Liste des symboles

ρ	Masse volumique
c	Chaleur massique
k	Conductivité thermique
h	Enthalpie massique
H	Enthalpie volumique
L	Chaleur latente de changement de phase
T_f	Température de fusion
T_{lf}	Température liquidus
T_{sf}	Température solidus
ϕ	Fraction liquide
U	Vecteur vitesse
(s, l)	Indices désignent les deux phases : solide et liquide
Pe	Nombre de Peclet
Ste	Nombre de Stephan
ω	Taux de perfusion de sang
Q_m	Génération de chaleur par métabolisme
h^e	Longueur caractéristique de l'élément
τ^e	Paramètre de stabilisation de l'élément
$\varphi(H)$	Fonction de réciproque $T - H$
μ	Paramètre de relaxation
(r, z)	Cordonnées axisymétriques
(x, y)	Cordonnées cartésiennes
$\langle N \rangle^T$	Vecteur des fonctions de formes
$\{T\}$	Vecteur des températures nodales
$\{H\}$	Vecteur des enthalpies nodales
$\{T^{(i)}\}$	Vecteur des températures à l'itération i
$\{H^{(i)}\}$	Vecteur des enthalpies à l'itération i
$\{T_{n+1}^{(i)}\}$	Vecteur des températures à l'itération i et à l'instant $n+1$
$\{H_{n+1}^{(i)}\}$	Vecteur des enthalpies à l'itération i et à l'instant $n+1$

$\left[K\left(T^{(i)}\right)\right]$	Matrice tangente dans le cas stationnaire
$\left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right]$	Matrice tangente dans le cas instationnaire
$\left\{R\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right)\right\}$	Vecteur résiduel dans le cas stationnaire
$\left\{R\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right)\right\}$	Vecteur résiduel dans le cas instationnaire
$[Kd]$	Matrice de conduction
$[M]$	Matrice de capacitance
$[Ku]$	Matrice du terme d'advection
$[Ku]_{SUPG}$	Matrice du terme d'advection stabilisée
$[Kconv]$	Matrice de convection
$[Kray]$	Matrice de rayonnement

Liste des figures

Figure 1.1 : schémas des deux cas semi-infinis (plane et cylindrique) 5

Figure 1.2 : problème de fusion étudié par Goodman et Shea..... 6

Figure 1.3 : Illustration de la méthode des points de marqueur, (a) des marqueurs (points) représente la position de l'interface, (b) à chaque pas de temps chaque marqueur se déplace avec une vitesse spécifique à une nouvelle position, (c) l'interface et sa nouvelle position..... 9

Figure 1.4 : Illustration de la méthode VOF, (a) interfaces entourant des domaines physiques, (b) positions d'interfaces caractérisées par des cellules avec des fractions entre 0 et 1..... 10

Figure 1.5 : Variation de l'enthalpie en fonction de température pour les deux cas de changement de phase (iso-thermique et non iso-thermique) 11

Figure 2.1 : différentes microstructures de l'interface liquide/solide..... 19

Figure 2.2 : (a) variation de réponse de cellule soumise à différents taux de refroidissement, (b) relation caractéristique entre le taux de refroidissement et la survie de cellule 28

Figure 2.3 : Domaine de changement de phase 30

Figure 3.1 : schématisation des deux références de coordonnées : cartésien et axisymétrique pour le domaine Ω 33

Figure 3.2 : fonctions de forme pour le nœud i 36

Figure 3.3 : solution de problème de convection diffusion 1D 38

Figure 3.4 : Fonction de pondération dans la méthode de Galerkine et la méthode SUPG pour un élément linéaire 38

Figure 3.5 : Solution du problème de convection-diffusion 1D par la méthode MEF stabilisée..... 39

Figure 3.6 : longueur caractéristique dans la direction d'advection..... 40

Figure 3.7 : élément triangulaire..... 44

Figure 4.1 : problème de convection diffusion stationnaire 58

Figure 4.2 : maillage 59

Figure 4.3 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$; Ste=0.5)..... 60

Figure 4.4 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$, Ste=1)..... 61

Figure 4.5 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$, Ste=10)..... 61

Figure 4.6 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 4$, $Ste = 1$..... 63

Figure 4.7 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 10$, $Ste = 1$..... 63

Figure 4.8 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 30$, $Ste = 1$..... 64

Figure 4.9 : Distribution de la température pour différents instants (400s, 800s et 1200s)..... 66

Figure 4.10 : Schématisation verticale du moulage continu [52] 68

Figure 4.11 : Valeurs du coefficient effectif du transfert thermique 71

Figure 4.12 : Variation de la température dans différentes positions (r=0, r=0.0619 et r=R), (a) comparaison entre les résultats obtenus par Korti, Weckmane et les valeurs expérimentales [55], (a') nos résultats numériques 72

Figure 4.13 : Flux thermique à la surface du moule, (b) comparaison entre les résultats obtenus par Korti et ceux de Weckman, (b') nos résultats numériques 73

Figure 4.14 : Comparaison de champs de température obtenue pour différentes vitesse de coulé (0.00381 m/s, 0.00254 m/s, 0.00163 m/s) obtenue par Korti et Khadraoui (a, b, et c), et par le présent algorithme (a', b' et c')..... 75

Figure 4.15 : effets de la vitesse de moulage U_s sur la température extérieure, comparaison entre les résultats de [52] (a1) et nos valeurs numériques (a1')..... 76

Figure 4.16 : effet de la vitesse de moulage U_s sur le flux thermique à la surface extérieure, comparaison entre les résultats de [52] (b1) et nos valeurs numériques (b1') 77

Figure 4.17 : Représentation schématique du problème de traitement de cancer de poumon par cryochirurgie..... 79

Figure 4. 18 : fronts de changement de phase au cours de congélation des tissus (tumeur et poumon) à $y = 2\ cm$ 80

Figure 4.19 : distributions de température dans les tissus au cours de congélation 81

Liste des tableaux

Tableau 4.1 : comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents nombres de Stefan ($Ste = 0.5, 1\ et\ 10$), $Pe = 2$ 62

Tableau 4.2 : Comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents nombres de Peclet ($Pe = 4, 10\ et\ 30$) $Ste = 1$ 64

Tableau 4.3 : propriétés thermo-physique de l'Aluminium 65

Tableau 4.4 : Comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents instants (400s, 800s, 1200s) 66

Tableau 4.5 : paramètres opérationnels de la machine de coulée 69

Tableau 4.6 : Paramètres thermo-physiques de l'alliage A6063 Al-Mg 70

Tableau 4.7 : propriétés thermo-physiques des tissus [44] 79

Sommaire

Introduction Générale 1

Chapitre I Etude bibliographique

1. Modélisation de la solidification 4

1.1. Modèles d'interface pointue 4

1.2. Modèles d'enthalpie 10

1.3. Modèles de phase de champs 14

2. Application de la modélisation de processus de solidification dans le moulage des métaux 15

3. Application au domaine de la cryochirurgie 16

4. Objectif du travail 17

Chapitre II Formulation de problème de solidification

1. Phénomènes physiques au cours de processus de changement de phase liquide/solide 18

1.1. Transfert thermique et de masse 19

1.2. Variation de la température de changement de phase 20

1.3. Super-refroidissement 20

1.4. Variation des propriétés thermo-physiques 21

1.5. Variation de la densité 21

2. Hypothèses simplificatrices 22

3. Méthode d'enthalpie 22

4. Changement de phase iso-thermique 24

5. Changement de phase non iso-thermique (avec zone étroite) 25

6. Traitement de cancer de poumon par congélation cryogénique 26

6.1. Destruction des cellules de tissu sous les conditions cryogéniques 27
6.2. Modèle de changement de phase dans un tissu biologique 28
6.3. Formulation mathématique par la méthode d'enthalpie 29

Chapitre III Discrétisation par MEF et traitement algorithmique

1. Formulation de problème de changement de phase 33
2. Discrétisation par la méthode des éléments finis (MEF) 35
2.1. Problème de convection-diffusion stationnaire 35
2.1.1. Méthode de stabilisation 36
2.1.2Paramètre de stabilisation 39
2.1.3. Schéma SUPG des éléments finis 40
2.1.4. Linéarisation relaxée 42
2.1.5. Forme discrète 44
2.1.6. Algorithme de résolution 48
2.2. Problème de conduction instationnaire 48
2.2.1. Linéarisation relaxée 50
2.2.2. Forme discrète 51
2.2.3. Algorithme de résolution 54
3. Configuration de maillage 55
4. Organigrammes de calcule 56
4.1. Cas de convection diffusion stationnaire 56
4.2. Cas de conduction instationnaire 57

Chapitre IV Applications, résultats et discussion

1. Tests de validation 58
1.1. Problèmes de convection-diffusion stationnaire 58

Rapport-Gratuit.com

1.1.1. Influence du nombre de Stefan 59

1.1.2. Influence du nombre de Peclet 62

1.2. Problèmes instationnaire 65

2. Exemple d'application 68

2.1. Problème de moulage continu avec un refroidissement par nucléation 68

2.1.1. Résultats et discussion 71

2.2. Problème de congélation de tissu de cancer de poumon au cours de la cryochirurgie 77

2.2.1. Résultats et discussions 80

Conclusion Générale 83

Références bibliographiques 84

ANNEXE 88

Introduction Générale

Au cours des deux dernières décennies, la simulation numérique des phénomènes de changement de phase liquide/solide a été un sujet stratégique de recherche grâce à son vaste champ d'application dans les différents domaines industriels et médicaux, comme le domaine d'élaboration des matériaux et le traitement par la cryochirurgie.

A cause de la nature complexe des phénomènes de changement de phase liquide/solide, il y a trois sources des difficultés dans la simulation numérique. La première source est la non-linéarité des systèmes des équations différentielles gouvernant les phénomènes de changement de phase et qui varient dans le temps et dans l'espace. Deuxièmement, la création des fronts mobiles au cours de changement de phase avec une discontinuité de gradient de température où leurs positions et leurs mouvements entrent dans le processus de simulation. Troisièmement, la nécessité de choisir des techniques de calcul précises, fiables et inconditionnellement stable pour obtenir la solution numérique des équations différentielles associées.

A cause de la non-linéarité des équations différentielles et la présence des fronts mobiles caractérisés par des discontinuités dans le gradient de température au cours de changement de phase, l'utilisation des méthodes numériques comme les différences finis, les volumes finis et les éléments finis basées sur le schéma de Galerkine exige une adaptation du modèle mathématique, soit par l'introduction des variables additionnelles, soit par l'ajout des équations supplémentaires au problème étudié.

Ces modèles mathématiques appartiennent à deux grandes familles. La première famille consiste à introduire l'enthalpie comme variable additionnelle à l'équation d'énergie pour prendre en compte le dégagement ou l'absorption de la chaleur latente de changement de phase, ce qui élimine l'imposition explicite de la condition de température au niveau de l'interface d'une part, et le suivi de mouvement de front d'un autre part. La deuxième famille se manifeste dans la solution de problème de

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

changement de phase comme un problème à frontière mobile où la position de l'interface doit être calculée comme étant un élément de calcul. Ce type des modèles sont basés essentiellement sur le modèle de Stefan où l'équation d'énergie est définie en chaque phase avec la prise en considération de la température de fusion/solidification et la condition de Stefan en niveau d'interface. La procédure de calcul dans cette famille repose sur l'actualisation et la déformation de maillage d'une façon itérative jusqu'à la coïncidence avec l'interface.

Il y a des inconvénients inhérents pour chaque ces deux familles. Avec les modèles de frontière mobile, il y a le problème de génération de maillage pour les géométries complexes et les problèmes de multi-fronts. Par contre, pour le modèle d'enthalpie, il n'y a pas la nécessité d'actualisation de maillage. Cependant ces méthodes ne peuvent pas simuler précisément le changement de phase isotherme des matériaux purs du à la zone numérique étroite (mushy zone) introduite comme conséquence de l'élimination d'imposition de condition de la température constante à l'interface.

Plusieurs techniques ont été introduites pour simuler le changement de phase iso-thermique par la méthode d'enthalpie. L'une de ces techniques a été proposée par Nedjar [38] qui a utilisé une formulation discrète itérative qui s'adapte bien aux deux situations de changement de phase (iso-thermique et non iso-thermique).

Dans ce travail, on a proposé de modéliser le phénomène de solidification au cours de processus de moulage continu et le phénomène de congélation de cancer de poumon au cours de traitement par cryochirurgie en utilisant la méthode d'enthalpie basée sur l'algorithme de Nedjar [38] et la méthode MEF. Le modèle a été adapté pour les deux configurations 2D : axisymétrique dans le cas de moulage continu, et cartésien dans le cas de congélation de tissu de cancer de poumon. Un solveur numérique en MATLAB a été développé et testé par rapport aux solutions analytiques des problèmes 1D dans les deux cas : convection-diffusion stationnaire et conduction instationnaire

Le travail est réparti en quatre chapitres :

- Le premier chapitre présente une étude bibliographique sur les différentes approches de modélisation de phénomène de changement de phase

liquide/solide ainsi que la méthode d'enthalpie et son application générale dans les problèmes de solidification.

- Le deuxième chapitre présente les concepts généraux de la méthode d'enthalpie dans les deux cas de changement de phase (isotherme et non isotherme). Il discute le mécanisme de changement de phase dans un tissu biologique et fournit la formulation de congélation cryogénique de tissu poumon.
- Le troisième chapitre présente le développement de la discrétisation des deux problèmes de changement de phases : convections-diffusion stationnaire et conduction instationnaire par la méthode MEF basé sur l'algorithme itératif de Nedjar pour les cas : cartésien et axisymétrique. Il présente ainsi les organigrammes de programmation.
- Le quatrième chapitre examine la validité du modèle en traitant des problèmes 1D dans le cas de convection diffusion stationnaire et conduction instationnaire. Il traite aussi deux types d'applications 2D (cartésien et axisymétrique) avec différentes conditions aux limites.

Chapitre I

Etude bibliographique

Chapitre II

Formulation de problème de solidification

Chapitre III

Discrétisation par MEF et traitement algorithmique

Chapitre IV

Applications, résultats et discussions

Ce chapitre présente une étude bibliographique sur les différentes approches de modélisation des phénomènes de changement de phase liquide/solide avec les différentes techniques de résolution. Il donne aussi les avantages et les inconvénients de chaque approche. Une étude bibliographique sur la méthode d'enthalpie et les techniques numériques associées dans les deux cas de changement de phase : iso-thermique et non iso-thermique a été faite.

1. Modélisation de la solidification

Au point de vue macroscopique, la solidification est un phénomène de changement de phase liquide/solide qui se caractérise par l'apparition d'une interface mobile qui sépare les deux phases (liquide et solide), ainsi qu'une discontinuité dans le gradient de température du au changement de phase et au dégagement de la chaleur latente. L'interface mobile au cours de solidification est considérée comme un front ou une frontière interne mobile dans le domaine solidifié, ce qui ramène la solidification à *un problème de frontière mobile.* Le premier travail sur la modélisation des phénomènes de changement de phase liquide/solide revient à Lame et Clapeyron [1] en 1831. La solidification est considérée largement dans la littérature comme un **problème de Stefan.** Cette appellation a été attribuée suite aux travaux du fameux chercheur Stefan ([2],[3]) qui a étudié le problème de fusion et de congélation d'eau en 1890. C'était le premier travail de modélisation du phénomène de changement de phase liquide/solide.

Les modèles mathématiques dans la littérature qui décrivent le phénomène de solidification sont essentiellement basés sur l'équation de la conduction de la chaleur, ils sont classifiés en trois catégories : modèles d'interface pointue (sharp interface models), modèles enthalpiques (enthalpy models) et modèles de phase de champ (phase field models) [4].

1.1. Modèles d'interface pointue

Pour le cas des modèles d'interfaces pointues, on suppose que les deux phases liquide-solide sont séparées par une interface qui est une courbe ou une

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

surface infiniment épaisse. Dans cette approche, les deux phases suivent le même modèle mathématique avec une condition fournie par Stefan qui décrit le dégagement instantané de la chaleur latente et traduit l'équilibre d'énergie au niveau de l'interface mobile. En résolvant les modèles d'interface pointues (modèles de Stefan), la difficulté vient du fait que la position d'interface doit être calculée en tant qu'élément du processus de la solution [5] où la majorité des cas n'ont pas une solution analytique et exige une solution numérique.

Concernant les solutions analytiques du modèle de Stefan, plusieurs études pour le cas 1D ont été faites, à commencer par le travail de Neumann qui a étendu le problème de Stefan à deux phases, en considérant le phénomène de fusion dans un domaine semi-infini, initialement à l'état solide (voir figure .1) [6]. La solution analytique de Neumann donne la position de l'interface à chaque instant ainsi que la distribution de la température de chaque phase. Une autre solution analytique a été proposée par Paterson dans le cas de fusion 1D en coordonnées cylindriques (figure .1) où les solutions présentent la position du front et le profil de température.

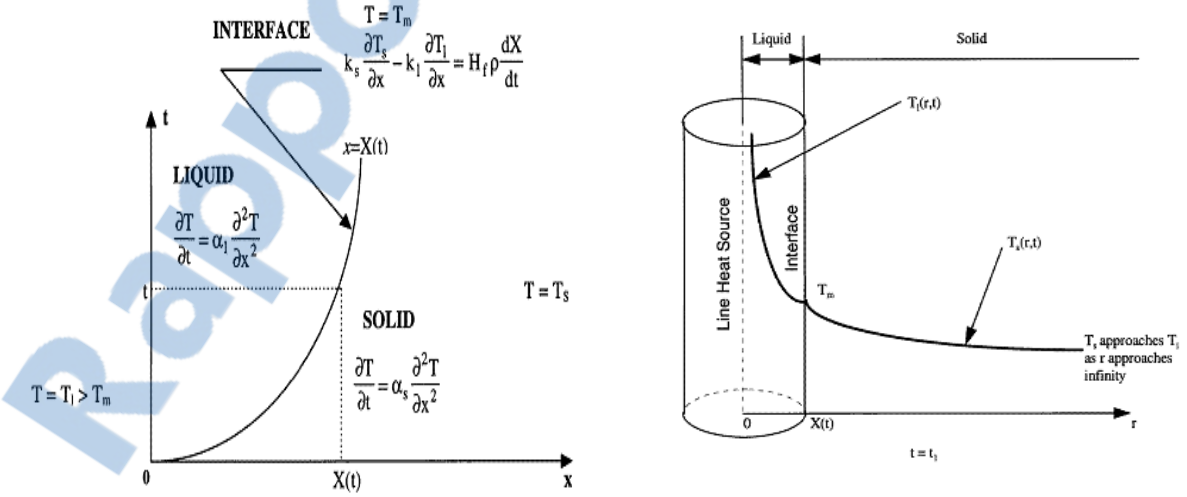


Figure .1 : schémas des deux cas semi-infinis (plane et cylindrique) [6]

Rapport-Gratuit.com

D'autres solutions analytiques sont basées sur la méthode « heat balance integral », avec des flux imposés comme conditions aux limites. L'une de ces solutions est présentée dans le travail de Goodman qui a développé une équation intégrale qui exprime l'équilibre thermique global du système en intégrant l'équation unidimensionnelle de conduction de chaleur. Cette méthode a été utilisée pour résoudre le problème monophasé de fusion de glace avec différents types de conditions aux limites. Goodman et Shea ont appliqué cette méthode à des problèmes de fusion en considérant les deux phases dans un domaine fini (figure .2) [6]. Ils ont déterminé la position du front de fusion ainsi que la distribution de température dans les deux portions (liquide et solide).

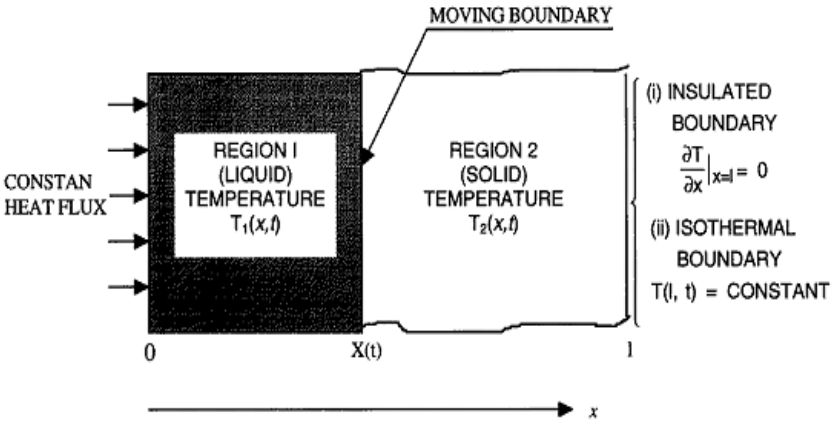


Figure .2 : problème de fusion étudié par Goodman et Shea [6]

Généralement, les solutions analytiques pour les modèles de Stephan restent très limitées pour des cas 1D avec des conditions aux limites et des propriétés thermo-physiques constantes, et ce contrairement aux situations pratiques où les conditions aux limites et les propriétés thermo-physiques sont variables et multiples ainsi que les géométries sont multidimensionnelles et irrégulières, ce qui nécessite des techniques numériques puissantes pour les étudier.

Vu le mouvement de l'interface et la représentation explicite de la condition de changement de phase, les modèles d'interface pointue (sharp interface model)

exige des technique de détection et de suivi du mouvement de l'interface (front tracking technics).

Les techniques d'approximation d'interface mobile ont été bien avancées au cours des deux dernières décennies et elles influent considérablement sur l'évolution de plusieurs disciplines stratégiques d'ingénierie comme l'élaboration des matériaux (moulage et soudage), les écoulements multiphasiques, la propagation des flammes … etc.

Les techniques d'approximation d'interface mobile sont classifiées essentiellement en deux catégories : méthodes de suivi d'interface (front tracking methods) et les méthodes de détection d'interface (front capturing methods) [7]. La différence entre ces deux méthodes, est que les méthodes de suivi d'interface sont lagrangiennes et le maillage représente l'interface explicitement, tandis que les méthodes de détection d'interface sont eulériennes, l'interface est définie implicitement dans un maillage fixe.

