

Ébullition convective du CO₂ dans un micro-canal : Prédiction des performances thermiques par apprentissage automatique

Ahmadou Tidiane Diaby^{1*}, Issa Jaffal¹, Marie-Christine Duluc¹, Pascal Tobaly^{1,2}

¹Lafset, Cnam

292, rue Saint-Martin - 75003 Paris

²Université Sorbonne Paris Nord

99, avenue Jean-Baptiste Clément - 93430 Villetaneuse, France

*(auteur correspondant : ahmadou-tidiane.diaby@lecnam.net)

Résumé - Cette étude porte sur le transfert de chaleur par ébullition du CO₂. Le fluide s'écoule dans un tube cylindrique de diamètre 0,7 mm. Le tube est chauffé à flux imposé. Les essais ont été réalisés pour trois températures de saturation (-10, -5 et 0 °C), pour des flux massiques compris entre 300 et 900 kg.m⁻².s⁻¹ et des densités de flux de chaleur variant de 5 à 20 kW.m⁻². Le titre en vapeur avant chauffage varie de 0 à 1. Deux modèles de réseaux de neurones ont été développés pour prédire le coefficient d'échange thermique ($R^2 = 0,934$) et le gradient de pression ($R^2 = 0,989$) à partir des quatre paramètres précédents. L'analyse de l'importance des variables et des courbes de dépendance partielle révèle que le flux massique est le paramètre le plus influent tant pour le coefficient d'échange que pour les pertes de charge.

Abstract - This study investigates heat transfer during CO₂ boiling in a cylindrical tube with a diameter of 0.7 mm, measured using an insulated heating tube and a pressure sensor. The tests cover various saturation temperatures (-10 to 0 °C), mass fluxes from 300 to 900 kg.m⁻².s⁻¹, vapor qualities from 0 to 1, and heat fluxes from 5 to 20 kW.m⁻². Two neural network models were developed to predict the heat transfer coefficient ($R^2 = 0.934$) and the pressure gradient ($R^2 = 0.989$) from the four input parameters. Analysis using feature importance and partial dependence plots shows that the mass flux is the most influential parameter for both the heat transfer coefficient and the pressure drop.

Nomenclature

d	différence	T	température, °C
G	flux massique, kg.m ⁻² .s ⁻¹	x	titre vapeur
h	Coefficient d'échange thermique, kW.m ⁻² .K ⁻¹	z	position axiale le long du tube, m
k	conductivité thermique, W m ⁻¹ .K ⁻¹	<i>Indices et exposants</i>	
L	longueur, m	e	entrée
P	pression, Pa	i	intérieur
Q	puissance thermique, W	o	extérieur
q''	densité flux de chaleur, kW.m ⁻²	p	paroi
r	rayon, m	sat	saturation
		mes	donnée expérimentale
		mod	modèle

1. Introduction

Le transfert de chaleur par ébullition dans les micro ou mini-canaux a fait l'objet de nombreux travaux. Des modèles et corrélations ont été proposées pour déterminer le coefficient d'échange thermique et la perte de charge [1–2]. Un désaccord persiste cependant sur la définition précise des mini- et micro-canaux, Cheng et Mewes [3] et Kandlikar [4] proposant des classifications différentes, Shah [5] souligne que la définition de Kandlikar reste la plus utilisée.

Les micro-canaux connaissent un développement rapide, en particulier pour la gestion thermique diphasique. Les applications de l'apprentissage automatique dans ce domaine se multiplient également, comme le souligne la revue de Miao et al. [6]. Des modèles optimisés par approche bayésienne permettent désormais de prédire avec précision le transfert de chaleur et la perte de charge [7].

Les réseaux de neurones artificiels sont particulièrement efficaces pour modéliser des phénomènes fortement non linéaires, et des outils comme l'analyse de l'importance des variables et les courbes de dépendance partielle facilitent l'interprétation des modèles et la compréhension des mécanismes sous-jacents.

