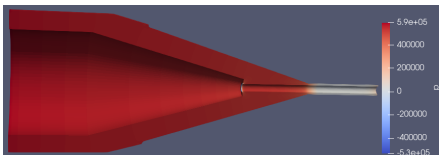


T

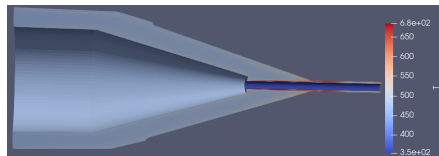
RÉSULTATS DE POD



U

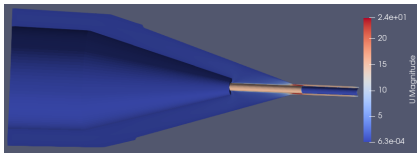


P

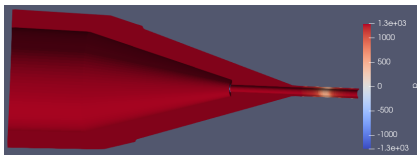


T

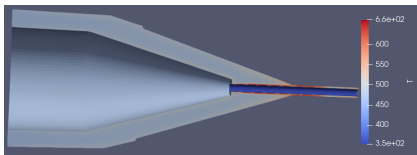
RÉSULTATS DE AE



U



P



T

COMPARAISON DES RESULTATS

Table: Comparaison des temps de calcul pour les quatre matériaux étudiés, et accélération obtenue par POD et AE

Cas	Haute Fidélité (s)	POD (s)	AE (s)	Accélération POD	Accélération AE
Cas 1	130	0.0463	0.0093	2808	13978
Cas 2	130	0.0265	0.0091	4906	14286
Cas 3	134	0.0351	0.0088	3818	15227
Cas 4	136	0.0206	0.0097	6602	14021

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

- Développement d'un modèle Carreau-Yasuda dépendant de la température dans OpenFOAM et automatisation de la construction des modèles réduits POD/AE.
- Les méthodes POD et AE permettent de réduire fortement les temps de calcul, avec une meilleure précision pour la POD, notamment sur la vitesse et la température.
- Améliorer la précision des modèles réduits en élargissant le nombre de paramètres, en optimisant le nombre de snapshots et les réglages des méthodes POD/AE, ainsi qu'en affinant les maillages.
- Enrichir la physique des simulations, notamment par le transfert de chaleur conjugué et l'utilisation de solveurs directs, pour mieux anticiper l'extrudabilité des polymères fondus.

Merci pour votre attention

Des questions ?