Dans les méthodes de suivi du front, l'interface solide/liquide est dépistée continuellement. Les deux domaines liquide et solide sont traités séparément et par conséquence ces méthodes sont appelées aussi des méthodes des deux domaines ou multi-domaines. Le dégagement de la chaleur latente est traité comme une condition à la limite liée aux domaines solide et liquide [8].

L'une des techniques les plus simples pour suivre un front est d'ajuster itérativement la position du nœud près de l'interface liquide/solide. Pour les interfaces solide/liquide planes, il est possible d'ajuster le pas de temps pour que l'interface coïncide toujours avec les nœuds. Rubinsky et Carvahlo [9] ont introduit un nœud additionnel à l'interface pour diviser l'élément qui contient les deux phases en deux éléments à chaque phase. Askar [10] a résolu des problèmes de congélation en utilisant des éléments unidimensionnels quadratiques, il a adapté l'élément qui coïncide avec l'interface en ajoutant un nœud à la position du front.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Pour des problèmes bidimensionnels, le suivi d'interface exige des techniques spéciales comme le changement des variables, adaptation de maillage, qui est continuellement déformé, et l'utilisation des éléments finis spatiaux temporels. Ettouney et Brown [11] ont résolu des problèmes stationnaires de solidification, dans le cas de croissance des cristaux, en transformant le domaine de calcul où l'interface possède une forme connue, par une procédure itérative dans le nouveau système de coordonnées. Lynch et O'Neill [12] ont utilisé des éléments finis déformables pour suivre l'interface sans remaillage avec une interpolation de la solution après chaque pas de temps. Cependant, un mouvement très important du front provoque une distorsion des éléments et exige une adaptation dans des plages régulières [13]. Yoo et Robinsky [14, 15] ont déterminé la position de l'interface et le champ de température simultanément en remaillant le domaine à chaque pas de temps. Carey et McLay [16] ont ajusté les coordonnées des nœuds d'interface à la fin de chaque pas de temps pour suivre le front où un remaillage est obligatoire dans des intervalles réguliers pour éviter la déformation excessive des éléments près de l'interface. Bonnerot et Jamet [17] ont résolu des problèmes bidimensionnels par des éléments finis spatiaux temporels. Shamsundar et all [18] ont utilisé des éléments finis spatiaux temporels quadratiques à quatre nœuds pour modéliser le problème de changement de phase unidimensionnel.

Parmi les techniques récentes utilisées pour suivre les interfaces mobiles, on cite la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian method) [19, 20], les méthodes des points de marqueur (marker methods) qui sont des méthodes lagrangiennes (voir figure. 3) [21].

Les méthodes de suivi de front ont les avantages suivants :

(1) Une prédiction précise de la position d'interface.
(2) Un traitement précis du dégagement de la chaleur latente.

Cependant, elles possèdent les inconvénients suivants :

(1) Elles exigent habituellement des techniques spéciales de programmation

(2) Elles ne sont pas appropriées pour la solidification des alliages

(3) Elles sont applicables seulement pour des géométries à interfaces simples, les problèmes avec multiples interfaces ne peuvent pas traiter par la majorité des techniques de suivi de front.

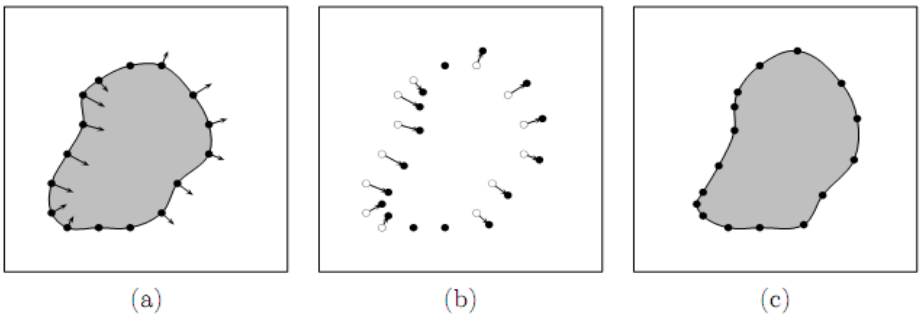


Figure. 3 : Illustration de la méthode des points de marqueur, (a) des marqueurs (points) représente la position de l'interface, (b) à chaque pas de temps chaque marqueur se déplace avec une vitesse spécifique à une nouvelle position, (c) l'interface et sa nouvelle position.

Concernant les techniques de détection de front, une fonction auxiliaire est exigée pour représenter l'interface (représentation implicite). Ces méthodes sont très robustes et elles sont largement appliquées, non seulement dans le domaine de solidification, mais à d'autres problèmes. Parmi ces méthodes de détection d'interface on cite la méthode VOF (volume of fluids method) (voir figure. 4) [22, 23] et la méthode Level Set [24, 25].

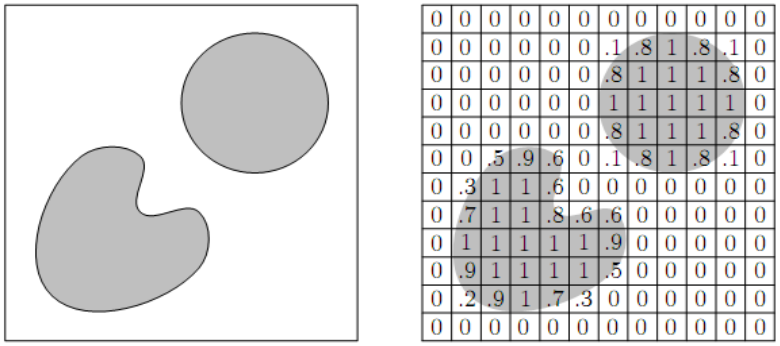


Figure. 4 : Illustration de la méthode VOF, (a) interfaces entourant des domaines physiques, (b) positions d'interfaces caractérisées par des cellules avec des fractions entre 0 et 1.

La méthode Level set est une méthode de détection d'interface, elle est considérée parmi les techniques les plus puissantes pour détecter les fronts mobiles et elle partage avec les modèles d'enthalpie et les modèles de champs de phase l'avantage d'un maillage fixe.

1.2. Modèles d'enthalpie

La deuxième catégorie des modèles qui décrivent la solidification se présente dans les modèles d'enthalpie qui sont l'objet de ce travail. Dans ces modèles, l'équation d'énergie est écrite en fonction de l'enthalpie et de la température où l'évolution de la chaleur latente est prise pour établir une relation entre l'enthalpie et la température [6, 8]. La méthode peut s'expliquer, en considérant un problème de changement de phase basé sur l'équation de conduction de la chaleur :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla . (k \nabla T) \qquad (1)$$

où h est l'enthalpie par unité de masse. Les modèles qui sont complètement enthalpiques traitent l'enthalpie comme une valeur nodale et repose, soit sur des méthodes explicites, soit sur des méthodes implicites itératives pour résoudre

l'équation (1). L'évaluation de la température s'effectue en utilisant la relation $h(T)$ selon le cas étudié :

Changement de phase iso-thermique (cas de métaux pures):

$$h = \begin{cases} c_s T & T \leq T_m \quad phase\ solide \\ c_l T + H_f & T > T_m \quad phase\ liquide \end{cases} \tag{2}$$

Changement de phase non-iso thermique :

$$h = \begin{cases} c_s T & T < T_s \quad phase\ solide \\ \int c_{in} T + \frac{H_f (T - T_s)}{(T_l - T_s)} & T_s \leq T \leq T_l \quad phase\ solide/liquide \\ \int c_l dT + H_f + c_{in}(T_l - T_s) & T \geq T_l \quad phase\ liquide \end{cases} \tag{3}$$

La relation entre l'enthalpie et la température peut être définie en termes des caractéristiques de la chaleur latente de changement de phase du matériau. Cette relation est habituellement supposée comme une fonction de pas pour les problèmes avec changement de phase iso-thermique, et une fonction linéaire dans les cas de changement de phase non iso-thermique (voir figure. 3).

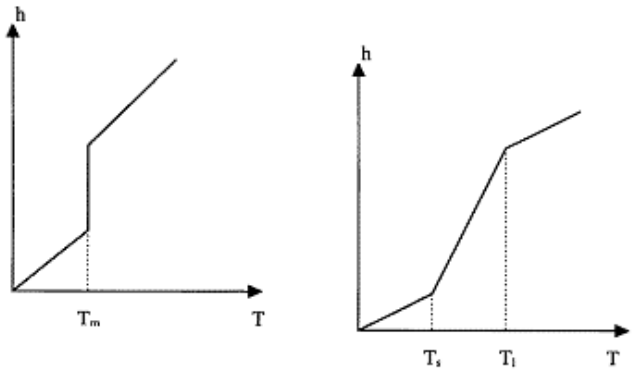


Figure .5 : Variation de l'enthalpie en fonction de température pour les deux cas de changement de phase (iso-thermique et non iso-thermique)

Les modèles enthalpiques permettent d'éviter le suivi du front. Le maillage de calcul reste fixe et la condition de changement de phase au niveau d'interface

n'est pas imposée. Ces modèles introduisent généralement une zone étroite (mushy zone) entre les deux phases liquide et solide, ce qui élimine la nature de front dans les modèles de Stefan. Le concept de fraction a été introduit dans la zone étroite (mushy zone) pour prendre en compte la présence d'une mixture des deux phases liquide et solide [4]. L'inconvénient de ces modèles par rapport au modèle d'interface pointue (sharp interface models) se présente bien dans les problèmes de solidification ou fusion des métaux purs où le changement de phase s'effectue très rapidement et à température constante, ce qui nécessite des techniques spéciales pour éliminer les instabilités numériques au niveau du front.

L'approche d'enthalpie a été proposée par Eyres et al [26] pour éviter la non-linéarité dans l'équation de conduction de chaleur. La première application de la formulation d'enthalpie associée à la méthode des différences finis a été effectuée par Rose [27]. Shamsunder et Sparrow [28] ont utilisé un schéma implicite pour résoudre le problème de solidification dans une géométrie rectangulaire avec des conditions aux limites de type convection. Leurs prédictions ont été validées par des résultats obtenus par la même approche mais en utilisant le schéma de Crank-Nicholson. Bell et Wood [29] ont évalué la performance de la méthode d'enthalpie en utilisant un modèle unidimensionnel de Stefan pour la fusion d'un solide semi-infini, initialement à la température de fusion et avec une température très élevée dans une extrémité. Une approximation par des séries trigonométriques a été employée pour les points de maillage au voisinage du front. Une bonne concordance a été obtenue par rapport à la solution analytique donnée par Carslaw et Jaeger [30]. Il a été démontré que leur formulation est meilleure que celle basée sur la méthode des différences finis standard mais avec un cout de calcul élevé. Poirier et Salcudean [31] ont montré que la méthode d'enthalpie est plus complexe et plus chère que les autres méthodes car le coût de calcul augmente avec le raffinement de maillage. Les oscillations numériques apparaissent dans le cas de changement de phase avec un rapport important entre la chaleur latente et la chaleur sensible (Nombre de Stefan). Cependant, la méthode d'enthalpie donne

des solutions plus précises pour les problèmes de solidification des métaux dans le cas où le changement de phase s'effectue avec une zone étroite (alliages). Tacke [32] a proposé une technique de discrétisation pour la méthode d'enthalpie basée sur une distribution linéaire de température entre l'interface et les nœuds adjacents, la position de front est donnée par l'équation suivante :

$$h_i = H_f\lambda + c_l(T_e - T_m)\lambda - c_s(T_m - T_w)(1-\lambda) \quad (4)$$

Où λ est la fraction liquide dans le volume de contrôle. Cette équation permet d'éliminer les oscillations numériques dans la position de front et améliore d'une façon remarquable les résultats particulièrement pour des rapports importants entre la chaleur latente et la chaleur sensible (Nombre de Stefan).

Une discussion de la méthode d'enthalpie a été faite d'une façon compréhensive par Voller et son collaborateur [33]. Il s'est avéré que la méthode d'enthalpie ne s'adapte pas bien avec la modélisation des problèmes de changement de phase iso-thermiques. Voller a proposé une technique pour améliorer la précision de la prédiction ; comme le front de solidification est dans un volume de contrôle, il a supposé que, le taux de changement d'enthalpie est proportionnel au taux de changement d'état de volume de contrôle, où on peut écrire :

$$\frac{dH_i}{dt} = \pm H_f \frac{d\lambda}{dt} \quad (5)$$

λ est la fraction liquide dans le volume de contrôle ; le signe négatif dans l'équation (5) est pour la fusion et le signe positif est pour la solidification. Puisque le matériau de volume de contrôle subisse un changement de phase, l'enthalpie de volume de contrôle doit respecter la relation ci-dessous :

$$cT_m \leq h_i \leq cT_m + H_f \quad (6)$$

en se basant sur l'équation (5), on peut obtenir :

$$\begin{cases} \lambda = \frac{h_i - cT_m}{H_f} & pour\ la\ solidification \\ \lambda = \frac{H_f + cT_m - h_i}{H_f} & pour\ la\ fusion \end{cases} \quad (7)$$

Pour un système des coordonnées cartésiennes, la fraction liquide λ dans le volume de contrôle est égale à 0.5 quand le front atteint un point de maillage. En remplaçant cette valeur dans les équations (5) et (6), on obtient :

$$h_i = cT_m + 0.5\ H_f \tag{8}$$

Pour les deux cas de fusion et de solidification, des expressions analogues peuvent être obtenues pour les autres systèmes des coordonnées

Dans un contexte de la méthode des éléments finis, Cames-Pintaux et Nguyen-Lamba [34] ont utilisé la méthode d'enthalpie pour le changement de phase iso-thermique. Pham [35] ont montré que l'utilisation de la méthode de matrice de capacitance en bloc (lumped capacitance matrix) associée la méthode d'enthalpie est plus précise que les autres méthodes à maillage fixe. Tamma et all [36] ont utilisé la méthode des éléments finis avec un schéma explicite. Thevoz et al [37] ont utilisé un schéma implicite.

Un autre algorithme basé sur la méthode des éléments finis a été proposé récemment par Nedjar [38] pour surpasser les difficultés dans le cas de changement de phase iso-thermique. Cet algorithme s'adapte bien au cas de changement de phase même en présences des non linéarités. L'algorithme est basé sur la procédure itérative de Newton dans les deux cas stationnaire est instationnaire avec une discrétisation de terme temporel par la méthode différence finis. Les techniques de stabilisation des oscillations au voisinage de front ne sont pas nécessaires dans le cas iso-thermique. Cet algorithme fait l'objet de notre mémoire où le détail de l'algorithme se trouve dans le chapitre

1.3 Modèles de phase de champs

La troisième catégorie des modèles mathématiques qui décrivent le phénomène de changement de phase sont appelées les modèles de phase de champ (phase field models). Ces modèles sont basés sur le travail de Cahn et Hilliard [39]. Dans cette approche l'interface pointue est remplacée par une interface lisse ou une région lisse de transition entre les deux phases solide et liquide. Le modèle

mathématique de la méthode de phase de champ est dérivé à la base de la théorie de transition de phase de Landau-Ginzburg [40]. Cette méthode est basée sur la spécification de la fonction de densité d'énergie libre, qui est la force motrice principale de transition de phase et elle montre une bonne concordance avec les problèmes 1D de Stefan. Puisque la méthode de phase de champs élimine la nécessité de calcul à la base des interfaces pointues et le suivi de leurs mouvements ; les principaux inconvénients de cette méthode sont :

(1) pour le problème donné, cette méthode exige la détermination de la fonction de densité de l'énergie à l'avance.
(2) Le modèle mathématique pour cette approche est incapable de simuler l'initiation de l'interface liquide-solide ; or la majorité des situations pratiques exigent la connaissance de cette interface.

La limitation des modèles de phase de champ est due à la nature spécifique de la fonction densité d'énergie libre.

2. Application de la modélisation de processus de solidification dans le moulage des métaux

Dans les dernières années, la modélisation de solidification des moulages a reçu de plus en plus une attention considérable due à son potentiel énorme dans l'amélioration de la productivité de l'industrie de moulage des métaux en réduisant le cout et le temps de travail comparé aux techniques traditionnelles de moulage basées sur l'expérimentation dans le cas des moules permanant où le prototype peut être extrêmement cher. La modélisation numérique de la solidification des moulages a trouvé aussi son application dans le domaine de la prothèse, elle est considérée comme un outil fiable pour l'optimisation et l'empêchement des défauts dans les dents ([41], [42]).

La simulation de la solidification des moulages représente une base utile pour la prédiction des configurations de solidification et les défauts des pièces moulées. Le procédé de moulage est très difficile à modéliser, cela est du aux phénomènes physiques complexes impliqués dans la modélisation comme la

Rapport-Gratuit.com

convection naturelle de l'état liquide au cours de changement de phase, le rétrécissement, la porosité, la macro-ségrégation dans les alliages, le transfert thermique entre le moule et la pièce moulé et les contraintes thermomécaniques dans le lingot. Un autre facteur très complexe à contourner aussi réside dans le fait que les moules ont pratiquement des géométries compliquées et qui exigent des modélisations 3D. Un accord qualitatif des simulations avec les données expérimentales est aussi mentionné dans la littérature avec des temps de simulation qui sont énormément importants [43]. La majorité des simulations numériques des procédés de moulages se trouvant dans la littérature sont accomplies en utilisant la méthode des éléments finis [8].

3. Application au domaine de la cryochirurgie

La cryochirurgie apparue en 1961 pour la première fois est caractérisée par l'utilisation des cycles de congélation/dégel et qui avait pour l'objectif de détruire le tissu. La procédure de la cryochirurgie a trouvé plusieurs domaines d'application liés aux traitements de la croissance des tumeurs cancéreuses : le cancer de foie, le cancer du sein, le cancer de peau, la maladie de Parkinson, le cancer de rein, du cerveau anormal, la croissance cervicale, et le cancer de poumon. La cryochirurgie est souhaitable en raison de ses avantages médicaux et économiques comprenant le bas saignement, les bons résultats esthétiques, l'utilisation minimale des anesthésiques, la période courte du rétablissement, et les bas coûts procéduraux.

La cryochirurgie est basée sur l'utilisation des sondes cryo-chirurgiques insérées dans le corps du patient dans certains points choisis où se trouve la tumeur. Les cryo-sondes sont des petits appareils cylindriques creux (2-10 mm de diamètre) où un fluide cryogénique (le nitrogène liquide) s'écoule avec un débit contrôlé.

L'objectif de la cryochirurgie est de congeler et détruire complètement le tissu de tumeur avec une destruction minimale de la zone saine de tissu [44]. Le

degré de succès d'un procédé cryo-chirurgique dépend d'un certain nombre de facteurs tels que la plus basse température réalisée, le taux de refroidissement pendant la congélation, le taux de dégel qui suit le procédé de congélation, le placement de la sonde, le nombre des cycles répétés de congélation/ dégel, et le taux de refroidissement dans le front de congélation. Comme exemple, il est observé que la forme et la taille des boules congelées est considérablement affectée par le placement des cryo-sondes [45]. Une l'étude analytique et numérique de la cryochirurgie appliquée au cancer des poumons a été faite par Bischof, Bastacky et Rubinsky en 1992. Ils ont a indiqué que le front de congélation s'accélère, il part de la tumeur et entre dans le tissu sain environnant de basse densité. Par conséquent, la surveillance, le contrôle et la linéarisation des paramètres impliqués sont essentiels. Dans cette situation, la simulation numérique des cycles de congélation/dégel peut jouer un rôle très important.

4. Objectif du travail

L'objectif de ce mémoire est de développer un modèle éléments finis basé sur le modèle d'enthalpie et utilisant l'algorithme de Nedjar [38].Le modèle d'enthalpie s'est avéré pertinent pour étudier les cas de changement de phase (iso-thermique et non iso-thermique). La programmation est faite dans un environnement MATLAB.

Ce travail nous a permis d'étudier la solidification dans les cas, linéaire et non-linéaire, convection-diffusion stationnaire et conduction instationnaire, dans le 2D et axisymétrique.

Ce travail a été sur un ensemble de cas tests.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Dans ce chapitre, nous donnons la formulation mathématique du problème de solidification, basé sur la méthode d'enthalpie dans les deux cas de changement de phase : iso-thermique et non iso-thermique avec les hypothèses simplificatrices. Le mécanisme de changement de phase dans un tissu biologique a été discuté ainsi que la formulation de congélation cryogénique d'un tissu de poumon.

1. Phénomènes physiques au cours de processus de changement de phase liquide/solide

Les deux phases solide et liquide sont caractérisées par la présence des forces de cohésion qui maintiennent les atomes en grande proximité. Dans un solide, les molécules vibrent autour des positions fixes d'équilibre, tandis que dans un liquide, les molécules sont libres et peuvent bouger entre ces positions. La manifestation macroscopique de cette énergie vibrationnelle est appelée « *énergie thermique* ». Les atomes dans la phase liquide sont plus énergétiques que dans la phase solide. Le phénomène de fusion de solide nécessite une certaine quantité d'énergie pour surpasser les forces de cohésion qui maintiennent la structure solide. Cette énergie est connue sous le nom de « *chaleur latente de fusion* » du matériau et qui représente la différence dans les niveaux d'enthalpie entre l'état solide et liquide. La solidification d'un liquide exige l'enlèvement de cette chaleur latente et la structuration des atomes dans des réseaux plus stable [46].

La région de transition de phase où les deux phases solide et liquide coexistent est appelée l'interface. L'épaisseur de cette région peut varier de quelques angströms à quelques centimètres et sa microstructure est très complexe. Pour la majorité des matériaux purs, avec des conditions ordinaires de solidification à une température fixe T_f, l'interface apparait localement sous une forme planaire avec un épaisseur négligeable et peut être considérée comme une interface pointue (surface) séparant la phase solide de la phase liquide à une température T_f. Dans les autres cas, la région de transition de

phase peut avoir une épaisseur apparente connue comme « *la zone étroite* » ; cette région résulte typiquement d'un super-refroidissement du à la présence des composants multiples (alliages), et sa microstructure peut apparaitre comme étant dendritique (voir figure 2.1).