Dans ce contexte, ce travail vise à développer et valider un modèle d'apprentissage automatique destiné à prédire le coefficient d'échange thermique et la perte de charge dans un micro-canal. Ce modèle, développé à partir de données expérimentales, sera aussi utilisé pour analyser l'influence des différents paramètres expérimentaux.

2. Méthodes et matériels

2.1. Installation expérimentale

Une installation expérimentale à boucle fermée de CO₂ a été conçue pour étudier l'ébullition en écoulement dans un micro-canal horizontal et la chute de pression associée (Figure 1). Elle comprend des sections de préchauffage, de test, d'observation et de post-chauffage, et permet le contrôle du débit massique et des conditions thermodynamiques.

La section de test est thermiquement isolée par un matériau à faible conductivité thermique ($k = 0,022 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) et d'épaisseur 0,08 m, afin de minimiser les pertes thermiques vers l'environnement. Elle est entourée de plaques de cuivre quasi-isothermes, refroidies par un fluide secondaire (éthanol) circulant dans des tubes en contact thermique avec celles-ci. Ces plaques assurent une condition de paroi quasi isotherme et agissent comme un bouclier thermique vis à vis de l'extérieur. L'hypothèse de flux thermique imposé est justifiée par le maintien des plaques à température constante et les pertes thermiques négligeables vers l'extérieur [8], ce qui assure une distribution quasi uniforme du flux thermique. Dans ces conditions, l'inertie thermique du tube est négligeable en régime permanent.

La température du fluide secondaire, réglée par un bain thermostaté externe, permet d'imposer et de contrôler avec précision la température de saturation du CO₂ dans la section de test. La boucle primaire comprend un condenseur, une pompe à diaphragme, une vanne d'expansion. Un flacon de séparation assure la stabilité de l'écoulement, la régulation de la pression et l'absence de cavitation. Le préchauffage du fluide réfrigérant (CO₂) est assuré par un cordon électrique enroulé autour du tube : Le CO₂, initialement à l'état de liquide sous-refroidi est injecté à l'entrée de la section de test, à l'état saturé avec un titre de vapeur contrôlé.

Les mesures de pression et de température sont effectuées à l'entrée et à la sortie du préchauffeur à l'aide de capteurs de pression et de thermocouples. L'incertitude associée à ces paramètres expérimentaux est précisée dans les travaux de Diaby et al. [8].

2.2. Section d'essai

Une vue schématique de la section de test est présentée sur la Figure 2. La section de test est composée d'une section de mesure suivie d'une section de visualisation. La section de mesure est constituée d'un tube circulaire lisse et droit en acier inoxydable 316L, de 20 mm de diamètre extérieur, 0,7 mm de diamètre intérieur et 200 mm de longueur. Un cordon électrique est enroulé autour du tube et connecté à une source d'alimentation.