Plusieurs mécanismes existent au cours de changement de phase liquide/solide. Ce type de changement de phase implique le transfert de masse et de chaleur, le super-refroidissement, l'absorption ou le dégagement de la chaleur latente, la variation des propriétés physiques et les effets de surface, … etc. [46].

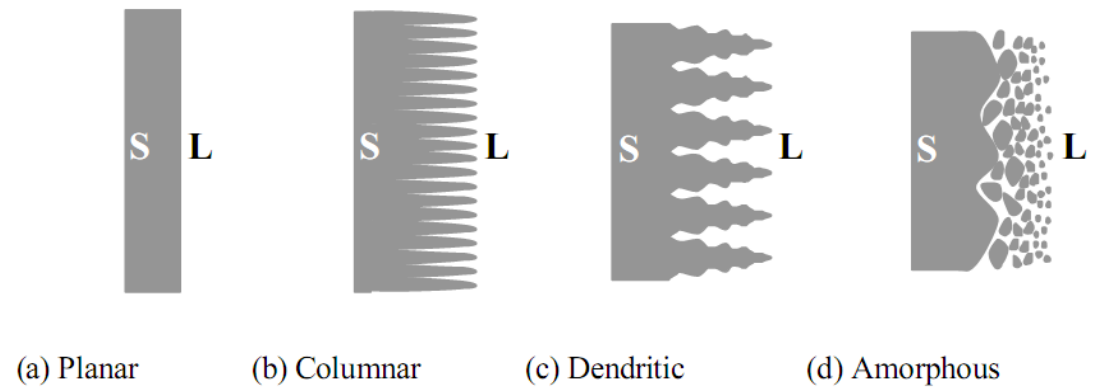


Figure 2.1 : différentes microstructures de l'interface liquide/solide.

1.1. Transfert thermique et de masse

Il existe trois modes de transfert thermique dans un matériau : conduction, convection et rayonnement. La conduction est le transfert de l'énergie cinétique entre les atomes par collision et par mouvement des électrons où il n'y a pas un écoulement ou transfert de masse de matériau ; c'est le cas du transfert thermique dans les solides opaques. Dans le cas des liquides, le transfert de chaleur s'effectue par écoulement des particules ou par convection. Le

rayonnement est le seul mode qui peut apparaitre dans le vide (il ne nécessite pas la participation d'un support matériel).

1.2. Variation de la température de changement de phase

La transition d'une phase à une autre, qui se manifeste par l'absorption ou le dégagement de la chaleur latente, apparait à une certaine température T_f dont la stabilité d'une seule phase se décompose en faveur de l'autre selon l'énergie disponible. Ce changement de phase dépend de la pression. Pour une pression constante, T_f est une constante caractéristique du matériau (par exemple, 0 ℃ pour la congélation d'eau pure sous la pression atmosphérique), ou une fonction d'autres variables thermodynamiques (par exemple, en fonction de concentration de glycol dans les mélanges anti-congélation).

1.3. Super-refroidissement

La majorité des solides ont une structure cristalline où les particules (atomes, molécules ou ions) sont arrangées dans des réseaux répétitifs qui s'étalent dans des distances atomiques significatives. Dans ce contexte, les atomes sont assimilés à des sphères de 2 à 6 Angströms. Puisque la formation d'un Crystal peut exiger le mouvement des atomes à l'intérieur du réseau du solide, la température du matériau doit être réduite en dessous de T_f sans la formation de l'état solide. Un super refroidissement du liquide en dessous de T_f peut apparaitre dans un état thermodynamique *métastable* [46]. Quand la cristallisation commence, si la chaleur latente dégagée au cours de solidification est suffisante pour changer la température à T_f, la phase liquide n'est pas assez refroidie et la température retourne rapidement à la température de fusion T_f. La phase liquide est hyper-refroidie à une température très basse où la chaleur latente n'est pas suffisante pour changer la température à T_f.

1.4. Variation des propriétés thermo-physiques

La majorité des propriétés thermo-physiques d'un matériau varient légèrement en fonction de la température et subissent soudainement des grands ou des petits changements à la température T_f. Par exemple, la chaleur massique de l'Aluminium subit un changement de 11 % à sa température de fusion (659 ℃). Par contre on a seulement un changement de 0.3 % dans le cas de silicone (1083 ℃). Ces discontinuités dans les propriétés thermo-physiques compliquent les modèles mathématiques du problème de changement de phase à cause des discontinuités induites dans les coefficients des équations différentielles. Cependant, les effets les fondamentaux et les plus prononcés sont dus au changement de la densité (masse volumique) [46].

1.5. Variation de la densité

Les variations typiques de la masse volumique au cours de changement de phase liquide/solide sont entre 5% et 10% mais peuvent atteindre 30%.
Pour la majorité des matériaux, le solide et plus dense que le liquide, résultant dans des formations possibles des vides en rétrécissement et expansion de l'enceinte solidifié. La variation de la densité avec la température dans le champ de gravité induit l'écoulement par convection naturel, égalisant rapidement la température dans le liquide et affectant considérablement le transfert thermique. Dans l'échelle de microgravité, les phénomènes de convection qui dominent le transfert thermique sont différents, cela est du aux effets des forces capillaires. Tous ces effets peuvent compliquer le processus de changement de phase et notre capacité d'analyse.

2. Hypothèses simplificatrices

Le processus de changement de phase considéré dans ce mémoire implique un matériau avec une chaleur latente constante de changement phase (L_f). Les effets de super-refroidissement ainsi que les effets de nucléation ne sont pas prise en considération.

Les chaleurs massiques c_l, c_s et les conductivités thermiques k_l, k_s sont supposés constantes dans chaque phase en considérant leur discontinuité au niveau d'interface pour tester les performances et la validité de d'algorithme utilisé.

Le transfert de chaleur est considéré seulement par conduction. C'est une hypothèse raisonnable pour les matériaux purs dans les petites enceintes avec des gradients de température modérés.

En outre, les cas des changements de phase étudiés dans ce mémoire sont de type « iso-thermique » et avec « zone étroite » pour tester les performances de l'algorithme numérique utilisé.

La variation de la masse volumique due au changement de phase a été ignorée pour empêcher le mouvement de la partie fluide. Cette hypothèse n'est raisonnable pour tous les cas. Cependant, il aide à construire un solveur moins compliqué de processus de changement de phase liquide/solide pour étudier le comportement de schéma numérique dans les deux cas : convection-diffusion stationnaire et conduction pure instationnaire.

3. Méthode d'enthalpie

La méthode d'enthalpie est utilisée pour la modélisation de la conduction de chaleur avec changement de phase. Cette méthode permet de traiter l'interface liquide/solide dans la solution sans le suivi explicitement.

Il est intéressant d'un point de vu historique, de noter originellement que cette formulation n'a pas été introduite pour traiter les problèmes de

changement de phase. Elle a été utilisée pour la première fois par Eyres et al comme une formulation alternative pour les problèmes de conduction de chaleur où la conductivité thermique varie en fonction de la température.

En considérant que les propriétés thermo-physiques sont constantes dans chaque phase, l'équation de la conduction de chaleur peut s'écrire :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + U.\nabla T = \nabla(k\nabla T) + Q \qquad (2.1)$$

où T est la température absolue, U est la vitesse dans le cas de mouvement de domaine, Qest la source interne de chaleur, t désigne le temps. c, k et ρ sont respectivement la chaleur massique, la conductivité thermique et la masse volumique du matériau.

Dans le cas où le régime est stationnaire, l'équation (2.1) devient de type convection-diffusion stationnaire et elle s'adapte avec le cas de moulage continu.

L'approche de la méthode d'enthalpie commence par l'introduction de la fonction d'enthalpie $H(T)$ qui comporte la chaleur sensible et la chaleur latente de changement de phase. L'enthalpie spécifique est définie par :

$$\bar{h} = \int_0^T cdT + \phi L_f \qquad (2.2)$$

Où L_f est la chaleur latente de fusion/solidification, ϕ est la fraction liquide qui est égale à 1 pour la phase liquide et 0 pour la phase solide. En utilisant l'équation (2.2), l'équation (2.1) peut s'écrire :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + U.\nabla H = \nabla(k\nabla T) + Q \qquad (2.3)$$

où $H = \rho\bar{h}$ est l'enthalpie par unité de volume. Pour résoudre l'équation (2.3) dans le cas de changement de phase, il faut utiliser des procédures numériques pour calculer la température à partir de l'enthalpie. La chaleur massique c est supposée constante dans chaque phase. Comme il est mentionné dans [46], l'enthalpie peut être déduite de l'équation (2.2) :

$$H = \rho(1-\phi)\int_0^T c_s dT + \rho\phi L_f\left[\int_0^{T_{sf}} c_s dT + L_f + \int_{T_{sf}}^T c_l dT\right]$$

$$= \rho[c_s - (c_s - c_l)\phi]T + \rho\phi\left[(c_s - c_l)T_{sf} + L_f\right] \qquad (2.4)$$

l et s désignent respectivement la phase liquide et la phase solide. Pour un changement de phase iso-thermique, $T_{sf} \equiv T_f$ est la température de fusion/solidification du matériau. Pour un changement de phase avec zone étroite (non iso-thermique), la solidification apparait dans un intervalle $T_{sf} \leq T \leq T_{lf}$, et la fraction liquide ϕ varie différemment comparée au cas iso-thermique.

4. Changement de phase iso-thermique

Pour un matériau avec un changement de phase iso-thermique, l'enthalpie du liquide et du solide est calculée de l'équation (2.4) comme suit :

$$H_s = \rho_s\left(\int_0^T c_s dT\right) = \rho_s c_s T$$

$$H_l = \rho_l\left(\int_0^{T_f} c_s dT + \int_{T_f}^T c_l dT + L_f\right) = \rho_l\left(c_s T_f + c_l\left(T - T_f\right) + L_f\right) \qquad (2.5)$$

Pour ce type des problèmes, le champ de température est calculé par la forme réciproque suivante :

$$T = \begin{cases} \frac{H}{\rho c_s} & H \leq H_{sf} \\ T_f & H_{sf} \leq H \leq H_{lf} \\ \frac{(H - H_{lf})}{\rho c_l} + T_f & H \geq H_{lf} \end{cases} \qquad (2.6)$$

où $H_{lf} = \rho\left(c_s T_f + L_f\right)$ et $H_{sf} = \rho c_s T_f$ sont respectivement les enthalpies liquide et solide de solidification. Ces valeurs peuvent être utilisées numériquement pour déterminer la phase qui existe dans chaque nœud ou élément de maillage. Les conductivités thermiques choisies pour ce maillage

correspondent aux valeurs de l'enthalpie. Pour les éléments de maillage qui contiennent le changement de phase, la conductivité thermique moyenne est employée.

5. Changement de phase non iso-thermique (avec zone étroite)

Pour ce type de problème, il est nécessaire de définir à chaque point la fraction liquide dans la zone étroite. Comme il est mentionné dans [46], la fraction liquide peut être en fonction d'un nombre des variables au cours de solidification. Dans plusieurs systèmes, il est raisonnable de supposer que la fraction liquide varie seulement en fonction de température :

$$\phi = \begin{cases} 0 & H \le H_{Sf} \\ \tilde{F}(T) & H_{Sf} \le H \le H_{Lf} \\ 1 & H \ge H_{Lf} \end{cases} \tag{2.7}$$

où H_{Sf} et H_{Lf} sont déterminées de l'équation (2.4) en remplaçant $(\phi = 0, T = T_{Sf})$ et $(\phi = 1, T = T_{Lf})$ respectivement.

La fonction $\tilde{F}(T)$ peut prendre plusieurs formes (linéaire, puissance, etc.) selon le diagramme d'équilibre de phase des matériaux impliqués [46]. La détermination du champ de température s'effectue après la détermination du champ d'enthalpie en utilisant le solveur numérique à chaque instant.

Une autre forme $H - T$ qui s'adapte bien avec notre algorithme pour le changement de phase non iso-thermique peut s'écrire :

$$H(T) = \begin{cases} c_s T & T \le T_s \\ c_s T_s + c_{sl}(T - T_s) & T_s \le T \le T_l \\ c_s T_s + c_{sl}(T_l - T_s) + c_l(T - T_l) & T \ge T_l \end{cases} \tag{2.8}$$

où $L_s = c_{sl}(T_l - T_s)$

La forme réciproque est donnée par l'équation suivante :

$$\tau(H) = \begin{cases} \frac{H}{c_s} & H \le H_s = c_s T_s \\ T_s + \frac{H - H_s}{c_{sl}} & H_s \le H \le H_l = H_s + c_{sl}(T_l - T_s) \\ T_l + \frac{H - H_l}{c_l} & H \ge H_l \end{cases} \quad (2.9)$$

6. Traitement de cancer de poumon par congélation cryogénique

L'application principale de la cryochirurgie à l'intérieur de poumon est de congeler les métastases secondaires. Une tumeur primaire se trouve souvent dans les organes comme les poumons et le foie. A cause de la taille des tumeurs primaires dans le poumon, ces tumeurs sont enlevées typiquement par des techniques de résection. Cependant, la cryochirurgie par multisonde peut être utilisée comme une alternative. Tandis que la résection est également employée pour enlever les métastases, il a été remarqué que l'ampleur des résections a une influence dans le temps de survie des patients [47]. Donc, l'utilisation de la cryochirurgie pour des métastases multiples est parfois préférable grâce à son non-invahisante. En fait, les taux de survie des patients après la cryochirurgie est 26 % après 5 années [48]. Ce pourcentage comparé au taux de 35 % des patients qui vont subir une résection chirurgique, apparait raisonnable tandis que les patients sélectionnés pour la cryochirurgie sont généralement dans des mauvaises conditions que celles sélectionnées pour la chirurgie traditionnelle.

Due à la différence des propriétés thermo-physiques entre le tissu de tumeur qui est plus dense, et le tissu de poumon de faible densité, le comportement physique associé à la cryochirurgie dans le poumon est unique et intéressant. Dans une étude analytique et numérique faite par Bischof, bastacky et Rubinsky (1992) sur le cancer de poumon, ils ont remarqué d'après leurs résultats que le front de congélation s'accélère comme il part et entre dans la région de tissu sain de poumon de faible densité. Ce résultat obtenu par Bischof, bastacky et Rubinsky peut être employée pour juger la validité des modèles numériques dans la simulation de problème de cryochirurgie de cancer de poumon, surtout dans des configurations multidimensionnelles.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

6.1. Destruction des cellules de tissu sous les conditions cryogéniques

Le mécanisme d'endommagement de tissu au cours de la cryochirurgie doit être compris afin de relier le procédé de congélation au degré de destruction des cellules dans la tumeur. Les effets destructifs de congélation de tissu peuvent être classés dans deux mécanismes importants : immédiat et retardé. Les causes de la destruction immédiate des cellules sont dues aux endommagements directs des cellules de l'effet de la température, du refroidissement et des procédés de congélation, tandis que la cause qui retarde les endommagements de congélation, pouvant durer plusieurs heures au cours de l'accomplissement d'une cryochirurgie avec la forme la plus dominante de destruction des cellules, est la stasis vasculaire.

Il y a plusieurs mécanismes distincts où la congélation peut provoquer une chirurgie cellulaire à l'intérieur des boules de glace causées par l'application des cryo-sondes. Le changement fondamental au cours de congélation est la conversion de fluide à une glace à l'intérieur des cellules et à son espace intercellulaire [49]. Certains des changements qui interviennent dans une cellule soumise à la congélation sont : (1) le développement de la formation de glace extracellulaire ; (2) le développement de la formation de glace intracellulaire ; (3) la cristallisation éventuelle des électrolytes ; (4) la déshydratation des cellules ; (5) le choc thermique ; et (6) la dénaturation des complexes de lipoprotéine.

La réponse de tissu varie avec l'intensité de la chirurgie cryogénique. Gage et Baust [50] ont présenté une revue qui a discuté les mécanismes qui mènent à la destruction des cellules dans les tissus. La température la plus faible de provoquant le décès est $-50℃$. Cette valeur a été recommandée comme une référence pour la mort de cellule. Pour une description plus claire de destruction des cellules de tissu par cristallisation intracellulaire et extracellulaire, la figure 2.1 montre la courbe de la forme caractéristique de la signature de survie des cellules qui subit une congélation, et indique deux domaines de la chirurgie

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

associée avec le refroidissement lent et rapide, qui sont combines pour garantir un intervalle intermédiaire des taux de refroidissement dans lequel la survie des cellules est optimale.

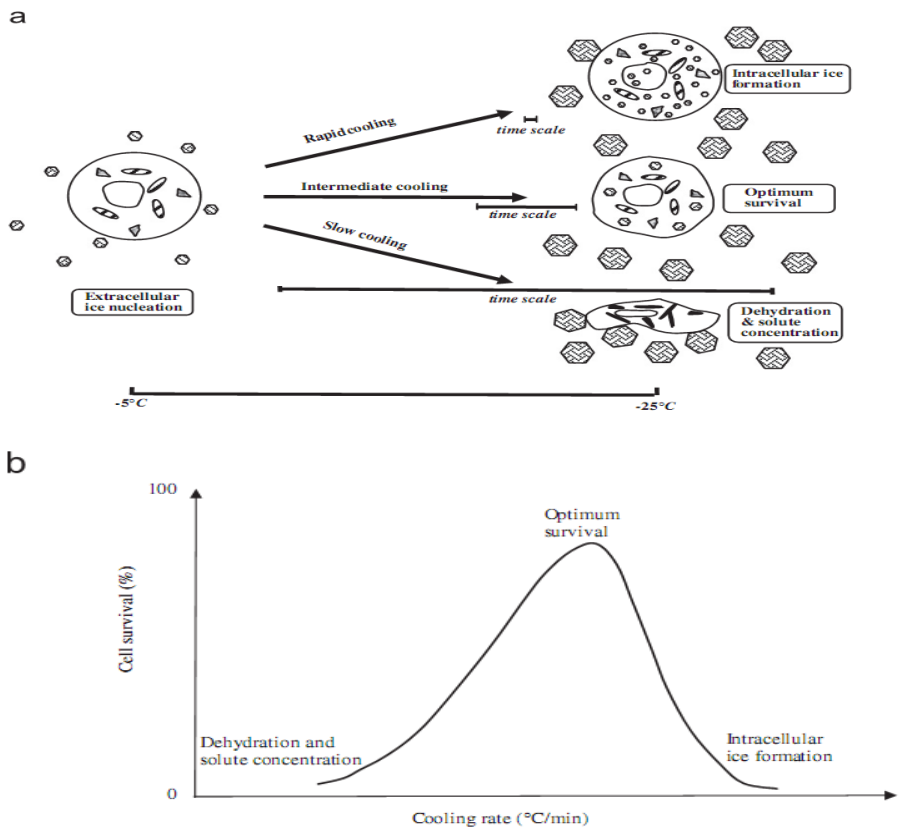


Figure 2.2 : (a) variation de réponse de cellule soumise à différents taux de refroidissement, (b) relation caractéristique entre le taux de refroidissement et la survie de cellule.

6.2. Modèle de changement de phase dans un tissu biologique

Le modèle le plus populaire dans le transfert bio-thermique a été développé par Pennes [50]. L'avantage principal de ce modèle est que la température est la seule variable impliquée dans la simulation. Proposé par Pennes, le transfert bio-thermique est décrit par l'équation suivante :

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k\nabla^2 T + \omega \rho c_b (T_b - T) + Q_m + Q \qquad (2.10)$$

où ρ est la densité de tissu ; k est la conductivité thermique ; ω est le taux de perfusion de sang ; c est la chaleur spécifique de tissu ; c_b est la chaleur

spécifique de sang ; T_b est la température de sang ; Q_m est la source volumétrique de chaleur associé au métabolisme ; Q est la source volumétrique de chaleur externe. Le transfert thermique dans le corps humain est décrit par la conduction de chaleur, la perfusion du sang, le métabolisme et la source de chaleur externe. Le taux de perfusion du sang et le métabolisme sont très importants pour réguler la température du corps. Le taux net de transfert thermique entre le sang et le tissu est proportionnel au produit du taux volumétrique de perfusion et la différence entre la température du sang des artères et la température locale du tissu. Dans la cryochirurgie, une température extrêmement basse, est utile pour détruire les tumeurs cancéreuses.

Généralement, il y a plusieurs hypothèses considérées pour simuler le changement de phase au cours de la cryochirurgie :

1. La chaleur latente est constante.
2. Les propriétés thermiques varient dans les points qui sont complètement congelés du liquide au solide.
3. A l'interface, la conduction de chaleur est impliquée seulement dans le transfert thermique.
4. Le débit de sang est constant quand la température est proche de la température limite inférieure de changement de phase.
5. Le métabolisme est nul pendant la congélation.
6. La fraction liquide varie seulement en fonction de température.

6.3. Formulation mathématique par la méthode d'enthalpie

On considère un domaine Ω divisé en trois parties, la partie liquide Ω_1, la partie solide Ω_3, et la partie pâteuse de changement de phase Ω_2, (voir figure 2.3).

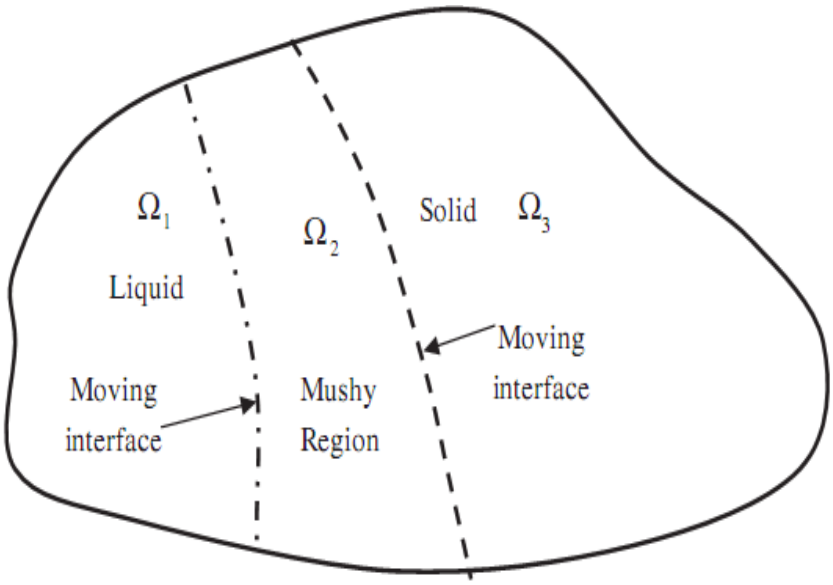


Figure 2.3 : Domaine de changement de phase.

Le transfert thermique dans la phase solide (congelée) :

$$\rho c_s \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla.(k_s \nabla T_s) + \omega_s \rho c_b (T_b - T) + Q_m + Q \qquad (2.11)$$

Le transfert thermique dans la phase liquide (non-congelée) :

$$\rho c_l \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla.(k_l \nabla T_l) + \omega_l \rho c_b (T_b - T) + Q_m + Q \qquad (2.12)$$

Le bilan thermique à l'interface liquide/solide :

$$k_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial n}\right) - k_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial n}\right) = (\rho_l h_l - \rho_s h_s) v_x - \rho_l h_l v_l \qquad (2.13)$$

où h_s, h_l sont les enthalpies massique des phase solides et liquides ; v_x, v_l sont les vitesse des deux interfaces.

$$(\rho_l - \rho_s) v_x = \rho_l v_l \qquad (2.14)$$

$$v_l = -\frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_l} v_x \qquad (2.15)$$

En remplaçant l'équation (2.15) dans (2.13) on obtient :

$$k_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial n}\right) - k_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial n}\right) = \rho_s L v_x \qquad (2.16)$$

Pour déduire le modèle enthalpique du modèle multi-domaine bio-thermique standard de changement de phase, l'effet de la chaleur latente est incorporé avec la capacité dépendant de la température. Donc, un nouveau paramètre est introduit. Dans le cas de tissu biologique, la congélation s'effectue d'une façon

non iso-thermique où il y a une zone pâteuse existant entre les deux phases. La forme d'enthalpie est définie par Bischof [51] dans le cas de tissu biologique comme suit :

Tissu congelé $(T < T_{ml})$:

$$H(T) = \int_{T_{ml}}^{T} c_s dT \tag{2.17}$$

Zone pâteuse $(T_{ml} \leq T \leq T_{ms})$:

$$H(T) = \frac{T - T_{ml}}{T_{ms} - T_{ml}} Q \tag{2.18}$$

Zone non-congelée :

$$H(T) = Q + \int_{T_{ms}}^{T} c_l dT \tag{2.19}$$

où :

$$Q = L + \int_{T_{ml}}^{T_{ms}} \left[c_s - \left(\frac{T - T_{ml}}{T_{ms} - T_{ml}} \right) (c_s - c_l) \right] dT \tag{2.20}$$

Cette forme peut s'écrire aussi sous la forme suivante :

$$H(T) = \begin{cases} c_f (T - T_{ms}) & T < T_{ms} \\ (T - T_{ms}) \left(\frac{1}{2} (c_f + c_u) + \frac{L}{(T_{ml} - T_{ms})} \right) & T_{ms} \leq T \leq T_{ml} \\ L + \frac{1}{2} (c_f + c_u)(T_{ml} - T_{ms}) + c_u (T - T_{ms}) & T > T_{ml} \end{cases} \tag{2.21}$$

Avec cette définition d'enthalpie, l'équation bio-thermique peut être réécrite en terme d'enthalpie :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = k \nabla^2 T + \omega \rho c_b (T_b - T) + Q_m + Q \tag{2.22}$$

La perfusion de sang ω, la génération de chaleur par métabolisme Q_m, la conductivité thermique k pour différentes phases sont données égales à :

La conductivité thermique :

$$k = \begin{cases} k_s & T < T_{ms} \\ \frac{(k_l + k_s)}{2} & T_{ms} \leq T \leq T_{ml} \\ k_l & T > T_{ml} \end{cases} \tag{2.23}$$

Génération de chaleur par métabolisme :

$$Q_m = \begin{cases} 0 & T < T_{ms} \\ 0 & T_{ms} \leq T \leq T_{ml} \\ Q_{ml} & T > T_{ml} \end{cases} \quad (2.24)$$

Perfusion de sang :

$$\omega = \begin{cases} 0 & T < T_{ms} \\ 0 & T_{ms} \leq T \leq T_{ml} \\ \omega_b & T > T_{ml} \end{cases} \quad (2.25)$$

La formulation de problème de changement de phase dans un tissu biologique par la méthode d'enthalpie a été faite pour l'utiliser dans la simulation de problème de congélation cryogénique de cancer de poumon.

Dans ce chapitre, nous donnons la forme discrétisée du modèle mathématique décrit précédemment. Cette discrétisation a été établie dans le cas 2D cartésien et axisymétrique, et pour le cas de convection-diffusion stationnaire et conduction non stationnaire.

1. Formulation de problème de changement de phase

Considérons le domaine Ω avec les quatre frontières $\partial_1\Omega$, $\partial\Omega_2$, $\partial_3\Omega$ et $\partial_4\Omega$ qui sont complémentaires où :

$$\begin{cases} \partial\Omega = \partial_1\Omega \cup \partial_2\Omega \cup \partial_3\Omega \cup \partial_4\Omega \\ \partial_i\Omega \cap \partial_j\Omega \neq \emptyset \qquad\qquad i \neq j \end{cases} \tag{3.1}$$

Le domaine Ω est considéré bidimensionnel et peut être cartésien ou axisymétrique (figure 3.1).

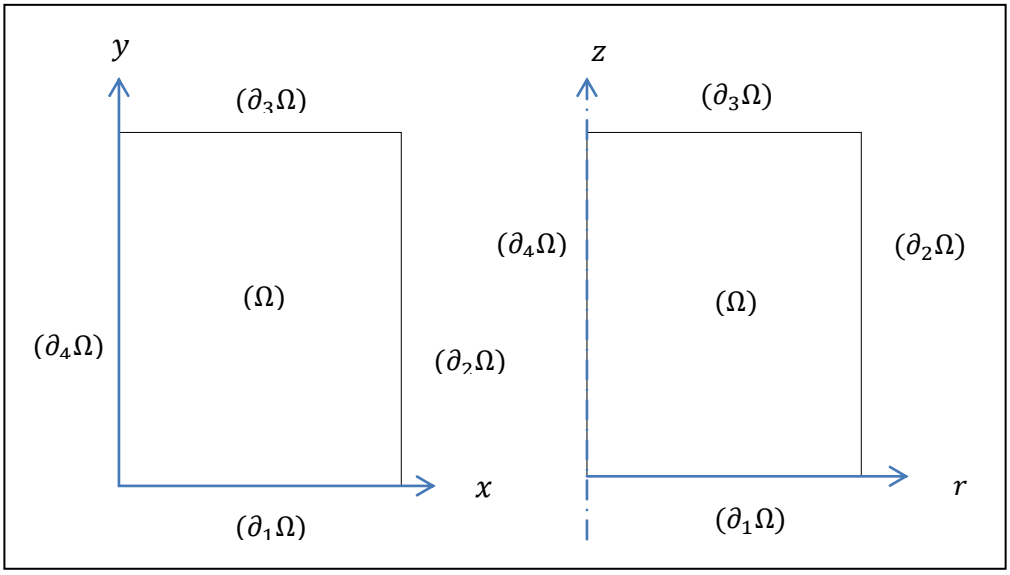


Figure 3.1 : schématisation des deux références de coordonnées : cartésien et axisymétrique pour le domaine Ω

Le phénomène de changement de phase dans le cas de mouvement de domaine Ω est décrit par l'équation d'énergie sous la forme enthalpique suivante :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + U.\nabla H = div(k(T)\nabla T) + Q \tag{3.2}$$

où $H(T)$ est l'enthalpie volumétrique, $k(T)$ est la conductivité thermique, Q est la génération interne de la chaleur et U la vitesse du domaine mobile. Les propriétés H et k dépendent de la température. La fonction d'enthalpie est définie par:

$$H(T) = \int_{T_{ref}}^{T} \rho c(T) dT \tag{3.3}$$

ρc est la capacité volumétrique de chaleur qui dépend de la température, et T_{ref} est une température de référence.

La forme de $H(T)$ dépend de type de matériau considéré.

Cependant, il y a deux cas : changement de phase avec zone étroite non-iso-thermique et changement de phase iso-thermique.

Dans le cas où le changement de phase s'effectue dans un intervalle fini de température $[T_s, T_l]$, la fonction d'enthalpie est donnée par :

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^{T} \rho c_s dT & T \leq T_s \\ \int_{T_{ref}}^{T_s} \rho c_s dT + \int_{T_s}^{T} \rho \frac{\partial L}{\partial T} dT & T_s < T \leq T_l \\ \int_{T_{ref}}^{T_s} \rho c_s dT + \rho L + \int_{T_l}^{T} \rho c_l dT & T > T_l \end{cases} \tag{3.4}$$

Dans le cas de changement de phase iso-thermique, la fonction d'enthalpie est donnée par :

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^{T} \rho c_s dT & T \leq T_m \\ \int_{T_{ref}}^{T_m} \rho c_s dT + \rho L + \int_{T_m}^{T} \rho c_l dT & T > T_m \end{cases} \tag{3.5}$$

Pour résoudre l'équation (3.2), on considère les conditions aux limites suivantes :

1. Condition de Dirichlet (température imposée) :

$$T = \bar{T}(x) \quad dans\ (\partial_1 \Omega) \tag{3.6}$$

2. Condition de Neumann (flux imposé) :

$$k(T) \frac{\partial T}{\partial n}(x) = \bar{q}(x) \quad dans\ (\partial_2 \Omega) \tag{3.7}$$

3. Condition mixte (convection) :

$$k(T) \frac{\partial T}{\partial n}(x) = h(T_{ext} - T(x)) \quad dans\ (\partial_3 \Omega) \tag{3.8}$$

où T_∞ est la température ambiante, h est le coefficient de convection.

4. Condition de type rayonnement :

$$k(T)\frac{\partial T}{\partial n}(x) = \alpha(T) \qquad dans \ (\partial_4\Omega) \tag{3.9}$$

où $\alpha(T) = \sigma\epsilon(T^4 - T_\infty^4)$, σ est la constante de Stephan-Boltzmann, ϵ est l'émissivité de la surface et T_∞ est la température d'environnement.

5. Condition initiale (seulement dans le cas instationnaire) :

$$T(x, t = 0) = T_0(x) \tag{3.10}$$

2. Discrétisation par la méthode des éléments finis (MEF)

L'équation d'énergie générale de changement de phase (3.2) peut prendre deux formes suivant le régime de transfert thermique du problème étudié.

Le problème de convection-diffusion stationnaire est l'un de ces deux formes, il est décrit par l'équation :

$$U.\nabla H = div(k(T)\nabla T) + Q \tag{3.10}$$

L'autre forme se présente dans le problème de conduction instationnaire décrit par l'équation :

$$\frac{\partial H}{\partial t} = div(k(T)\nabla T) + Q \tag{3.11}$$

Chaque forme nécessite un traitement algorithmique différent pour résoudre le problème de changement de phase associé.

2.1. Problème de convection-diffusion stationnaire

A cause de la présence de terme convectif, le traitement du problème de convection-diffusion par la méthode de Galerkine standard présente souvent des oscillations numériques (instabilités) dans la solution numérique obtenue. Pour cela, l'utilisation des schémas de stabilisation est nécessaire.

Rapport-Gratuit.com

2.1.1. Méthode de stabilisation

Pour montrer les oscillations numériques obtenues par la méthode de Galerkine standard, on a choisi un cas de convection-diffusion stationnaire unidimensionnel décrit par l'équation :

$$a\frac{du}{dx} - k\frac{d^2u}{dx^2} = 0 \quad dans \ \Omega \tag{3.12}$$

Le domaine Ω est considéré entre $[0, L]$ et est discrétisé avec un maillage uniforme avec des éléments de longueur h. Les fonctions de forme sont représentées dans la figure 1 :

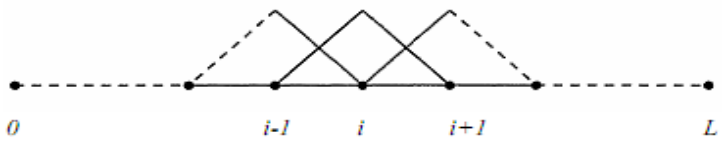


Figure 3.2 : fonctions de forme pour le nœud i.

En appliquant le schéma de Galerkine sur l'équation (3.12), on obtient l'équation suivante :

$$\int_\Omega v\left(a\frac{du}{dx} - k\frac{d^2u}{dx^2}\right)d\Omega = 0 \tag{3.13}$$

La résolution de l'équation (3.13) par MEF pour le i ème nœud nous donne la forme discrète suivante :

$$a\frac{-u_{i-1}+u_{i+1}}{2h} - k\frac{u_{i-1}-2u_i+u_{i+1}}{h^2} = 0 \tag{3.14}$$

Il est bien clair que cette approximation ressemble aux approximations de type des différences centrées des opérateurs différentiels.

L'équation (3.15) peut être simplifiée comme suit :

$$(-1 - Pe^e)u_{i-1} + 2u_i + (-1 + Pe^e)u_{i+1} = 0 \tag{3.15}$$

où Pe^e est le nombre de Peclet. $Pe^e = ah/2k$. Ce nombre adimensionnel exprime le rapport entre le taux d'advection et le taux de diffusion. Le problème est supposé avec convection dominante pour $Pe >> 1$ et avec diffusion dominante pour $Pe << 1$. Dans le cas où la convection est dominante, le terme de convection crée des instabilités sous forme des oscillations dans la solution donnée par la méthode éléments finis.

Pour montrer ces oscillations, on prend la solution pour l'équation (3.12) avec les données suivantes :

$\Omega = [0,1]$ avec $u(0) = 1$ et $u(1) = 0$. La vitesse du domaine est $a = 1$, la diffusivité est supposée $k = 10^2$. Si on prend $h = 0.1$, le nombre de Peclet est égal 100.

La solution analytique de ce problème est :

$$u(x) = \frac{e^{\frac{ax}{k}} - e^{\frac{a}{k}}}{1 - e^{\frac{a}{k}}} \tag{3.16}$$

La figure 3.3 montre une comparaison entre la solution obtenue par la méthode MEF de Galerkine et la solution analytique.

Comme il a été mentionné précédemment, pour des grands nombres de Peclet ($Pe = 100$) ; on peut remarquer d'après la figure 3.3 que la discrétisation par la MEF de Galerkine donne des oscillations nœud à nœud dans la solution. La seule méthode pour éliminer ces oscillations est d'utiliser les techniques upwind comme la méthode des éléments finis stabilisée.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

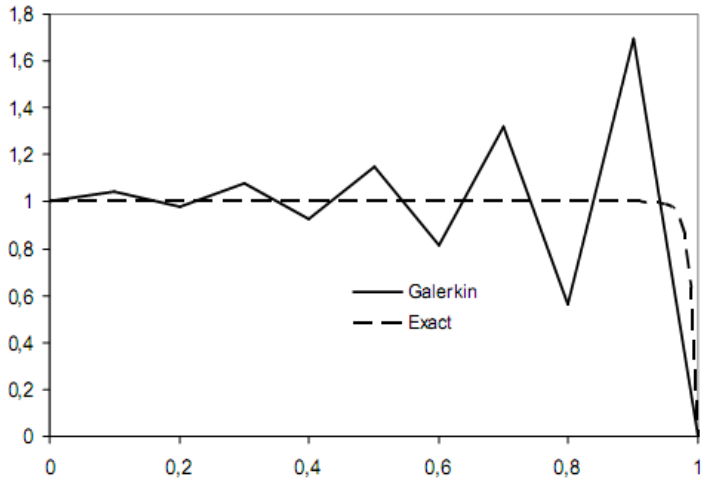


Figure 3.3 : solution de problème de convection diffusion 1D.

En général, la technique upwind de base consiste à remplacer la méthode de différences centrées obtenue par la méthode de Galerkine par une approximation décentré. La formulation la plus populaire est connue comme la méthode SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkine) proposée par Hughes et Brooks dans [3] et [20] dans les problèmes avec convection dominante. L'idée principale dans la méthode SUPG est d'ajouter une diffusion artificielle qui influe seulement dans la direction d'écoulement. Cette modification a été étendue à une formulation de Petrov-Galerkine en modifiant la fonction de pondération. Cette modification a été interprétée par une grande pondération des nœuds dans la direction amont et une faible pondération dans la direction avale (figure 3.4).

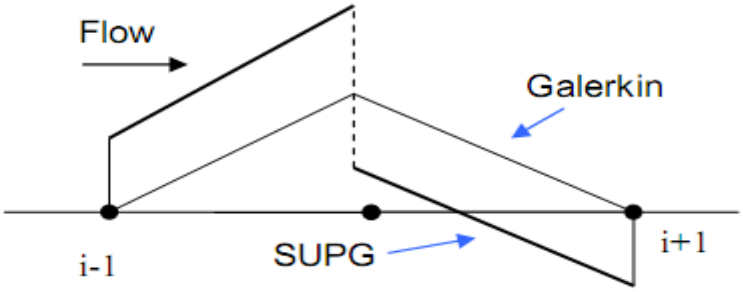


Figure 3.4 : Fonction de pondération dans la méthode de Galerkine et la méthode SUPG pour un élément linéaire.

L'équation modifiée peut prendre la forme suivante :

$$\int_{\Omega} \tilde{v} \left(a \frac{du}{dx} - k \frac{d^2u}{dx^2} \right) d\Omega = 0 \qquad (3.17)$$

Où : $\tilde{v} = v + \tau a \frac{dv}{dx}$ est la nouvelle fonction de pondération modifiée. Puisqu'une fonction d'interpolation linéaire est employée, la deuxième dérivée s'annule. Le paramètre τ contrôle l'amplitude de la diffusion artificielle ajoutée. L'équation (3.17) peut s'écrire pour un i ème nœud comme suit :

$$\left(-1 - Pe^e - \frac{\tau a^2}{k}\right) u_{i-1} + \left(2 + 2\frac{\tau a^2}{k}\right) u_i + \left(-1 - Pe^e - \frac{\tau a^2}{k}\right) u_{i+1} = 0 \quad (3.18)$$

La figure 3.5 montre une comparaison entre le schéma SUPG de stabilisation et la méthode de Galerkine.

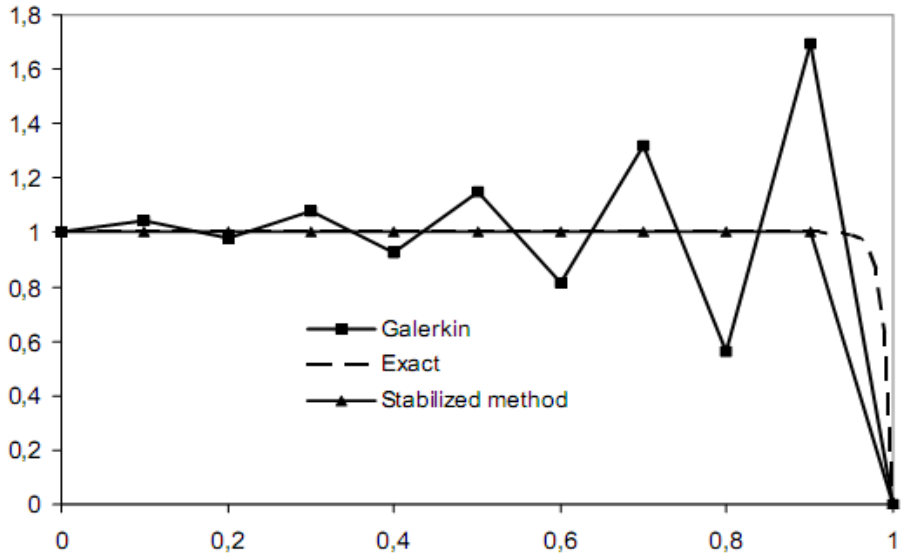


Figure 3.5 : Solution du problème de convection-diffusion 1D par la méthode MEF stabilisée.

2.1.2. Paramètre de stabilisation

La question critique dans la méthode SUPG reste dans le choix de paramètre τ. « Combien de perturbation (terme de perturbation) on doit ajouter pour atteindre les effets désirées de haute stabilité et de précision ? ».

Le paramètre de stabilisation τ^e pour le problème de convection diffusion stationnaire est donné par [65]:

$$\tau^e = \frac{h^e}{2|a^e|}\xi(Pe^e) \tag{3.19}$$

Où $\xi(Pe^e)$ est la fonction de nombre de Peclet donnée par :

$$\xi(Pe^e) = \coth(Pe^e) - \frac{1}{Pe^e} \approx \min\left(\frac{1}{3}Pe^e, 1\right) \tag{3.20}$$

avec : $Pe^e = ah^e/2k$

h^e est la longueur caractéristique de l'élément de maillage.

La longueur caractéristique de l'élément a un impact significatif sur la quantité de paramètre de stabilisation. Il a été montré [65] que τ est proportionnel à h^2 à la limite de diffusion, et linéaire en h dans la limite de convection.

Le choix le plus recommandé dans la littérature [65] est :

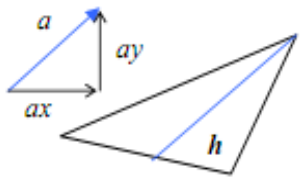


Figure 3.6 : longueur caractéristique dans la direction d'advection.

$$h^e = 2\left(\sum_{\alpha}^{n_e}\left|\frac{a_i}{\|a\|}\frac{\partial N_\alpha}{\partial x_i}\right|\right) \tag{3.21}$$

avec : $\|a\| = \sqrt{\sum_i {a_i}^2}$

$n_e$est le nombre des nœuds dans l'élément, N_α est la fonction de forme associée au nœud α, a est la vitesse locale.