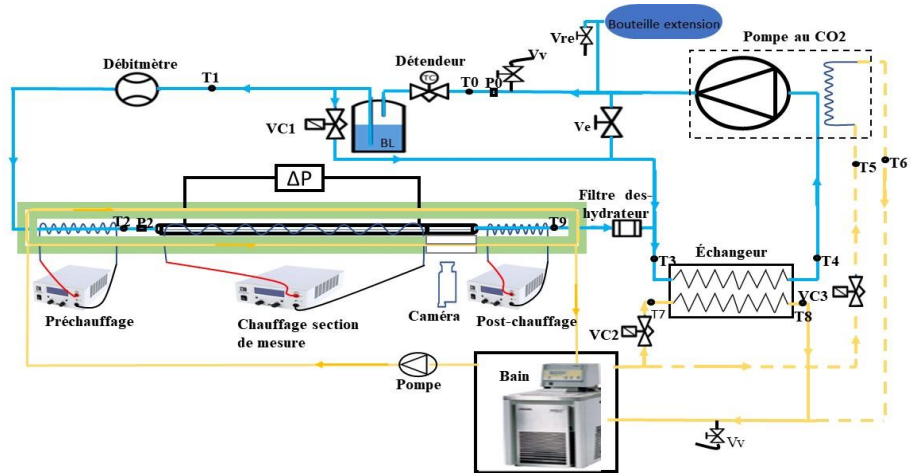


Figure 1 : Vue schématique de l'installation expérimentale

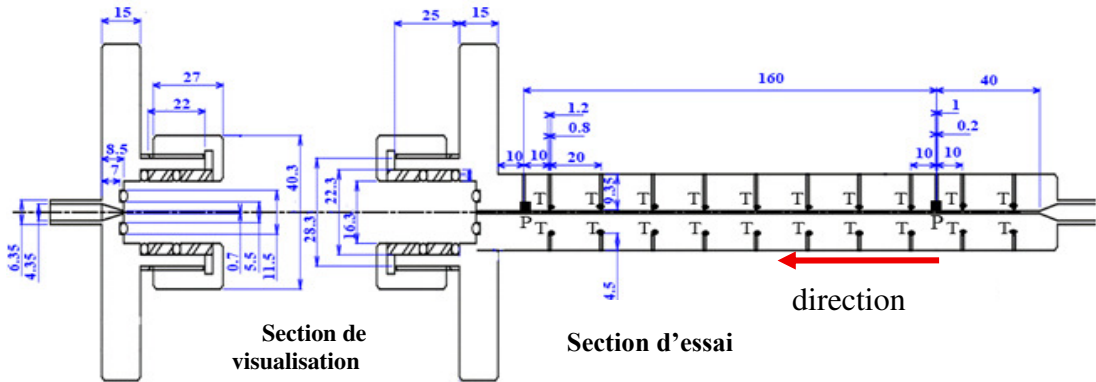


Figure 2 : Schéma de la section d'essai

Les thermocouples utilisés pour la mesure de la température sont insérés dans des vis entièrement percées et fixés à dix positions axiales différentes ($z_j, j = 1, \dots, 10$) le long du tube. Pour une position axiale donnée z_j , deux thermocouples sont insérés à des rayons égaux à 0,65 mm et 5,5 mm par rapport à l'axe du tube. Les positions axiales z_i sont espacées de 20 mm. En aval de la section de mesure se trouve une section de visualisation constituée d'un tube en verre de 160 mm de longueur et de même diamètre intérieur que la section de test.

Les mesures comportent 448 observations et ont été réalisées dans une précédente étude utilisant la même installation [8], permettant de comparer les résultats avec ceux de la littérature puis d'élargir les conditions opératoires à des températures inférieures à 0 °C.

2.3. Traitement des données expérimentales

La valeur locale du coefficient de transfert thermique h_i est déterminée dans la section de test à partir de la mesure de la densité de flux de chaleur q_i'' , de la température de saturation du fluide à l'intérieur du micro-canal $T_{sat,j}$ et de la température de la paroi interne du tube $T_{p,j}$. Le coefficient de transfert de chaleur local est calculé à l'aide de l'équation 1 et la moyenne h est déterminée par l'équation 2. Grâce au bouclier thermique et à l'isolation, les pertes de chaleur sont négligeables. La puissance électrique Q (W), générée sur la surface externe du tube $2\pi r_o L$, est entièrement transférée au fluide. La densité de flux de chaleur à la paroi interne est calculée à l'aide de l'équation 3.

$$h_j = \frac{q_i''}{T_{p,j} - T_{sat,j}} \quad (1)$$

$$h = \frac{1}{10} \sum_j^{10} h_j \quad (2)$$

$$q''_i = \frac{Q}{2\pi r_i L} \quad (3)$$

Le profil de température au sein du tube, la température de la paroi interne du tube, la température de saturation du fluide, l'interpolation linéaire du profil de pression, la détermination du titre de vapeur en régime permanent, ainsi que les calculs d'incertitude sont détaillés dans Diaby et al. [8].

2.4. Modélisation par réseaux de neurones

Deux modèles de réseaux de neurones supervisés ont été entraînés à partir des données obtenues expérimentalement pour prédire le coefficient d'échange thermique et le gradient de pression en fonction de la température de saturation T_{sat} , du flux massique G , de la densité de flux de chaleur q'' et du titre de vapeur à l'entrée de la section d'essai x_e . Ces données (448 observations) ont été réparties en deux sous-ensembles selon une proportion couramment utilisée dans la littérature [9] : 80 % pour l'entraînement du modèle (358 observations) et 20 % pour l'évaluation sur un jeu de test indépendant (90 observations).

Les configurations optimales des hyperparamètres des modèles ont été déterminées à l'aide de la méthode de Grid Search proposée par la bibliothèque scikit-learn de Python, en explorant le nombre de couches cachées, le nombre de neurones, la fonction d'activation, le taux d'apprentissage ou le nombre d'itérations, le coefficient de régularisation (L2), le taux d'apprentissage initial et l'algorithme d'optimisation (Tableau 1). Une validation croisée à 5 plis ($cv = 5$) a été utilisée dans le Grid Search [9], ce qui implique que chaque combinaison d'hyperparamètres a été entraînée et évaluée cinq fois sur différentes partitions des données d'entraînement avant de sélectionner la configuration optimale.

Les performances des modèles seront d'abord évaluées sur le jeu de test. Enfin, les courbes représentant l'évolution du coefficient d'échange et de la perte de charge en fonction du titre de vapeur seront tracées et comparées aux données expérimentales.

2.5. Interprétation des modèles

La méthode de l'importance des variables par permutation a été utilisée afin d'identifier les paramètres d'entrée les plus importants pour chaque modèle [10]. La méthode utilisée consiste à mesurer l'augmentation de la racine de l'erreur quadratique moyenne ($RMSE$) du modèle lorsque les valeurs d'une entrée sont permutées de manière aléatoire, rompant ainsi sa relation avec la sortie. Plus l'augmentation de l'erreur est importante, plus la variable est considérée comme influente pour le modèle.

Hyperparamètre	Valeurs testées
Nombre de neurones	Une couche cachée : 4, 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32 neurones
	Deux couches cachées : (8, 4), (12, 6), (16, 8), (20, 10), (24, 12), (28, 14), (32, 16) neurones
Fonction d'activation	ReLU, Tanh
Coefficient de régularisation (L2)	0.0001, 0.001, 0.01, 0.1
Taux d'apprentissage initial	0.001, 0.01
Algorithme d'optimisation	Adam, LBFGS

Tableau 1 : Valeurs des hyperparamètres testés pour l'optimisation des réseaux de neurones.

Enfin, les courbes de dépendance partielle ont été utilisées pour visualiser les tendances des deux grandeurs de sortie en fonction de chacune des entrées, illustrant l'influence de chaque paramètre sur les prédictions du modèle [10]. Elles permettent ainsi de mieux comprendre l'effet individuel de chaque paramètre d'entrée sur les prédictions et d'évaluer la cohérence physique du modèle.

3. Résultats et discussions

3.1. Analyse expérimentale

Les expériences sont réalisées en conditions stationnaires. La température à l'entrée du micro-canal est fixée à $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$, $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ ou $0\text{ }^{\circ}\text{C}$. Le flux massique varie entre 300 et $900\text{ kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$, tandis que la densité de flux de chaleur appliquée est comprise entre 5 et 20 kW.m^{-2} . Les données sont enregistrées chaque seconde pendant une période de 20 minutes une fois le régime permanent atteint.

Dans cette section, nous présentons un aperçu représentatif des résultats expérimentaux obtenus. Étant donné l'importance et la quantité des données collectées, il n'est pas possible de toutes les exposer ici. Pour illustrer les tendances générales observées, nous proposons à titre d'illustration un cas typique correspondant à une température de saturation $T_{sat} = -10\text{ }^{\circ}\text{C}$ et un flux thermique de $q'' = 20\text{ kW.m}^{-2}$. Ce choix permet de mettre en évidence l'influence du flux massique et du titre en vapeur sur le coefficient d'échange. La Figure 3a montre l'évolution de ce coefficient en fonction du titre de vapeur pour différentes valeurs de flux massique, dans ces conditions. On observe une augmentation du coefficient d'échange avec le flux massique tant que le titre en vapeur reste en deçà d'une valeur limite correspondant à l'assèchement du micro-canal. Cette diminution est liée à la formation de zones sèches sur la paroi, où le contact fluide-paroi devient partiel, réduisant significativement l'échange thermique.