2.1.3. Schéma SUPG des éléments finis

La formulation de problème de changement de phase dans le cas de convection-diffusion stationnaire (équation 3.10) par la méthode de Galerkine est donnée par :

$$\int_\Omega \delta T(U.\nabla H - div(k(T)\nabla T) + Q)\, d\Omega = 0 \tag{3.22}$$

En appliquant le schéma SUPG à l'équation (3.19), la fonction de pondération δT devient :

$$\widetilde{\delta T} = \delta T + \tau U.\nabla \delta T \tag{3.23}$$

En remplaçant l'équation (3.20) dans l'équation (3.19), on obtient :

$$\int_\Omega \delta T(U.\nabla H)d\Omega - \underbrace{\int_\Omega \delta T\big(div(k(T)\nabla T)\big)d\Omega}_{I} - \int_\Omega \delta T Q d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla \delta T(U.\nabla H)d\Omega -$$
$$\underbrace{\int_\Omega \tau U.\nabla \delta T\big(div(k(T)\nabla T)\big)d\Omega}_{II} - \int_\Omega \tau U.\nabla \delta T Q d\Omega = 0 \tag{3.24}$$

Puisque la température est interpolée linéairement, le terme (II) s'annule.

En intégrant le terme le terme (I) par le théorème de Green-Gauss, on trouve :

$$\int_\Omega \delta T\big(div(k(T)\nabla T)\big)d\Omega = \underbrace{\int_{\partial\Omega} \delta T k(T)\nabla T.n d\Gamma}_{III} - \int_\Omega \nabla \delta T k(T)\nabla T d\Omega \tag{3.25}$$

Le terme de frontière (III) peut s'écrire :

$$\int_{\partial\Omega} \delta T k(T)\nabla T.n d\Gamma =$$
$$-\Big(\int_{\partial_2\Omega} \delta T \bar{q}\, d\Gamma + \int_{\partial_3\Omega} \delta T h(T_\infty - T)\, d\Gamma + \int_{\partial_4\Omega} \delta T \alpha(T) d\Gamma\Big) \tag{3.26}$$

En remplaçant l'équation (3.23) dans (3.21), on obtient :

$$\int_\Omega \delta T(U.\nabla H(T))d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla \delta T(U.\nabla H)d\Omega + \int_\Omega \nabla \delta T k(T)\nabla T d\Omega +$$
$$\int_{\partial_3\Omega} \delta T h T\, d\Gamma - \int_{\partial_4\Omega} \delta T \alpha(T) d\Gamma - r(\delta T) = 0 \tag{3.27}$$

où :

$$r(\delta T) = \int_\Omega \delta T Q d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla \delta T Q d\Omega + \int_{\partial_2\Omega} \delta T \bar{q}\, d\Gamma + \int_{\partial_3\Omega} \delta T h T_\infty\, d\Gamma \tag{3.28}$$

Dans le contexte de la méthode des éléments finis, la résolution numérique de du problème est basée sur une procédure itérative de la forme discrète de l'équation (3.27). Pour cela, on propose la notation suivante :

$$R(T,\delta T) \equiv \int_\Omega \delta T(U.\nabla H(T))d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla \delta T(U.\nabla H(T))d\Omega + \int_\Omega \nabla \delta T k(T)\nabla T d\Omega +$$
$$\int_{\partial_3\Omega} \delta T h T\, d\Gamma + \int_{\partial_4\Omega} \delta T \alpha(T) d\Gamma - r(\delta T) = 0 \tag{3.29}$$

Ce problème nécessite une linéarisation $DR(T,\delta T)$ de $R(T,\delta T)$ qui nous permet d'obtenir le système linéarisé itérative suivant :

$$DR\left(T^{(i)},\delta T\right)\Delta T^{(i)} = -R\left(T^{(i)},\delta T\right) \tag{3.30}$$

Pour résoudre l'équation (3.30), on utilise une linéarisation relaxée de $R(T,\delta T)$ proposée par Nedjar [38].

2.1.4. Linéarisation relaxée

L'idée principale dans la conception de l'algorithme proposé pour traiter le problème de changement de phase se résume en trois étapes :

Dans la première étape, au lieu d'utiliser la forme $H-T$ classique (équation (3.3) et (3.4)), on utilise son forme réciproque $T-H$. Pour cela, on introduit la fonction φ donnée par l'équation suivante :

$$\begin{cases} \varphi: H \to T \\ T = \varphi(H) \end{cases} \tag{3.31}$$

Dans la deuxième étape, la linéarisation de la fonction $\varphi(H)$ est donnée par :

$$T^{(i+1)} \equiv T^{(i)} + \Delta T^{(i)} = \varphi\left(H^{(i)}\right) + \varphi'\left(H^{(i)}\right)\Delta H^{(i)} \tag{3.32}$$

où : $\Delta H^{(i)} = H^{(i+1)} - H^{(i)}$, φ' est la dérivée de $\varphi(H)$ par rapport à H. L'équation (3.32) peut s'écrire aussi sous la forme :

$$\Delta H^{(i)} = \frac{1}{\varphi'\left(H^{(i)}\right)}\left[\Delta T^{(i)} + \left(T^{(i)} - \varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right] \tag{3.33}$$

La troisième étape est de remplacer la quantité $1/\varphi'\left(H^{(i)}\right)$ par la quantité μ qui est le paramètre de relaxation dans tous le domaine de calcul au cours du processus itérative où :

$$\Delta H^{(i)} = \mu\left[\Delta T^{(i)} + \left(T^{(i)} - \varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right] \tag{3.34}$$

Le paramètre de relaxation μ doit satisfaire la condition suivante :

$$\mu \leq \frac{1}{\max \varphi'\left(H^{(i)}\right)} \tag{3.35}$$

L'enthalpie H et la température T sont des variables dépendantes et elles sont distinguées au cours de processus itératif par l'équation (3.34). Pour cela, et

afin de linéariser l'équation (3.30), on porpose remplacer $R(T,\delta T)$ par $R(T,H,\delta T)$.

La linéarisation classique de $R(T,H,\delta T)$ est donnée par :

$$\int_\Omega \delta T\left(U.\nabla\left(\Delta H^{(i)}\right)\right)d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla\delta T\left(U.\nabla\left(\Delta H^{(i)}\right)\right)d\Omega +$$
$$\int_\Omega \nabla\delta T.k\left(T^{(i)}\right)\nabla\left(\Delta T^{(i)}\right)d\Omega + \underbrace{\int_\Omega \nabla\delta T.\nabla T^{(i)}k'\left(T^{(i)}\right)\Delta T^{(i)}d\Omega}_{IV} +$$
$$\int_{\partial_3\Omega}\delta T h\Delta T^{(i)}\,d\Gamma + \int_{\partial_4\Omega}\delta T\alpha'\left(T^{(i)}\right)d\Gamma = -R(T^{(i)},H^{(i)},\delta T) \quad (3.36)$$

k'et α' sont les dérivées de k et α par rapport à la température respectivement. La conductivité thermique a une forme explicite en fonction de température (constante à chaque zone de changement de phase) et par conséquent le terme IV s'annule.

En remplaçant l'équation (3.34) dans l'équation (3.36), on obtient la forme relaxée $\widetilde{D}R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right)$ de la linéarisation de $R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right)$ comme suit :

$$\widetilde{D}R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right)\Delta T^{(i)} =$$
$$-R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right) -$$
$$\underbrace{\int_\Omega \delta T\mu\left(U.\nabla\left(T^{(i)}-\varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right)d\Omega - \int_\Omega \tau U.\nabla\delta T\mu\left(U.\nabla\left(T^{(i)}-\varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right)d\Omega}_{V} \quad (3.37)$$

où :

$$\widetilde{D}R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right)\Delta T^{(i)} =$$
$$\int_\Omega \delta T\mu\left(U.\nabla\left(\Delta T^{(i)}\right)\right)d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla\delta T\mu\left(U.\nabla\left(\Delta T^{(i)}\right)\right)d\Omega +$$
$$\int_\Omega \nabla\delta T.k\left(T^{(i)}\right)\nabla\left(\Delta T^{(i)}\right)d\Omega + \int_{\partial_3\Omega}\delta T h\Delta T^{(i)}\,d\Gamma - \int_{\partial_4\Omega}\delta T\alpha'\left(T^{(i)}\right)\Delta T^{(i)}d\Gamma \quad (3.38)$$

$$R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right) =$$
$$\int_\Omega \delta T\left(U.\nabla H^{(i)}\right)d\Omega + \int_\Omega \tau U.\nabla\delta T\left(U.\nabla H^{(i)}\right)d\Omega + \int_\Omega \nabla\delta T k\left(T^{(i)}\right)\nabla T^{(i)}d\Omega +$$
$$\int_{\partial_3\Omega}\delta T h T^{(i)}\,d\Gamma - \int_{\partial_4\Omega}\delta T\alpha\left(T^{(i)}\right)d\Gamma - r(\delta T) \quad (3.39)$$

2.1.5. Forme discrète

Pour établir la forme discrète de l'équation (3.37) par la MEF, on dicrétise le domaine bidimensionnel Ω (cartésien ou axisymétrique) par des éléments triangulaires (figure 3.7) où $\Omega = \cup_{e=1}^{n_{elem}} \Omega_e$.

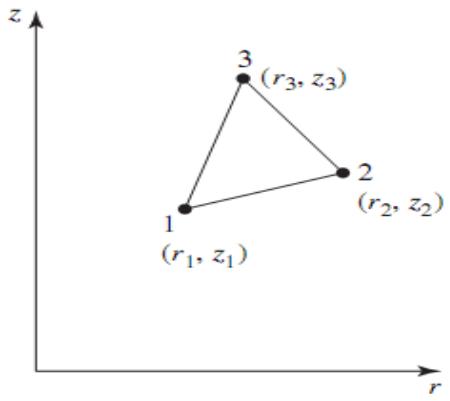


Figure 3.7 : élément triangulaire

En utilisant la notation vectorielle conventionnelle des éléments finis standards, on peut écrire :

$T^e = \langle N \rangle \{T^e\}$; $\nabla T^e = [B]\{T^e\}$; $\delta T^e = \langle \delta T^e \rangle \{N\}$; $\nabla \delta T^e = \langle \delta T^e \rangle [B]^T$;

Où :

$\langle N \rangle = \langle N_1\ N_2\ N_3 \rangle$; $\{T^e\} = \langle T_1\ T_2\ T_3 \rangle^T$;

Avec :

$$\begin{cases} N_1 = \frac{1}{2A}(a_1 + b_1 x + c_1 r) \\ N_2 = \frac{1}{2A}(a_2 + b_2 x + c_3 r) \\ N_3 = \frac{1}{2A}(a_3 + b_3 x + c_3 r) \end{cases}$$

Et :

$$\begin{cases} a_1 = x_2 r_3 - x_3 r_2 \\ a_2 = x_3 r_1 - x_1 r_3 \\ a_3 = x_1 r_2 - x_2 r_1 \end{cases} ; \begin{cases} b_1 = r_2 - r_3 \\ b_2 = r_3 - r_1 \\ b_3 = r_1 - r_2 \end{cases} ; \begin{cases} c_1 = x_3 - x_2 \\ c_2 = x_1 - x_3 \\ c_3 = x_2 - x_1 \end{cases}$$

A représente la surface de l'élément et elle est donnée par :

$$2A = det \begin{pmatrix} 1 & x_1 & r_1 \\ 1 & x_2 & r_2 \\ 1 & x_3 & r_3 \end{pmatrix} = (x_1 r_2 - x_2 r_1) + (x_3 r_1 - x_1 r_3) + (x_2 r_3 - x_3 r_2)$$

Ces fonctions de formes du problème axisymétrique sont identiques avec celles du problème cartésien.

Par analogie, la notation vectorielle de la forme itérative du problème de changement de phase est donnée comme suit:

$\Delta T^{(i)^e} = \langle N \rangle \{\Delta T^{(i)^e}\} ; T^{(i)^e} = \langle N \rangle \{T^{(i)^e}\} ; \nabla T^{(i)^e} = [B] \{T^{(i)^e}\} ; H^{(i)^e} = \langle N \rangle \{H^{(i)^e}\} ; \nabla H^{(i)^e} = [B] \{H^{(i)^e}\} ; \nabla \varphi(H^{(i)})^e = [B] \{\varphi(H^{(i)})^e\} ;$

Où :

$\{T^{(i)^e}\} = \langle T^{(i)}{}_1 \; T^{(i)}{}_2 \; T^{(i)}{}_3 \rangle^T ; \quad \{H^{(i)^e}\} = \langle H^{(i)}{}_1 \; H^{(i)}{}_2 \; H^{(i)}{}_3 \rangle^T ; \quad \{\varphi(H^{(i)})^e\} = \langle \varphi(H^{(i)})_1 \; \varphi(H^{(i)})_2 \; \varphi(H^{(i)})_3 \rangle^T$

Dans le cas des coordonnées cartésiennes :

$$d\Omega = e.dxdy \; ; [B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial y} \end{bmatrix} ;$$

Dans le cas des cordonnées axisymétrique :

$$d\Omega = 2\pi r dr dz \; ; [B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial r} & \frac{\partial N_2}{\partial r} & \frac{\partial N_3}{\partial r} \\ \frac{\partial N_1}{\partial z} & \frac{\partial N_2}{\partial z} & \frac{\partial N_3}{\partial z} \end{bmatrix}$$

Où : $d\Omega$ est le volume d'élément ; e est l'épaisseur.

La forme discrète de l'équation (3.37) peut s'écrire :

$\widetilde{DR}(T^{(i)}, H^{(i)}, \delta T) \Delta T^{(i)} =$

$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} \mu \{N\} U^T [B] d\Omega \right) \{\Delta T^{(i)^e}\} +$

$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\mu\int_{\Omega_e}\tau^e[B]^T UU^T[B]d\Omega\right)\left\{\Delta T^{(i)^e}\right\}+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}[B]^T k\left(T^{(i)}\right)[B]d\Omega\right)\left\{\Delta T^{(i)^e}\right\}+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_3\Omega}h\{N\}\langle N\rangle d\Gamma\right)\left\{\Delta T^{(i)^e}\right\}-$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_4\Omega}\alpha'\left(T^{(i)}\right)\{N\}\langle N\rangle d\Gamma\right)\left\{\Delta T^{(i)^e}\right\} \quad (3.40)$$

Le terme (3.37) peut s'écrire :

$$R\left(T^{(i)},H^{(i)},\delta T\right)=$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}\{N\}U^T[B]d\Omega\right)\left\{H^{(i)^e}\right\}+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}\tau^e[B]^T UU^T[B]d\Omega\right)\left\{H^{(i)^e}\right\}+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}[B]^T k\left(T^{(i)}\right)[B]d\Omega\right)\left\{T^{(i)^e}\right\}+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_3\Omega}h\{N\}\langle N\rangle d\Gamma\right)\left\{T^{(i)^e}\right\}-\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_4\Omega}\alpha\left(T^{(i)}\right)\{N\}d\Gamma\right)+$$
$$-r(\delta T) \quad (3.41)$$

où :

$$r(\delta T)=\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}Q\{N\}d\Omega\right)+\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_2\Omega}\bar{q}\{N\}d\Gamma\right)+$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\partial\Omega_e\cap\partial_4\Omega}hT_\infty\{N\}d\Gamma\right)+\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\int_{\Omega_e}\tau^e[B]^T UQd\Omega\right) \quad (3.42)$$

Le terme (V) dans l'équation (3.34) peut s'écrire :

$$\int_\Omega\delta T\mu\left(U.\nabla\left(T^{(i)}-\varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right)d\Omega-\int_\Omega\tau U.\nabla\delta T\mu\left(U.\nabla\left(T^{(i)}-\varphi\left(H^{(i)}\right)\right)\right)d\Omega=$$
$$-\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\mu\int_{\Omega_e}\{N\}U^T[B]d\Omega\right)\left(\left\{T^{(i)^e}\right\}-\left\{\varphi\left(H^{(i)}\right)\right\}\right)-$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}}\langle\delta T^e\rangle\left(\mu\int_{\Omega_e}\tau^e[B]^T UU^T[B]d\Omega\right)\left(\left\{T^{(i)^e}\right\}-\left\{\varphi\left(H^{(i)}\right)\right\}\right) \quad (3.43)$$

En remplaçant (3.43), (3.42), (3.41) et (3.40) dans (3.34), on obtient la forme discrète finale du problème de convection-diffusion stationnaire :

$$\left[K\left(T^{(i)}\right)\right]\left\{\Delta T^{(i)}\right\}=\underbrace{-\sum_{e=1}^{n_{ele}}R^e\left(T^{(i)},H^{(i)}\right)-\sum_{e=1}^{n_{ele}}q^e\left(T^{(i)},H^{(i)}\right)}_{\{S\}} \quad (3.44)$$

$$\left[K\left(T^{(i)}\right)\right] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \mu[Ku^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}} \mu[Ku^e_{SUPG}] + \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kd^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kconv^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kray^e] \quad (3.45)$$

$$R^e\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right) = \left([Ku^e]\left\{H^{(i)^e}\right\} + [Ku^e_{SUPG}]\left\{H^{(i)^e}\right\} + [Kd^e]\left\{T^{(i)^e}\right\} + [Kconv^e]\left\{T^{(i)^e}\right\} - \left\{f^e_{ray}\right\} - \left\{f^e_{\bar{q}}\right\} - \left\{f^e_{conv}\right\} - \left\{f^e_{Q}\right\} - \left\{f^e_{Q_{SUPG}}\right\}\right) \quad (3.46)$$

$$q^e\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right) = \left(\mu[Ku^e]\left(\left\{T^{(i)^e}\right\} - \left\{\varphi\left(H^{(i)}\right)\right\}\right) + \mu[Ku^e_{SUPG}]\left(\left\{T^{(i)^e}\right\} - \left\{\varphi\left(H^{(i)}\right)\right\}\right)\right) \quad (3.47)$$

$$[Ku] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Ku^e] \; ; \; [Ku^e] = \int_{\Omega_e} \{N\} U^T [B] d\Omega \quad (3.48)$$

$$[Ku_{SUPG}] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Ku^e_{SUPG}] \; ; \; [Ku^e_{SUPG}] = \int_{\Omega_e} \tau^e [B]^T U U^T [B] d\Omega \quad (3.49$$

$$[Kd] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kd^e] \; ; \; [Kd^e] = \int_{\Omega_e} [B]^T k\left(T^{(i)}\right)[B] d\Omega \quad (3.50)$$

$$[Kconv] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kconv^e]; [Kconv^e] = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_3\Omega} h\{N\}\langle N\rangle d\Gamma \quad (3.51)$$

$$[Kray] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} [Kray^e]; [Kray^e] = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha'\left(T^{(i)}\right)\{N\}\langle N\rangle d\Gamma \quad (3.52)$$

$$\left\{f^e_{ray}\right\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha\left(T^{(i)}\right)\{N\} d\Gamma \quad (3.53)$$

$$\left\{f^e_{conv}\right\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} hT_\infty \{N\} d\Gamma \quad (3.54)$$

$$\left\{f^e_{\bar{q}}\right\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_2\Omega} \bar{q}\{N\} d\Gamma \quad (3.55)$$

$$\left\{f^e_{Q}\right\} = \int_{\Omega_e} Q\{N\} d\Omega \quad (3.56)$$

$$\left\{f^e_{Q_{SUPG}}\right\} = \int_{\Omega_e} \tau^e [B]^T U Q d\Omega \quad (3.57)$$

La forme finale de l'équation (3.44) s'écrit :

$$\left[K\left(T^{(i)}\right)\right]\left\{\Delta T^{(i)}\right\} = \{S\}^{(i)} \quad (3.58)$$

Où :

$\left[K\left(T^{(i)}\right)\right] = \mu([Ku] + [Ku_{SUPG}]) + [Kd] + [Kconv] + [Kray]$;

$\{S\}^{(i)} = -\sum_{e=1}^{n_{ele}} R^e\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right) - \sum_{e=1}^{n_{ele}} q^e\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right)$;

$\left\{\Delta T^{(i)}\right\} = \left\{T^{(i+1)}\right\} - \left\{T^{(i)}\right\}$;

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

2.1.6. Algorithme de résolution

La solution de l'équation (3.58) s'effectue itérativement et suit l'algorithme suivant :

(a) Initialisation du champ de température et d'enthalpie :

$i = 0$, $H^{(0)} = 0$, et $T^{(0)} = \tau\left(H^{(0)}\right)$.

(b) Calcul et intégration des matrices et des vecteurs élémentaires et résiduels :

$\left[k^e\left(T^{(i)}\right)\right], \left\{R_e^{(i)}\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right)\right\}\ \left\{q_e^{(i)}\left(T^{(i)}, H^{(i)}\right)\right\}$;

(c) Assemblage et résolution du système :

$\left\{\Delta T^{(i)}\right\} = \left[K\left(T^{(i)}\right)\right]^{-1}\{S\}^{(i)}$.

(d) Actualisation du champ de température :

$\left\{T^{(i+1)}\right\} = \left\{T^{(i)}\right\} + \left\{\Delta T^{(i+1)}\right\}$.

(e) Actualisation du champ d'enthalpie en utilisant la formule relaxée :

$\left\{H^{(i+1)}\right\} = \left\{H^{(i)}\right\} + \mu\left(\left\{T^{(i+1)}\right\} - \varphi\left(\left\{H^{(i)}\right\}\right)\right)$.

(f) Test de convergence :

Si $\left\|\frac{\Delta T^{(i)}}{T^{(i)}}\right\| < TOL$

Si non : $i = i + 1$ en retournant à l'étape (b)

2.2. Problème de conduction instationnaire

Dans le cas d'un problème de changement de phase avec conduction instationnaire (équation 3.10), La forme variationnelle de Galerkine s'écrit :

$$\int_\Omega \delta T \left(\frac{\partial H}{\partial t} - div(k(T)\nabla T) + Q\right) d\Omega = 0 \qquad (3.59)$$

$$\int_\Omega \delta T \left(\frac{\partial H(T_t)}{\partial t}\right) d\Omega - \underbrace{\int_\Omega \delta T\left(div(k(T_t)\nabla T)\right) d\Omega}_{I} - \int_\Omega \delta T Q d\Omega = 0 \qquad (3.60)$$

En intégrant le terme le terme (I) par le théorème de Green-Gauss, on obtient:

$$\int_\Omega \delta T\big(div(k(T_t)\nabla T)\big)d\Omega = \underbrace{\int_{\partial\Omega} \delta T k(T_t)\nabla T.nd\Gamma}_{III} - \int_\Omega \nabla\delta T k(T_t)\nabla T d\Omega \quad (3.61)$$

Le terme de frontière (III) s'écrit :

$$\int_{\partial\Omega} \delta T k(T_t)\nabla T.nd\Gamma =$$
$$-\left(\int_{\partial_2\Omega} \delta T\bar{q}\, d\Gamma + \int_{\partial_3\Omega} \delta T h(T_\infty - T_t)\, d\Gamma + \int_{\partial_4\Omega} \delta T\alpha(T_t)d\Gamma\right) \quad (3.62)$$

En remplaçant l'équation (3.23) dans (3.21), on obtient :

$$\int_\Omega \delta T\left(\frac{\partial H(T_t)}{\partial t}\right)d\Omega + \int_\Omega \nabla\delta T k(T_t)\nabla T d\Omega + \int_{\partial_3\Omega} \delta T hT\, d\Gamma - \int_{\partial_4\Omega} \delta T\alpha(T)d\Gamma -$$
$$r(\delta T) = 0 \quad (3.63)$$

où :

$$r(\delta T) = \int_\Omega \delta T Q d\Omega + \int_{\partial_2\Omega} \delta T\bar{q}\, d\Gamma + \int_{\partial_3\Omega} \delta T hT_\infty\, d\Gamma \quad (3.64)$$

Dans le contexte de la méthode des éléments finis, la résolution numérique de ce problème est basée sur une procédure itérative de la forme discrète de l'équation (3.26).

Le terme temporel est discrétisé par un schéma implicite des différences finis. On considère un sous domaine typique $[t_n, t_{n+1}] \subset [0, \bar{t}]$ où on peut commencer d'un état convergé (T_n, H_n) à l'instant $t = t_n$, on cherche de trouver l'état (T_{n+1}, H_{n+1}) à l'instant $t = t_{n+1}$ en résolvant l'équation suivante :

$$R_{n+1}(T, H, \delta T) \equiv \int_\Omega \delta T\frac{H_{n+1}}{\Delta t}d\Omega + \int_\Omega \nabla\delta T k(T_{n+1})\nabla T_{n+1}d\Omega + \int_{\partial_3\Omega} \delta T hT_{n+1}\, d\Gamma +$$
$$\int_{\partial_4\Omega} \delta T\alpha(T_{n+1})d\Gamma - r_{n+1}(\delta T) - \int_\Omega \delta T\frac{H_n}{\Delta t}d\Omega = 0 \quad (3.65)$$

Où $\Delta t = t_{n+1} - t_n$

La solution de l'équation (3.65) dans un contexte de la MEF repose sur une procédure itérative de la forme relaxée du système discret décrit précédemment.

2.2.1. Linéarisation relaxée

Pour traiter le problème de changement de phase dans le cas de conduction instationnaire, on utilise le même principe de linéarisation relaxé décrit pour le cas stationnaire.

L'incrémentation relaxée de la fonction d'enthalpie pour le cas instationnaire est donnée par :

$$\Delta H_{n+1}^{(i)} = \mu \left[\Delta T_{n+1}^{(i)} + \left(T_{n+1}^{(i)} - \varphi\left(H_{n+1}^{(i)}\right)\right)\right] \tag{3.66}$$

où : $\Delta H_{n+1}^{(i)} = H_{n+1}^{(i+1)} - H_{n+1}^{(i)}$; $\Delta T_{n+1}^{(i)} = T_{n+1}^{(i+1)} - T_{n+1}^{(i)}$; φ est la fonction réciproque ; μ est le paramètre de relaxation ; n désigne l'instant de temps ; i l'itération à l'intérieur de l'instant.

En remplaçant l'équation (3.66) dans la linéarisation classique de $R_{n+1}(T, H, \delta T)$, on obtient la linéarisation relaxée $\widetilde{D}R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right)$ suivante :

$$\widetilde{D}R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right)\ \Delta T_{n+1}^{(i)} =$$
$$-R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right) - \underbrace{\int_{\Omega} \delta T \frac{\mu}{\Delta t}\left(T_{n+1}^{(i)} - \varphi\left(H_{n+1}^{(i)}\right)\right) d\Omega}_{VII} \tag{3.67}$$

$$\widetilde{D}R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right)\ \Delta T_{n+1}^{(i)} =$$
$$\int_{\Omega} \delta T \frac{\mu}{\Delta t}\ \Delta T_{n+1}^{(i)} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \delta T . k\left(T_{n+1}^{(i)}\right) \nabla\left(\ \Delta T_{n+1}^{(i)}\right) d\Omega + \int_{\partial_3 \Omega} \delta T h\ \Delta T_{n+1}^{(i)}\, d\Gamma +$$
$$\int_{\partial_4 \Omega} \delta T \alpha'\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\ \Delta T_{n+1}^{(i)} d\Gamma \tag{3.68}$$

$$R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right) = \int_{\Omega} \delta T \frac{H_{n+1}^{(i)}}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \delta T k\left(T_{n+1}^{(i)}\right) \nabla T_{n+1}^{(i)} d\Omega +$$
$$\int_{\partial_3 \Omega} \delta T h T_{n+1}^{(i)}\, d\Gamma + \int_{\partial_4 \Omega} \delta T \alpha\left(T_{n+1}^{(i)}\right) d\Gamma - r_{n+1}(\delta T) - \int_{\Omega} \delta T \frac{H_n}{\Delta t} d\Omega \tag{3.69}$$

2.2.2. Forme discrète

Pour établir la forme discrète de l'équation (3.67), on discrétise le domaine spatial Ω en utilisant les éléments triangulaires (figure 3.7) où $\Omega = \cup_{e=1}^{n_{elem}} \Omega_e$.
En utilisant la notation vectorielle conventionnelle des éléments finis standards, on obtient :

$T^e = \langle N \rangle \{T^e\}$; $\nabla T^e = [B]\{T^e\}$; $\delta T^e = \langle \delta T^e \rangle \{N\}$; $\nabla \delta T^e = \langle \delta T^e \rangle [B]^T$;

Où :

$\langle N \rangle = \langle N_1\ N_2\ N_3 \rangle$; $\{T^e\} = \langle T_1\ T_2\ T_3 \rangle^T$;

Avec :

$$\begin{cases} N_1 = \frac{1}{2A}(a_1 + b_1 x + c_1 y) \\ N_2 = \frac{1}{2A}(a_2 + b_2 x + c_3 y) \\ N_3 = \frac{1}{2A}(a_3 + b_3 x + c_3 y) \end{cases}$$

Et :

$$\begin{cases} a_1 = x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ a_2 = x_3 y_1 - x_1 y_3 \\ a_3 = x_1 y_2 - x_2 y_1 \end{cases} ; \begin{cases} b_1 = y_2 - y_3 \\ b_2 = y_3 - y_1 \\ b_3 = y_1 - y_2 \end{cases} ; \begin{cases} c_1 = x_3 - x_2 \\ c_2 = x_1 - x_3 \\ c_3 = x_2 - x_1 \end{cases}$$

A représente la surface de l'élément, elle est donnée par :

$$2A = det \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{pmatrix} = (x_1 y_2 - x_2 y_1) + (x_3 y_1 - x_1 y_3) + (x_2 y_3 - x_3 y_2)$$

Par analogie; la notation vectorielle de la forme itérative de problème de changement de phase est donnée par :

$\Delta T_{n+1}^{(i)\ e} = \langle N \rangle \left\{ \Delta T_{n+1}^{(i)\ e} \right\}$; $T_{n+1}^{(i)\ e} = \langle N \rangle \left\{ T_{n+1}^{(i)\ e} \right\}$; $\nabla\, T_{n+1}^{(i)\ e} =$

$[B] \left\{ T_{n+1}^{(i)\ e} \right\}$; $H_{n+1}^{(i)\ e} = \langle N \rangle \left\{ H_{n+1}^{(i)\ e} \right\}$; $\nabla\, H_{n+1}^{(i)\ e} = [B] \left\{ H_{n+1}^{(i)\ e} \right\}$; $\nabla \varphi \left(H_{n+1}^{(i)} \right)^e =$

$[B] \left\{ \varphi \left(H_{n+1}^{(i)} \right)^e \right\}$; $H_n^e = \langle N \rangle \{H_n^e\}$

Où :

$\left\{ T_{n+1}^{(i)\ e} \right\} = \langle\, T_{n+1_{(1)}}^{(i)}\ T_{n+1_{(2)}}^{(i)}\ T_{n+1_{(3)}}^{(i)} \rangle^T$;

$\left\{ H_{n+1}^{(i)\ e} \right\} = \langle\, H_{n+1_{(1)}}^{(i)}\ H_{n+1_{(2)}}^{(i)}\ H_{n+1_{(3)}}^{(i)} \rangle^T$;

$\left\{ \varphi\left(H_{n+1}^{(i)} \right)^e \right\} = \langle \varphi\left(H_{n+1}^{(i)} \right)_1\ \varphi\left(H_{n+1}^{(i)} \right)_2\ \varphi\left(H_{n+1}^{(i)} \right)_3 \rangle^T$;

$\{H_n^e\} = \langle H_{n_{(1)}}\ H_{n_{(2)}}\ H_{n_{(3)}} \rangle^T$;

Dans le cas des coordonnées cartésiennes :

$d\Omega = e.dxdy$; $[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial y} \end{bmatrix}$;

$d\Omega$ est le volume d'élément ; e est l'épaisseur.

La forme discrète de l'équation (3.67) peut s'écrire :

$$\widetilde{D}R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right)\ \Delta T_{n+1}^{(i)} = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} \frac{\mu}{\Delta t} \{N\}\langle N \rangle d\Omega \right) \left\{ \Delta T_{n+1}^{(i)} \right\} +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} [B]^T k\left(T_{n+1}^{(i)}\right)[B] d\Omega \right) \left\{ \Delta T_{n+1}^{(i)} \right\} +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_3\Omega} h\{N\}\langle N \rangle d\Gamma \right) \left\{ \Delta T_{n+1}^{(i)} \right\} +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha'\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\{N\}\langle N \rangle d\Gamma \right) \left\{ \Delta T_{n+1}^{(i)} \right\} \qquad (3.70)$$

Le terme (3.68) s'écrit :

$$R_{n+1}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}, \delta T\right) =$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} \frac{1}{\Delta t} \{N\}\langle N \rangle d\Omega \right) \left\{ H_{n+1}^{(i)\ e} \right\} +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} [B]^T k\left(T_{n+1}^{(i)}\right)[B] d\Omega \right) \left\{ T_{n+1}^{(i)\ e} \right\} +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_3\Omega} h\{N\}\langle N \rangle d\Gamma \right) \left\{ T_{n+1}^{(i)} \right\} -$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\{N\} d\Gamma \right) - \sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} \frac{1}{\Delta t} \{N\}\langle N \rangle d\Omega \right) \{H_n{}^e\} -$$
$$r_{n+1}(\delta T) \qquad (3.71)$$

Où :

$$r_{n+1}(\delta T) = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} Q\{N\} d\Omega \right) + \sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_2\Omega} \overline{q}\{N\} d\Gamma \right) +$$
$$\sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} hT_\infty\{N\} d\Gamma \right) \qquad (3.72)$$

Le terme (VII) dans l'équation s'écrit :

$$\int_\Omega \delta T \frac{\mu}{\Delta t}\left(T_{n+1}^{(i)} - \varphi\left(H_{n+1}^{(i)}\right)\right) d\Omega = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \langle \delta T^e \rangle \left(\int_{\Omega_e} \frac{\mu}{\Delta t}\{N\}\langle N\rangle d\Omega\right)\left(\left\{T_{n+1}^{(i)}{}^e\right\} - \left\{\varphi\left(H_{n+1}^{(i)}\right)\right\}\right) \quad (3.73)$$

En remplaçant (3.73), (3.72), (3.71) et (3.70) dans (3.67), on obtient la forme discrète finale du problème de conduction instationnaire :

$$\left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right]\{\Delta T_{n+1}^{(i)}\} = -R\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right) - q\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right) \quad (3.74)$$

avec :

$$\left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right] = \sum_{e=1}^{n_{ele}} \frac{\mu}{\Delta t}[M^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kd^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kconv^e] + \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kray^e] \quad (3.75)$$

$$R\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right) = \sum_{e=1}^{n_{ele}}\left(\frac{1}{\Delta t}[M^e]\left\{H_{n+1}^{(i)}{}^e\right\} + [Kd^e]\left\{T_{n+1}^{(i)}{}^e\right\} + [Kconv^e]\left\{T_{n+1}^{(i)}{}^e\right\} - \frac{1}{\Delta t}[M^e]\{H_n{}^e\} - \left\{f_{ray}^e\right\} - \left\{f_{\bar{q}}^e\right\} - \{f_{conv}^e\} - \left\{f_Q^e\right\}\right) \quad (3.76)$$

$$q\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right) = \sum_{e=1}^{n_{ele}}\left(\frac{\mu}{\Delta t}[M^e]\left(\left\{T_{n+1}^{(i)}\right\} - \left\{\varphi\left(H_{n+1}^{(i)}\right)\right\}\right)\right) \quad (3.77)$$

où :

$$[M] = \sum_{e=1}^{n_{ele}}[M^e]\ ;\ [M^e] = \int_{\Omega_e}\{N\}\langle N\rangle d\Omega \quad (3.78)$$

$$[Kd] = \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kd^e]\ ;\ [Kd^e] = \int_{\Omega_e}[B]^T k\left(T_{n+1}^{(i)}\right)[B] d\Omega \quad (3.79)$$

$$[Kconv] = \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kconv^e]\ ;\ [Kconv^e] = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_3\Omega} h\{N\}\langle N\rangle d\Gamma \quad (3.80)$$

$$[Kray] = \sum_{e=1}^{n_{ele}}[Kray^e]\ ;\ [Kray^e] = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha'\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\{N\}\langle N\rangle d\Gamma \quad (3.81)$$

$$\left\{f_{ray}^e\right\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} \alpha\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\{N\} d\Gamma \quad (3.82)$$

$$\{f_{conv}^e\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_4\Omega} hT_\infty\{N\} d\Gamma \quad (3.83)$$

$$\left\{f_{\bar{q}}^e\right\} = \int_{\partial\Omega_e \cap \partial_2\Omega} \bar{q}\{N\} d\Gamma \quad (3.84)$$

$$\{f_Q^e\} = \int_{\Omega_e} Q\{N\} d\Omega \tag{3.85}$$

La forme finale de l'équation (3.44) s'écrit :

$$\left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right]\{\Delta T_{n+1}^{(i)}\} = \{S\}_{n+1}^{(i)} \tag{3.86}$$

où :

$\left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right] = \mu[M] + [Kd] + [Kconv] + [Kray]$;

$\{S\}_{n+1}^{(i)} = -\sum_{e=1}^{n_{ele}} R^e\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right) - \sum_{e=1}^{n_{ele}} q^e\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right)$;

$\{\Delta T_{n+1}^{(i)}\} = \{T_{n+1}^{(i+1)}\} - \{T_{n+1}^{(i)}\}$;

2.2.3. Algorithme de résolution

La solution de l'équation (3.86) s'effectue itérativement suit l'algorithme suivant :

(a) Initialisation du champ de température et d'enthalpie :

$i = 0$, $H_{n+1}^{(0)} = H_n$, et $T_{n+1}^{(0)} = T_n$.

(T_n, H_n) est une solution convergée à $t = t_n$.

(b) Calcul et intégration des matrices et des vecteurs élémentaires et résiduels :

$\left[k^e\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right], \left\{R^e\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right)\right\}\ \left\{q_e^{(i)}\left(T_{n+1}^{(i)}, H_{n+1}^{(i)}\right)\right\}$;

(c) Assemblage et résolution de système :

$\{\Delta T_{n+1}^{(i)}\} = \left[K\left(T_{n+1}^{(i)}\right)\right]^{-1}\{S\}_{n+1}^{(i)}$.

(d) Actualisation du champ de température :

$\{T_{n+1}^{(i+1)}\} = \{T_{n+1}^{(i)}\} + \{\Delta T_{n+1}^{(i)}\}$.

(e) Actualisation du champ d'enthalpie en utilisant la formule relaxée :

$\{H_{n+1}^{(i+1)}\} = \{H_{n+1}^{(i)}\} + \mu\left(\{T_{n+1}^{(i+1)}\} - \varphi\left(\{H_{n+1}^{(i)}\}\right)\right)$.

(f) Test de convergence :

Si $\left\|\frac{\Delta T_{n+1}^{(i)}}{T_{n+1}^{(i)}}\right\| < TOL$

Si non : $i = i + 1$ en retournant à l'étape (b)

3. Configuration de maillage

Le domaine est discrétisé par des éléments triangulaires. Nous avons utilisé un maillage structuré (figure 3.7).

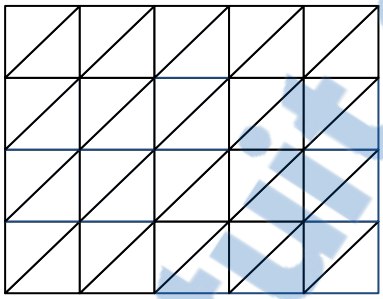


Figure 3.7 : maillage utilisé.

Cette structure nous permet de calculer dans le repère global et nous facilite d'avantage l'assemblage des matrices élémentaires en respectant la connectivité des éléments.

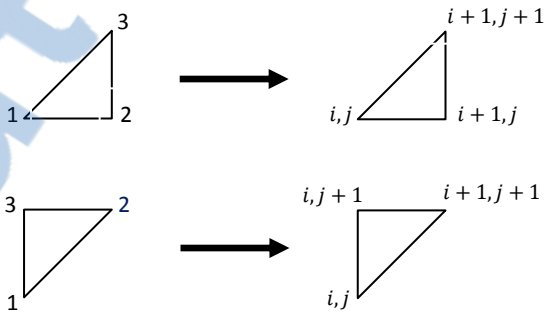
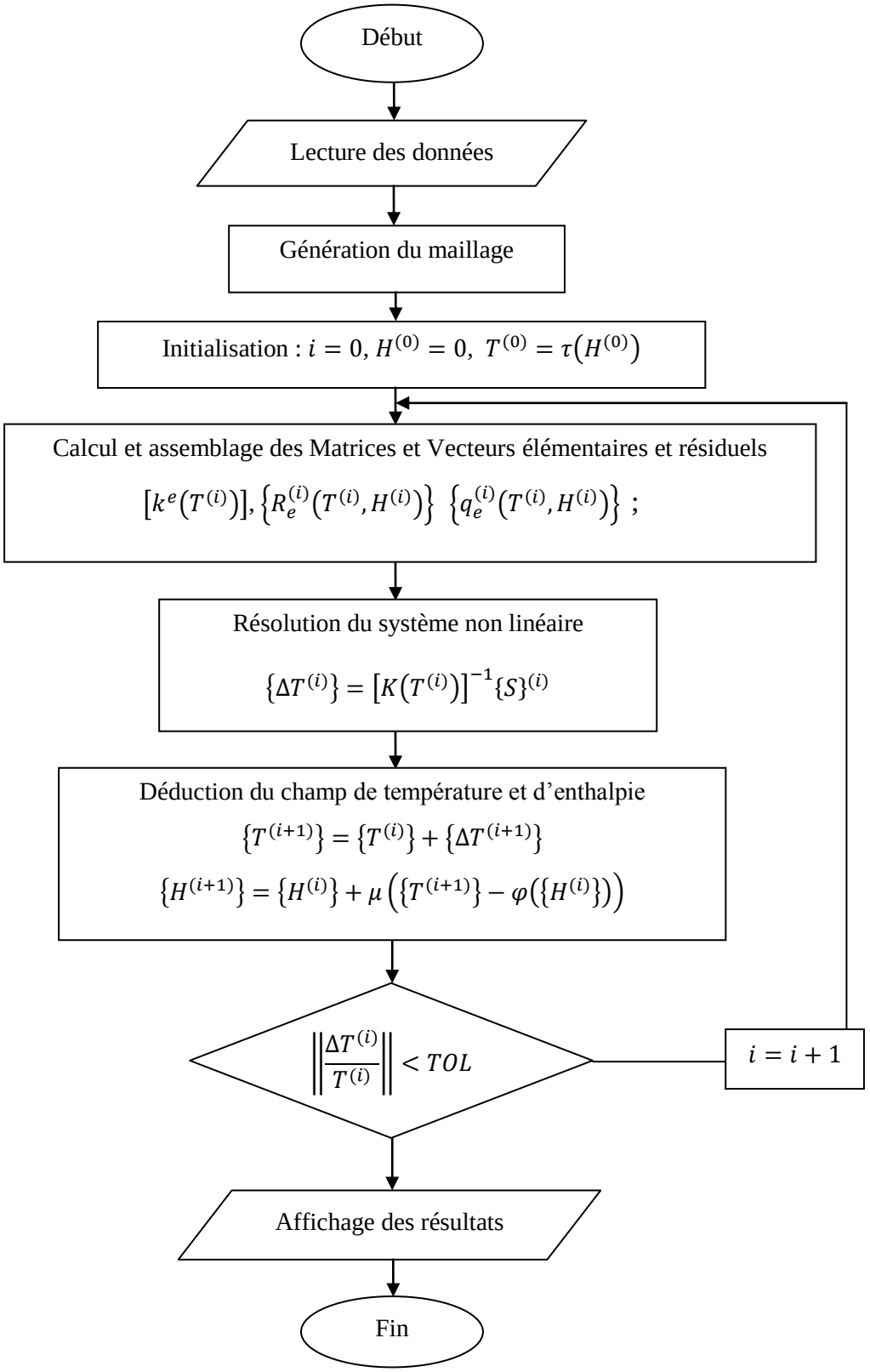