Sous les mêmes conditions de test, l'évolution du profil de perte de charge le long de la conduite, exprimée sous forme de gradient de pression dans le micro-canal a été étudiée en fonction du titre de vapeur. La Figure 3b montre que le gradient de pression augmente avec le flux massique, ce qui s'explique par l'accroissement de la vitesse du fluide et les pertes de charge associées. À des titres de vapeur élevés, correspondant à l'assèchement partiel du micro-canal, une variation plus importante du gradient de pression est observée, due à l'augmentation de la vitesse en phase vapeur.

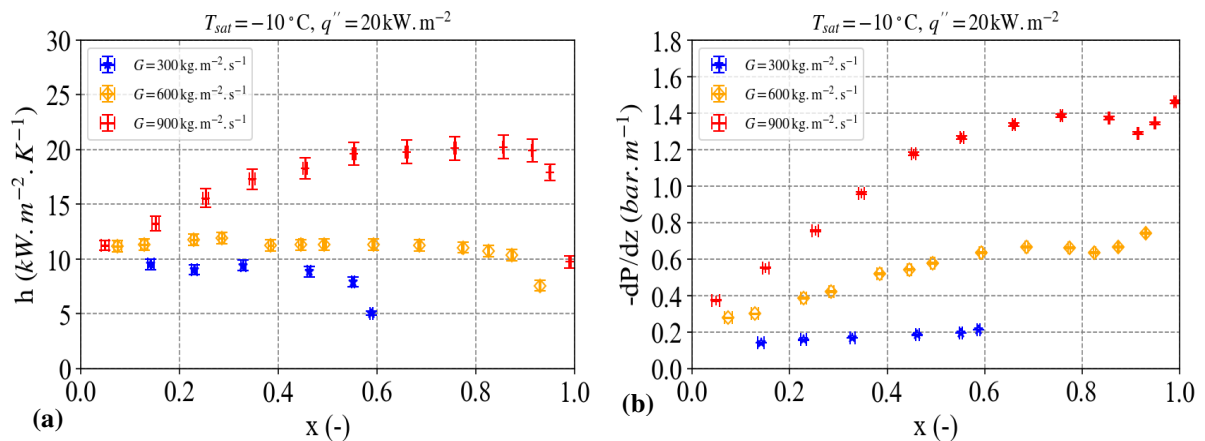


Figure 3 : Evolution du coefficient d'échange thermique et du gradient de pression en fonction du titre vapeur pour différents flux massiques: (a) coefficient d'échange thermique et (b) gradient de pression

3.2. Évaluation des modèles

Les performances des modèles ont été évaluées sur un jeu de test composé de 90 observations. La Figure 4 illustre la comparaison entre les valeurs observées et les valeurs prédites, avec deux droites en traits pointillés représentant une marge d'erreur de $\pm 20\%$.

Le modèle du coefficient d'échange thermique présente une racine de l'erreur quadratique moyenne ($RMSE$) de $1,51 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ et un coefficient de détermination R^2 égal à $0,934$, traduisant une bonne capacité de prédiction. Toutefois, les erreurs relatives pour les faibles valeurs du coefficient d'échange, comprises entre 0 et $10 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, sont élevées, dépassant souvent la marge d'erreur de $\pm 20\%$. Cela peut être dû à la moindre précision des mesures à faible débit, liée aux limites de fonctionnement du débitmètre. La performance du modèle du gradient de pression est très satisfaisante, avec un $RMSE$ de $0,0429 \text{ bar}$ et un coefficient R^2 égal à $0,989$. Les dépassements de la marge d'erreur sont très rares (trois cas seulement).

Les prédictions des modèles ont également été confrontées aux données expérimentales (Figure 5) à l'aide de courbes représentant l'évolution en fonction du titre de vapeur x_e pour les mêmes conditions que la Figure 3 : température de saturation $T_{sat} = -10^\circ\text{C}$, densité de flux thermique $q'' = 20 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$, et trois flux massiques G : 300 , 600 et $900 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$. Les courbes représentant le coefficient d'échange thermique sont globalement en accord avec les données expérimentales, sauf lorsque $G = 900 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ pour des valeurs de x_e autour de $0,5$, où le modèle présente un comportement incohérent avec la quasi-linéarité des mesures (Figure 4a). Cela pourrait s'expliquer par un surapprentissage, susceptible d'être corrigé par des techniques de régularisation [9] ou par l'intégration de connaissances physiques [11].

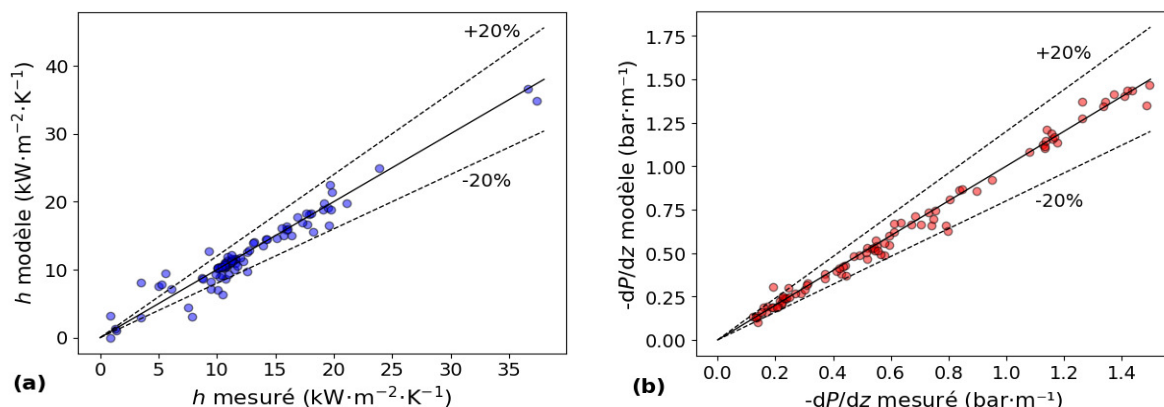


Figure 4 : Comparaison des valeurs expérimentales et prédites par les modèles pour les points du test : (a) coefficient d'échange thermique h , (b) gradient de pression $-dP/dz$

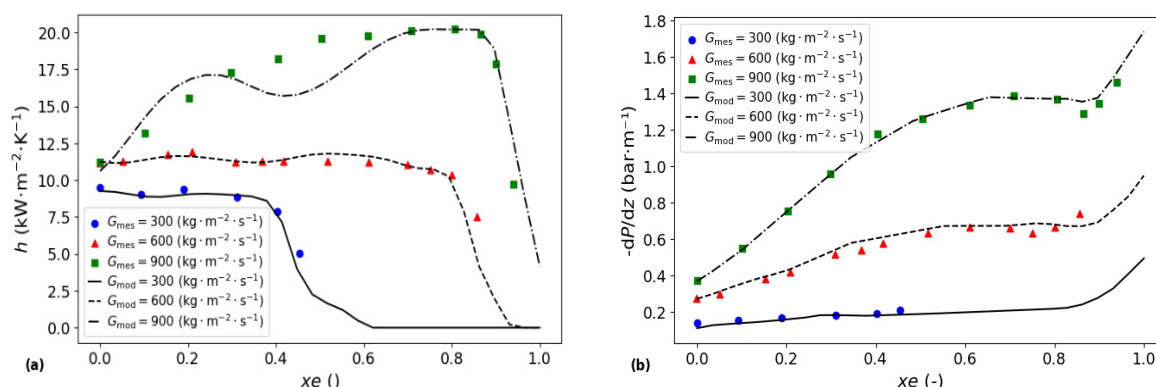


Figure 5 : Mesures expérimentales et courbes de prédiction des modèles en fonction du titre de vapeur : (a) coefficient d'échange thermique h , (b) gradient de pression $-dP/dz$