Figure 3.8 : Types d'éléments utilisés dans le maillage

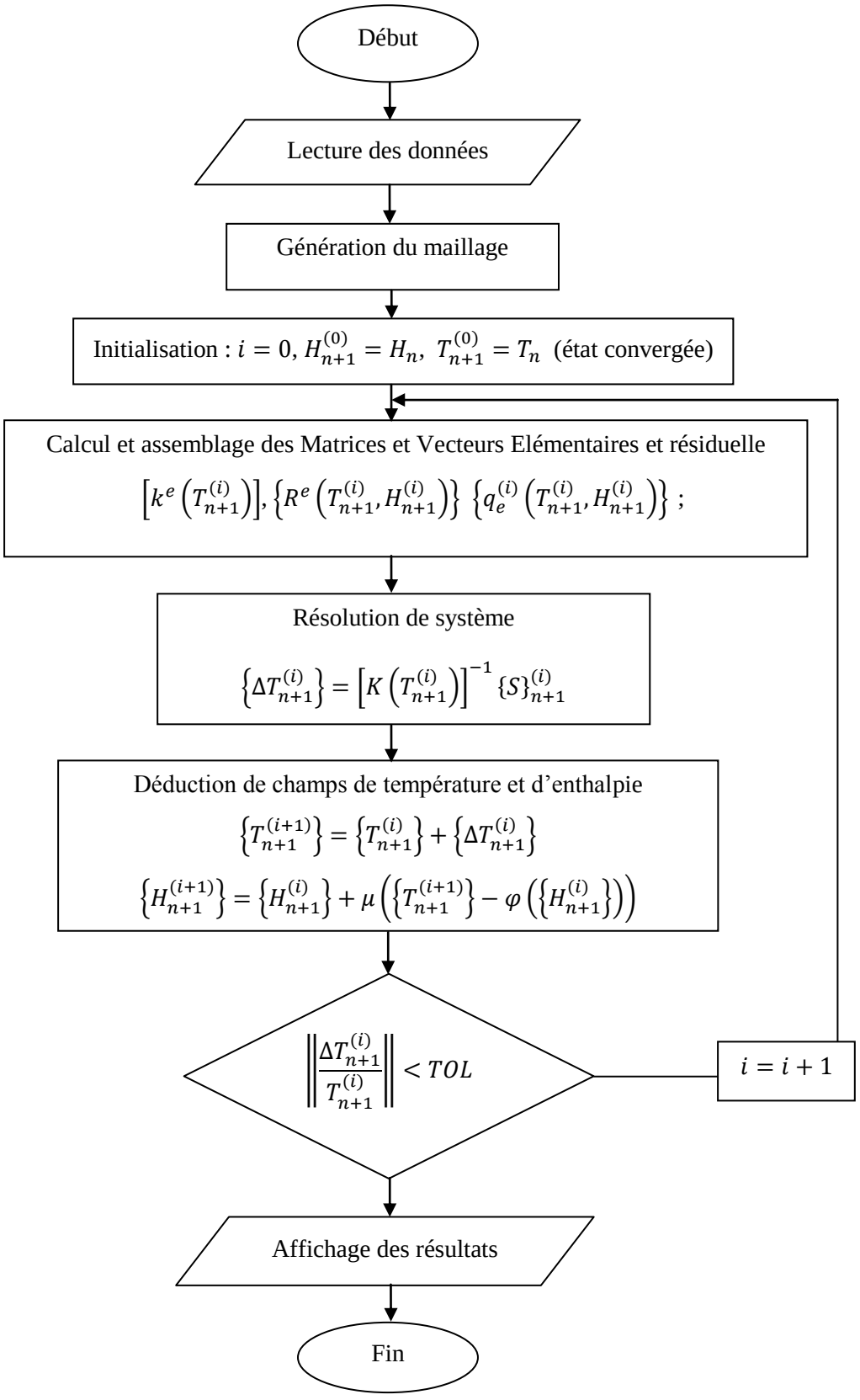
Rapport-Gratuit.com

4. Organigrammes de calcule

4.1. Cas de convection diffusion stationnaire



4.2. Cas de conduction instationnaire



Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Dans ce chapitre, Nous avons validé notre travail sur un cas test analytique de convection diffusion stationnaire puis sur un cas conduction instationnaire.

La validité de modèle a été examinée par rapport à la solution analytique pour des problèmes types dans les deux cas : convection diffusion stationnaire et conduction instationnaire (problème 2D, cartésien et axisymétrique). Différents types des conditions aux limites ont été étudiés et discutés.

1. Tests de validation

1.1. Problèmes de convection-diffusion stationnaire

Dans cette partie, on a considéré un problème unidimensionnel de changement de phase iso-thermique pour lequel les solutions analytiques existent (voir ANNEXE).

Considérons un bar unidimensionnel de longueur l avec une vitesse v et deux températures imposées dans les extrémités $T(x=0)=T_0$ et $T(x=l)=T_l$ avec $T_0 < T_m$ et $T_l > T_m$ (figure 4.1).

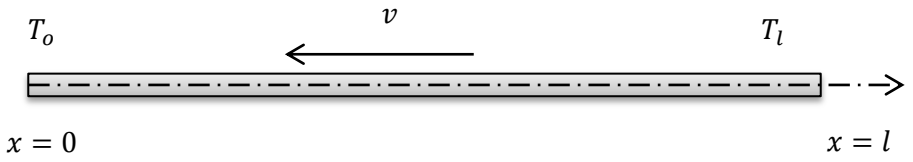


Figure 4.1 : problème de convection diffusion stationnaire

Le modèle d'enthalpie s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{cases} v\frac{\partial H(T)}{\partial x} - k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \\ T\,(x=0) = T_0 \quad et \quad T\,(x=l) = Tl \end{cases} \tag{4.1}$$

Le nombre de Peclet et celui de Stefan ont pour valeurs:

$$Pe = cvl/k \; ; \; Ste = c(T_l - T_0)/L$$

Où c est la chaleur volumique considérée comme constante et L est la chaleur latente de solidification.

Dans cette situation, on considère que le changement de phase s'effectue d'une façon iso-thermique où la fonction enthalpie $H(T)$ est donnée par :

$$H(T) = \begin{cases} c_s T & T \leq T_m \\ c_s T_m + L + c_l(T - T_m) & T \geq T_m \end{cases} \quad (4.2)$$

La forme réciproque de l'enthalpie est :

$$\tau(H) = \begin{cases} \frac{H}{c_s} & H \leq H_s = c_s T_m \\ T_m & H_s \leq H \leq H_s + L \\ T_m + \frac{H - H_s - L}{c_l} & H \geq H_s + L \end{cases} \quad (4.3)$$

Les propriétés du matériau sont :

$T_m = 600$ ℃ , $c_s = c_l = 0.333 \times 10^7$ $\frac{J}{m^3}$℃, $L = 5 \times 10^9\ J/m^3$ et $k = 150$

Pour varier les nombres de Peclet et de Stefan, on a fixé la température $T_0\ à\ 200$℃ puis on varie la température T_L et la vitesse v.

Le maillage est montré dans la figure 4.2 :

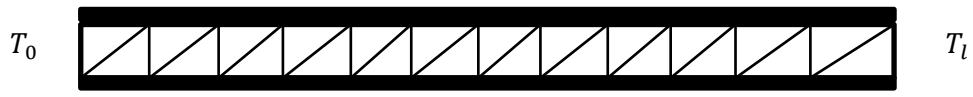


Figure 4.2 : maillage

1.1.1. Influence du nombre de Stefan

Pour étudier l'influence de nombre de Stefan sur la vitesse de convergence de l'algorithme, on a choisi trois valeurs ($Ste = 0.5, 1\ et\ 10$) pour un même nombre de Peclet ($Pe = 2$).

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Les distributions des températures adimensionnelles pour différents maillages en fonction de la position sont représentées dans les figures (4.2, 4.3 et 4.4) pour chaque nombre de Stefan.

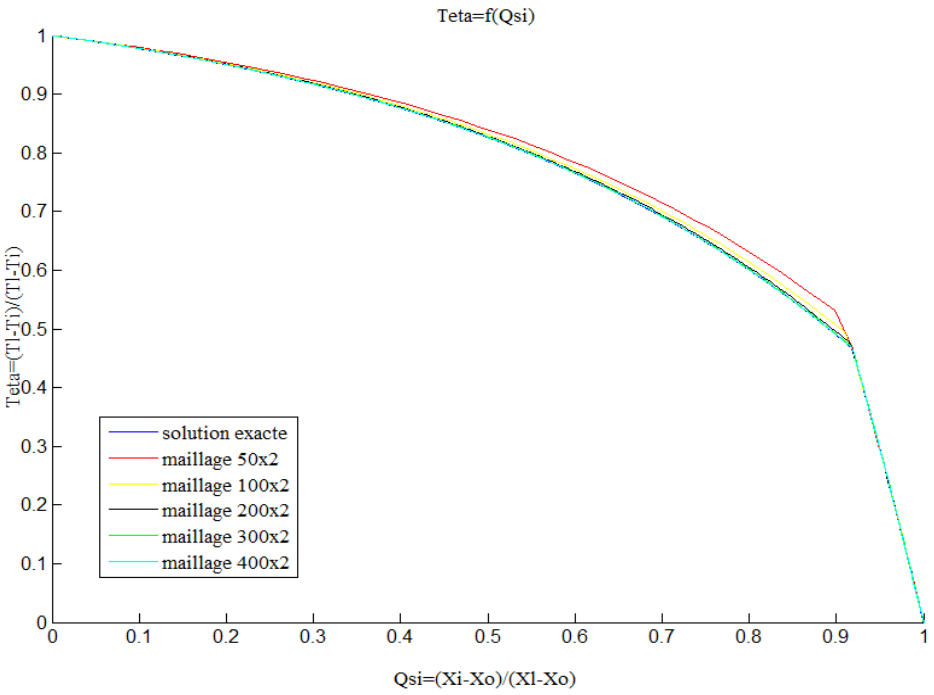


Figure 4.3 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$; Ste=0.5)

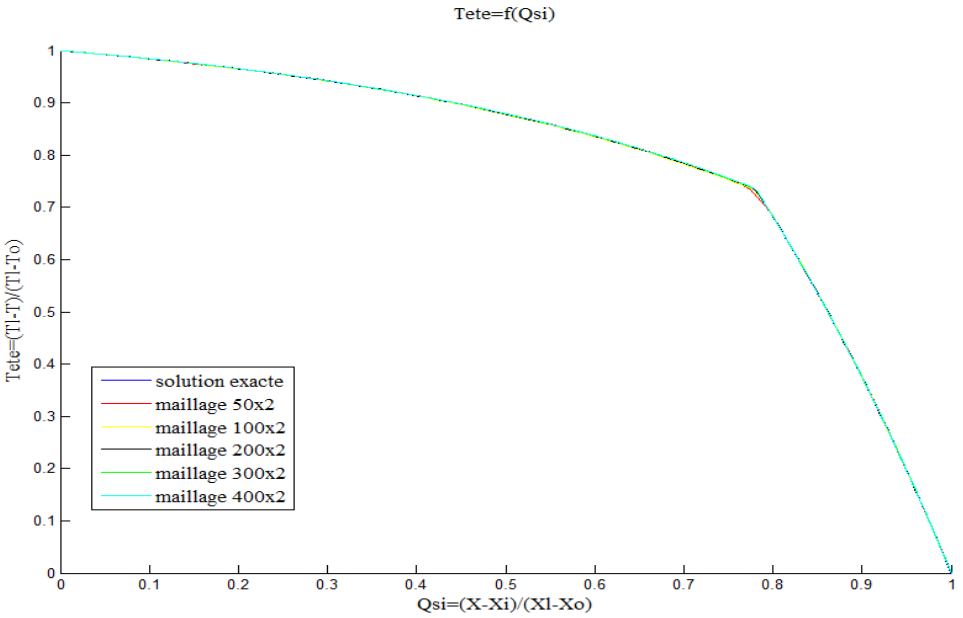


Figure 4.4 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$, Ste=1)

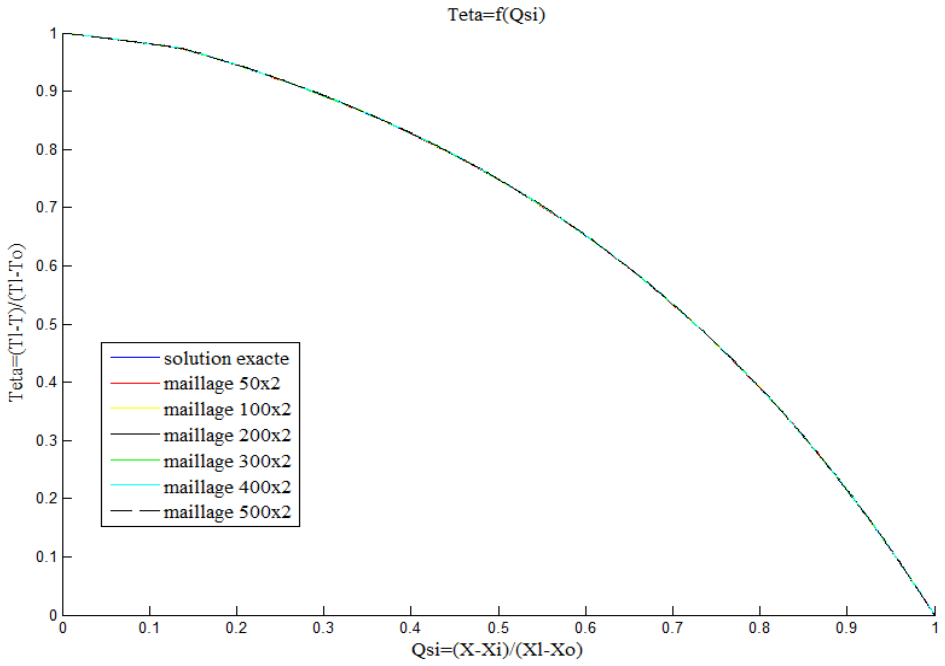


Figure 4.5 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages ($Pe = 2$, Ste=10)

Nombre de Stefan (Ste)	Position de l'interface x_{int}			Maillage convergence
	Analytique	Numérique	Erreur (%)	
Ste=0.5	0.9184	0.9175	0.9175	400x2
Ste=1	0.7810	0.7808	0.7808	400x2
Ste=10 ;	0.1373	0.1369	0.1369	500x2

Tableau 4.1 : comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents nombres de Stefan ($Ste = 0.5, 1\ et\ 10$), $Pe = 2$;

D'après les figures (4.3,4.4 et 4.5), on a remarqué que l'algorithme converge à un étalon de 10^{-7} beaucoup plus rapidement pour des grands nombres de Stefan que pour des petits nombres de Stefan avec une erreur inférieure à 1 % dans la position d'interface par rapport à la solution analytique.

1.1.2. Influence du nombre de Peclet

La sensibilité de la solution numérique d'un problème de convection-diffusion par la méthode des éléments finis due à la présence de terme convectif exige un bon choix des schémas de stabilisation pour arriver à une solution stable et précise. Nous avons opté pour le schéma SUPG. Pour valider notre modèle numérique, nous avons choisi trois nombres de Peclet ($Pe = 4, 10\ et\ 30$) pour un même nombre de Stefan ($Ste = 1$).

Les distributions des températures adimensionnelles pour différents maillage en fonction de position sont représentées dans les figures (4.6, 4.7 et 4.8) et ce pour chaque nombre de Peclet.

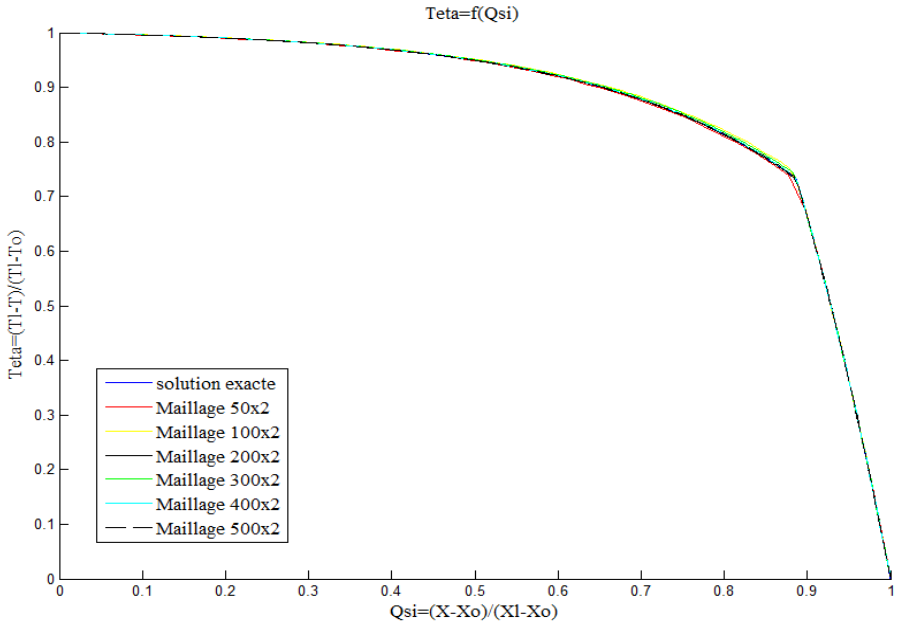


Figure 4.6 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 4$, $Ste = 1$.

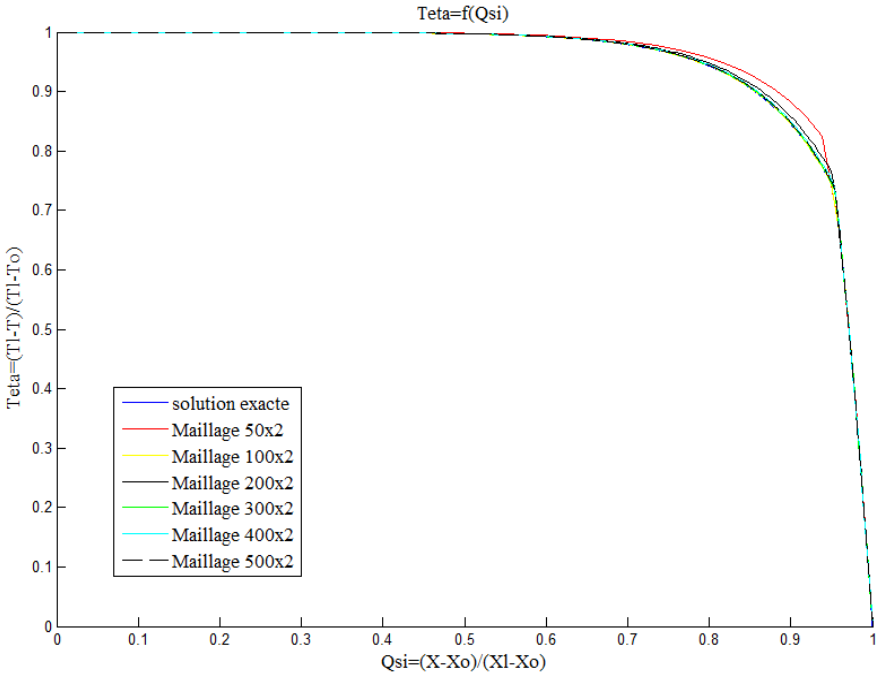


Figure 4.7 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 10$, $Ste = 1$

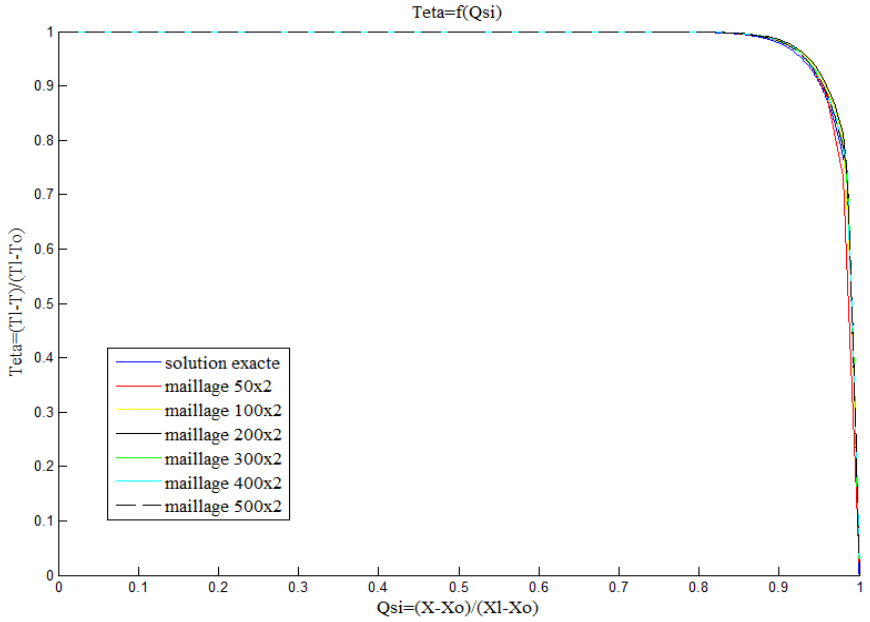


Figure 4.8 : Distribution de la température adimensionnelle pour différents maillages pour $Pe = 30$, $Ste = 1$.