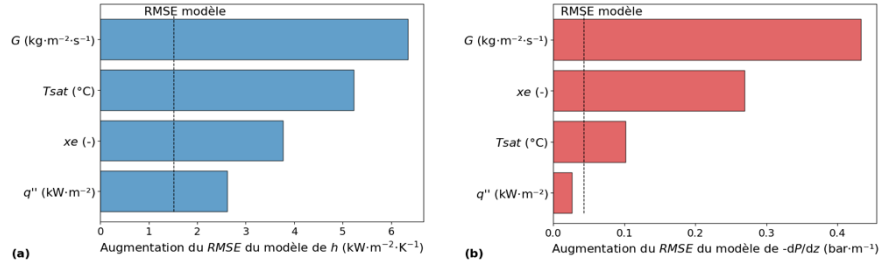


Figure 6 : Importance des variables par permutation (augmentation de la RMSE) et RMSE des modèles pour : (a) coefficient d'échange thermique h ; (b) gradient de pression $-dP/dz$

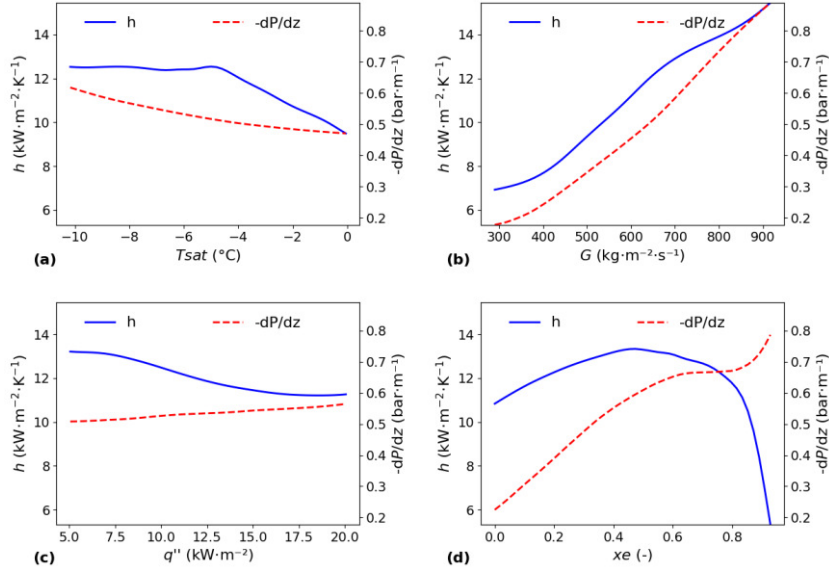


Figure 7 : Courbes de dépendance partielle du coefficient d'échange thermique h et du gradient de pression $-dP/dz$ en fonction des paramètres d'entrée

La variation du coefficient d'échange thermique en fonction de x_e suit globalement une tendance linéaire pour les faibles valeurs avant de chuter brutalement au-delà d'un certain seuil (par exemple $x_e \approx 0,8$ pour $G = 900$ kg·m⁻²·s⁻¹). La prédiction du modèle du gradient de pression est quasiment conforme aux mesures, avec une tendance quasi-linéaire avant $x_e \approx 0,8$, suivie d'une augmentation rapide (Figure 4a).

3.3. Interprétation des modèles

L'importance des variables par permutation a permis d'évaluer la contribution relative de chaque paramètre d'entrée aux performances des modèles, illustrant ainsi leur influence potentielle sur le transfert de chaleur et le gradient de pression. La Figure 6 montre que le flux massique G est le paramètre le plus déterminant pour la prédiction des deux sorties, suivi par T_{sat} , x_e , q'' pour le modèle du coefficient d'échange thermique h , et par x_e , T_{sat} et q'' pour le modèle du gradient de pression $-dP/dz$. L'impact de la densité de flux q'' sur ce dernier est négligeable ($\approx 1/17$ de celui de G), en accord avec l'absence de relation directe entre le flux thermique et les pertes de charge.

La Figure 7 présente les courbes de dépendance partielle correspondantes. Elles confirment la forte dépendance des deux grandeurs h et $-dP/dz$ au flux massique G (Figure 7b) et leur faible sensibilité au flux thermique (Figure 7c). Le coefficient d'échange thermique h varie de manière quasi-linéaire en fonction de G . Le gradient de pression $-dP/dz$ évolue également de façon quasi-linéaire par rapport à tous les paramètres, à l'exception du titre de vapeur x_e , pour lequel on observe une brusque augmentation à partir d'un seuil aux alentours de $x_e = 0,8$.

Enfin, ces courbes contribuent à la validation du modèle et à une meilleure interprétation des phénomènes physiques sous-jacents. Cependant, elles représentent une tendance moyenne et ne rendent pas compte des interactions complexes entre les variables d'entrée (G , T_{sat} , q'' et x_e), susceptibles d'influencer significativement les sorties du système (h et $-dP/dz$).

4. Conclusion

Les réseaux de neurones ont permis de prédire avec précision le gradient de pression dans un micro-canal ($R^2 = 0,989$). Le modèle du coefficient d'échange thermique ($R^2 = 0,934$) s'est révélé moins prédictif pour les faibles valeurs, potentiellement en raison de mesures moins précises dans cette zone. Les courbes représentant ces deux sorties en fonction du titre de vapeur ont confirmé que les prédictions suivent globalement les observations. L'intégration de connaissances physiques dans les réseaux de neurones permettrait de produire des modèles encore plus pertinents.

L'apprentissage automatique offre des outils utiles pour prédire les performances, mais également pour mieux comprendre les phénomènes thermiques liés aux écoulements dans les micro-canaux. Dans cette étude, l'analyse par permutation a permis de hiérarchiser les paramètres influents sur le coefficient d'échange thermique et le gradient de pression, soulignant que le flux massique est le paramètre le plus influent. Les courbes de dépendance partielle ont permis d'estimer les tendances associées.

Références

- [1] L. Cheng, G. Xia, J.R. Thome, Flow boiling heat transfer and two-phase flow phenomena of CO₂ in macro-and micro-channel evaporators: Fundamentals, applications and engineering design, Applied Thermal Engineering 195 (2021), 117070.
- [2] L. Cheng, G. Xia, Fundamental issues, mechanisms and models of flow boiling heat transfer in microscale channels, International Journal of Heat and Mass Transfer 108 (2017), 97–127.
- [3] L. Cheng, D. Mewes, Review of two-phase flow and flow boiling of mixtures in small and mini channels, International Journal of Multiphase Flow 32 (2006), 183–207.
- [4] S. G. Kandlikar, Fundamental issues related to flow boiling in minichannels and microchannels, Experimental Thermal and Fluid Science 26 (2002), 389–407.
- [5] M. M. Shah, Unified correlation for heat transfer during boiling in plain mini/micro and conventional channels, International Journal of Refrigeration 74 (2017), 606–626.
- [6] Y. Miao, T. Zhang, X. Xu, S. Yang, H. Chen, H. Huang, A comprehensive review on advanced microchannel cooling technologies: two-phase thermal management and machine learning applications, Applied Thermal Engineering 279 (2025) 127697.
- [7] Z. Said, P. Sharma, E.M. Abo-Zahhad, S. Kumar, A. Waqas, M. S. Hossain, Bayesian-optimized machine learning for flow boiling heat transfer prediction in microchannel heat sinks, Case Studies in Thermal Engineering 76 (2025) 107353.
- [8] A. T. Diaby, M.-C. Duluc, B. Tremeac, P. Tobaly, Experimental investigation on heat transfer and pressure drop during CO₂ boiling in a cylindrical microchannel, 26th International Congress of Refrigeration. (Paris, France, August 21–25, 2023).
- [9] A. Géron, Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems 2nd edition (2019).
- [10] C. Molnar, Interpretable Machine Learning: A Guide for Making Black Box Models Explainable. 2nd edition (2022).
- [11] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, L. Yang, Physics-informed machine learning. Nature Reviews Physics, 3 (2021), 422-440.