Nombre de Peclet (Pe)	Position de l'interface x_{int}			Maillage convergence
	analytique	Numérique	Erreur (%)	
Pe=4	0.8863	0.8862	0.0113	300x2
Pe=10	0.9543	0.9539	0.0419	500x2
Pe=30 ;	0.9848	0.9849	0.0102	500x2

Tableau 4.2 : Comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents nombres de Peclet ($Pe = 4, 10\ et\ 30$) $Ste = 1$;

Les résultats montrent que le schéma SUPG est très stable et permet d'obtenir des positions d'interface avec une erreur inférieure de 1 %, on a remarqué aussi que, plus le nombre de Peclet est élevé, plus la convergence du modèle est rapide.

1.2. Problèmes instationnaire

Pour valider notre modèle numérique dans le cas instationnaire, on a choisi un cas unidimensionnel semi-infini avec une évolution uniforme de la température dans la phase liquide. La solution analytique pour ce cas a été fournie dans l'ANNEX.

Nous avons choisi comme métal, l'aluminium dont les propriétés thermo-physiques sont présentées dans le tableau 1.

Le processus de solidification dans le cas où le transfert de chaleur se fait uniquement par conduction est décrit par l'équation :

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial H(T)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \\ T(0,x) = Tl, T\ (x=0) = T_0 \quad et \quad T\ (x=l) = Tl \end{cases} \tag{4.4}$$

En considérant que le changement de phase s'effectue d'une façon iso-thermique identique à celle du cas précédent où $H(T)\ et\ \tau(H)$ sont donnés par les équations (4.2) et (4.3).

Propriétés	Valeurs
$k_{sol}(W/m.K)$	250
$k_{liq}(W/m.K)$	190
$c_{sol}(J/Kg.K)$	880
$c_{liq}(J/Kg.K)$	880
$\rho(Kg/m^3)$	2700
$L(J/Kg)$	267000
$T_m(°C)$	660
$T_0(°C)$	652.5
$T_l(°C)$	670
$l(m)$	1

Tableau 4.3 : propriétés thermo-physique de l'Aluminium.

Rapport-Gratuit.com

Le maillage utilisé est identique à celui de la figure 4.2.

Les distributions de la température pour différents instants (t=400s, t= 800s et t= 1200s) en fonction de la position sont représentées dans la figure (4.9) pour chaque nombre de Peclet.

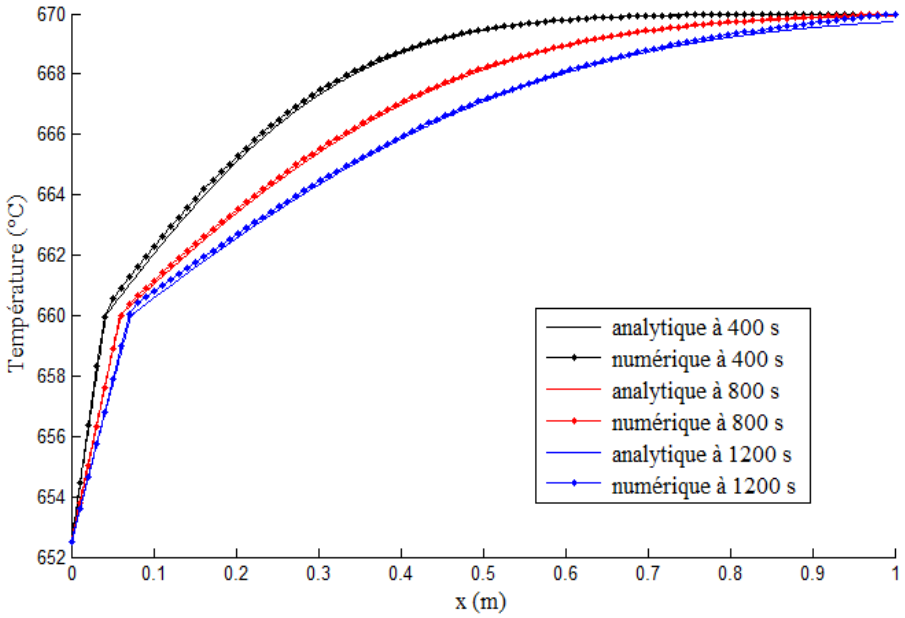


Figure 4.9 : Distribution de la température pour différents instants (400s, 800s et 1200s)

La figure 4.9 montre que nos résultats numériques sont très proches des résultats analytiques donnés par la solution Neumann.

Temps (s)	Position de l'interface x_{int} (m)			Maillage
	analytique	Numérique	Erreur (%)	
400s	0.04185	0.04092	2.22	100 x 2
800s	0.05918	0.06121	3.44	100 x 2
1200s	0.07248	0.07045	2.78	100 x 2

Tableau 4.4 : Comparaison des résultats numériques et analytiques pour différents instants (400s, 800s, 1200s) ;

Les résultats obtenus montrent que le modèle numérique est capable de capter la position de l'interface avec une erreur inférieure à 4 %. Nous remarquons que l'erreur pour ce cas présent est plus importante comparée à l'erreur du cas stationnaire précédent, cela est du au fait que la solution analytique de Neumann pour ce cas instationnaire est elle-même imprécise.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

2. Exemple d'application

2.1. Problème de moulage continu avec un refroidissement par nucléation

Le moulage continu est l'une des méthodes les plus utilisés pour la production des métaux. La réalisation et la conception de la machine de coulée continue exigent une analyse complète du processus de moulage continu. La figure 4.5 représente une configuration du problème de coulée continue qui est étudié dans ce mémoire.

Au cours de processus de moulage continu, la distribution de la température est indépendante du temps et dépend seulement des coordonnées spatiales, ce qui mène à un phénomène de transfert thermique stationnaire dans le moulage continu. En raison de la symétrie axiale du problème étudié, l'étude devient axisymétrique suivant les directions (r, z). En négligeant l'effet de la convection naturelle au cours de changement de phase, le problème de moulage continu est gouverné uniquement par l'équation de transfert de chaleur par conduction, qui représente le phénomène de transfert thermique le plus significatif au cours de solidification.

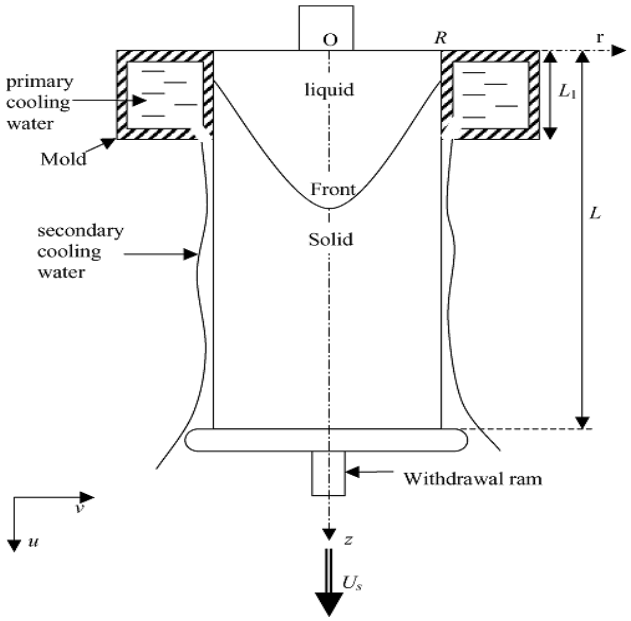


Figure 4.10 : Schématisation verticale du moulage continu [52]

L'équation d'énergie en coordonnées axisymétriques est donnée par [52] :

$$U_s \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda \frac{\partial T}{\partial r}\right) \tag{4.5}$$

Le changement de phase se fait uniquement dans une zone étroite où la relation entre l'enthalpie H et la température T est donnée par :

$$H(T) = \rho.\begin{cases} c_s T & T \le T_s \\ c_s T_s + c_{sl}(T - T_s) & T_s \le T \le T_l \\ c_s T_s + c_{sl}(T_l - T_s) + c_l(T - T_l) & T \ge T_l \end{cases} \tag{4.6}$$

où $L_s = c_{sl}(T_l - T_s)$

La forme réciproque est donnée comme suivant :

$$\tau(H) = \begin{cases} \frac{H}{c_s} & H \le H_s = c_s T_s \\ T_s + \frac{H - H_s}{c_{sl}} & H_s \le H \le H_l = H_s + c_{sl}(T_l - T_s) \\ T_l + \frac{H - H_l}{c_l} & H \ge H_l \end{cases} \tag{4.7}$$

L'alliage de l'Aluminium A6063 Al-Mg a été sélectionné pour cette simulation, les paramètres de calcul sont récapitulés dans le tableau 1 et 2 [52] :

Paramètre	Unités	Valeurs
L	m	0.0762
R	m	0.05
T_∞	K	303

Tableau 4.5 : paramètres opérationnels de la machine de coulée.

Paramètre	Unités	Valeurs
λ_s	$W/(m.K)$	215.5
λ_l	$W/(m.K)$	125
c_{ps}	$J/(Kg.K)$	992.5
c_{pl}	$J/(Kg.K)$	1075
ρ_s	Kg/m^3	2700
ρ_l	Kg/m^3	2700
T_0	K	992
T_f	K	923
$T_l - T_f$	K	4
L_s	J/Kg	355878

Tableau 4.6 : Paramètres thermo-physiques de l'alliage A6063 Al-Mg

Les conditions aux limites associées au problème étudié sont [52] :

- Pour $0 \leq r \leq R, \quad z = 0$:

$$T(0,r) = T_0 \tag{4.8}$$

- Pour $0 \leq r \leq R, \quad z = L$:

$$\frac{\partial T}{\partial z}(L,r) = 0 \tag{4.9}$$

- Pour $0 \leq z \leq L, \quad r = 0$:

$$\frac{\partial T}{\partial r}(z,0) = 0 \tag{4.10}$$

- Pour $0 \leq z \leq L, \quad r = 0$:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r}(z,R) = \begin{cases} h_1(z)[T(z,R) - T_\infty] & z \leq L_1 \\ h_2(z)[T(z,R) - T_\infty] & z > L_1 \end{cases} \tag{4.11}$$

où L_1 est la hauteur du moule. Les valeurs des coefficients effectifs de transfert thermique dans la région du moule et de l'eau de refroidissement ($h_1(z)\ et\ h_2(z)$) sont adoptées de l'analyse de l'ébullition par nucléation et la corrélation du film d'eau chuté pour un régime de convection forcée (figure 4.11) [52].

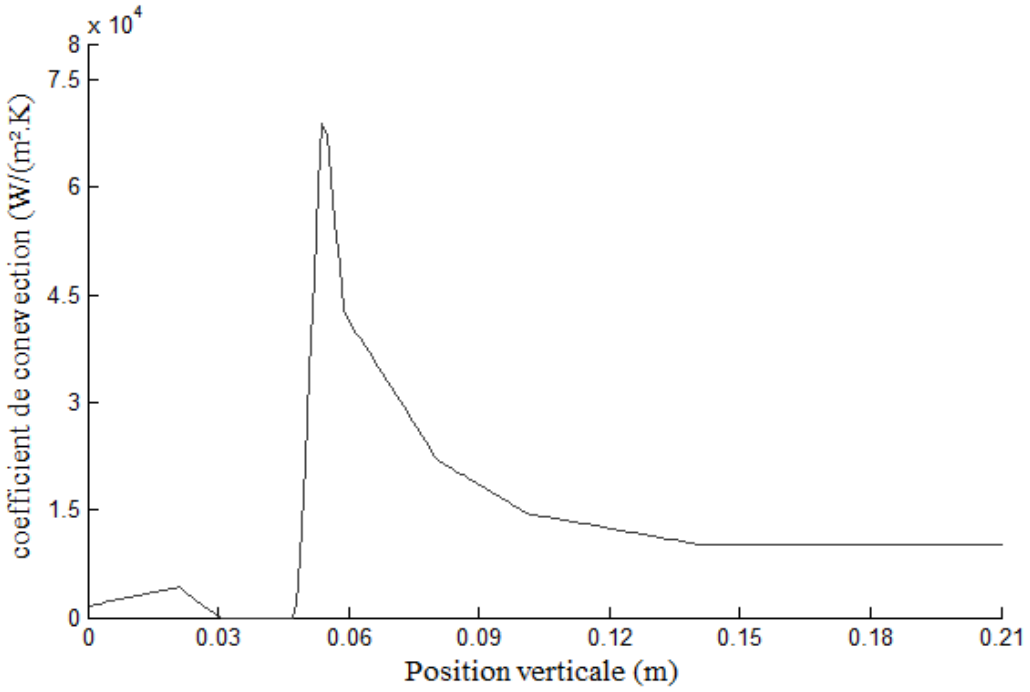


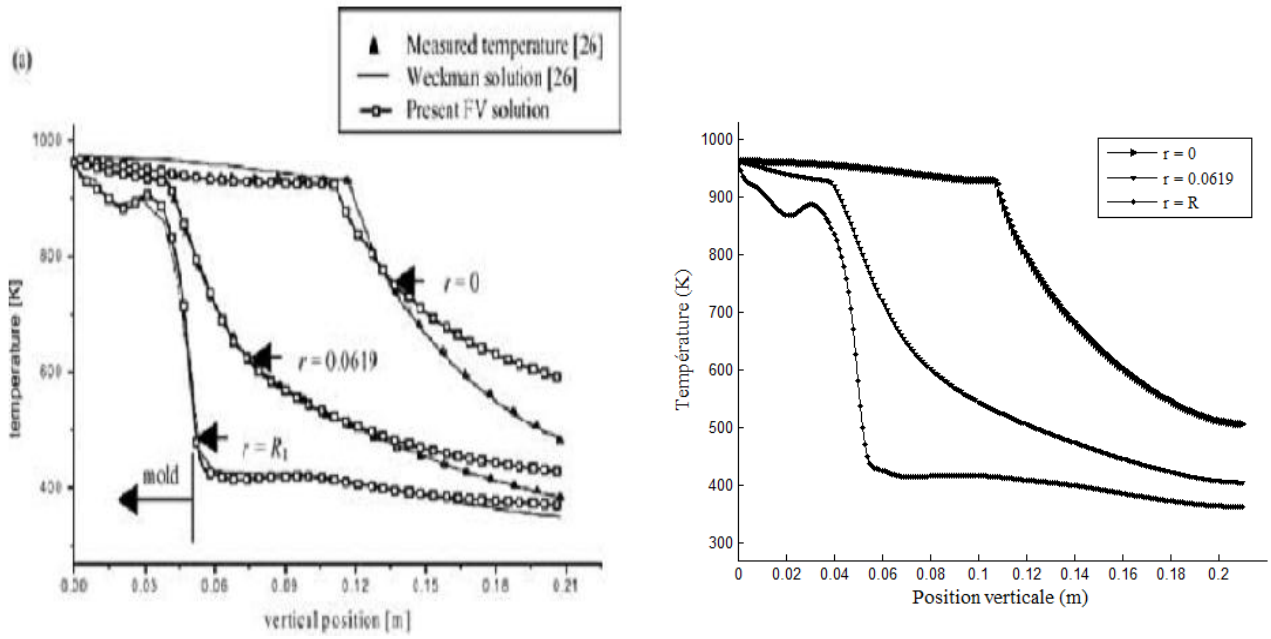
Figure 4.11 : Valeurs du coefficient effectif du transfert thermique.

Le coefficient effectif de transfert thermique dans le moule commence à des basses valeurs et continue de diminuer jusqu'à la formation du gap lingot-moule. Dans le point où le lingot est soumis à un impact direct d'eau, les coefficients de convection sont très élevés, tandis qu'au-dessous de ceci, les coefficients diminuent très rapidement à des valeurs d'enivrant $1.03 \times 10^4\ W/(m^2.K)$.

2.1.1. Résultats et discussion

Les hypothèses considérées dans la simulation du problème de coulée continue de l'alliage de l'Aluminium A6063 Al-Mg sont identiques à celles considérées dans les cas où le transfert thermique au cours de solidification est purement par conduction et contrairement au travail de Korti et Khadraoui [52] qui a ajouté l'effet de la convection naturelle dans le processus de moulage.

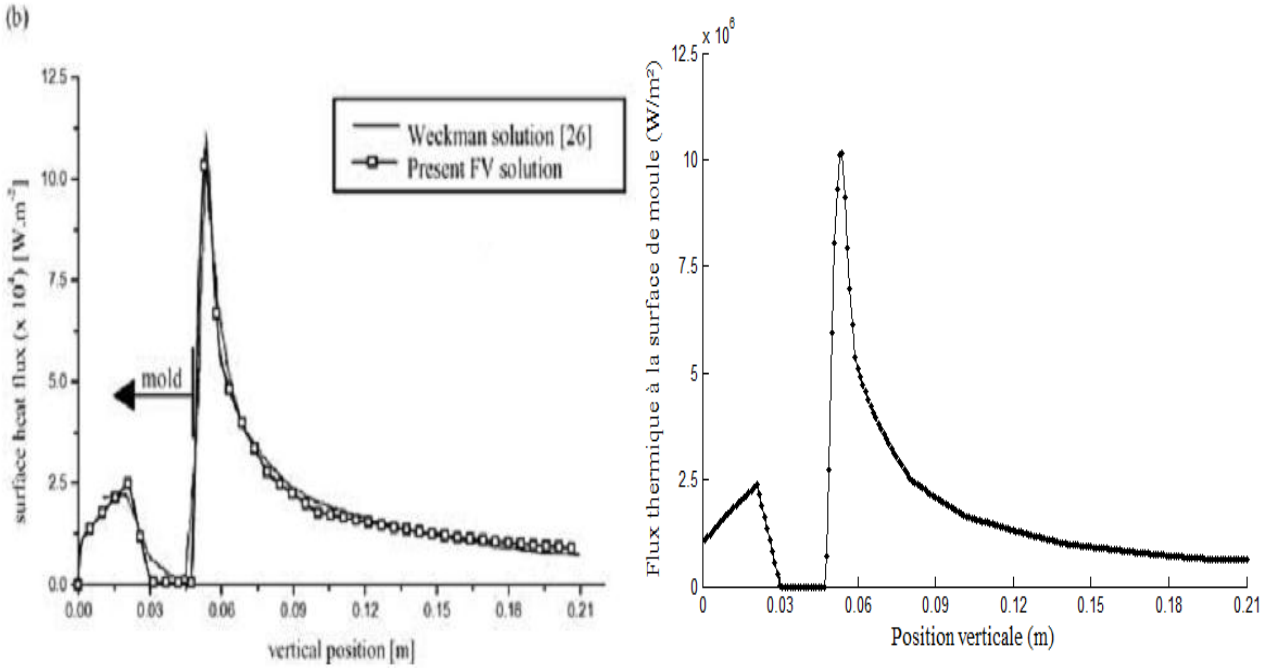
La simulation a été faite pour un maillage de 211 × 77 éléments.



(a')

Figure 4.12 : Variation de la température dans différentes positions (r=0, r=0.0619 et r=R), (a) comparaison entre les résultats obtenus par Korti, Weckmane et les valeurs expérimentales [55], (a') nos résultats numériques.

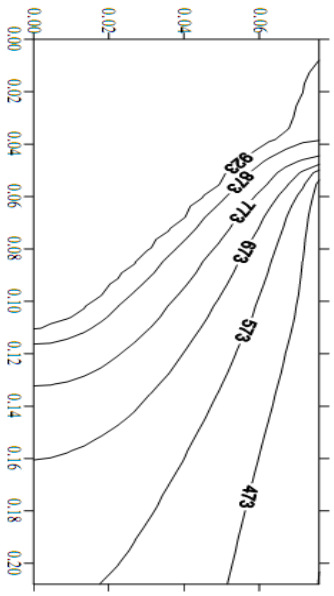
Les résultats numériques donnés par notre modèle sont présentées dans la figure (a'). Ces valeurs concordent parfaitement avec ceux de Weckman [26] qui a utilisé une méthode multi-domaine considérant l'interface comme une frontière mobile. Sur la figure (a), nous avons tracé les résultats de Weckman et ceuxder Korti [55], le décalage visible entre les deux résultats réside dans le fait que Korti a ajouté l'effet de la convection naturelle au processus de moulage.



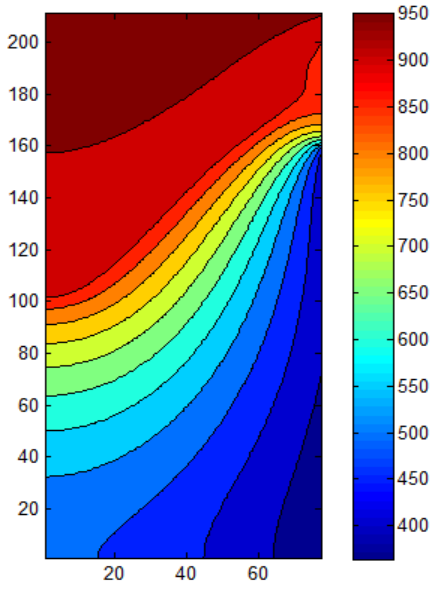
(b’)

Figure 4.13 : Flux thermique à la surface du moule, (b) comparaison entre les résultats obtenus par Korti et ceux de Weckman, (b’) nos résultats numériques

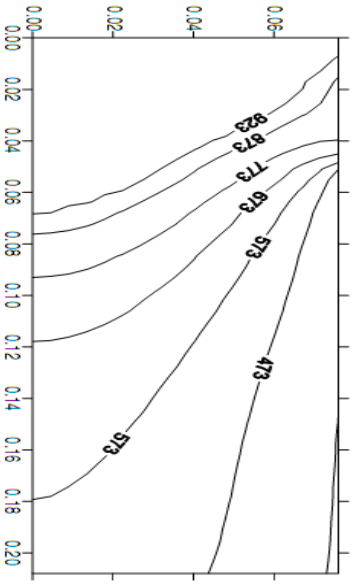
Sur la figure 4.13, nous avons tracé la variation du flux thermique à la surface du moule. Nous remarquons la très bonne concordance entre nos valeurs numériques et celles de la littérature (Weckman, Korti).


0.00
0.02
0.04
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
0.20
923
873
773
673
573
473

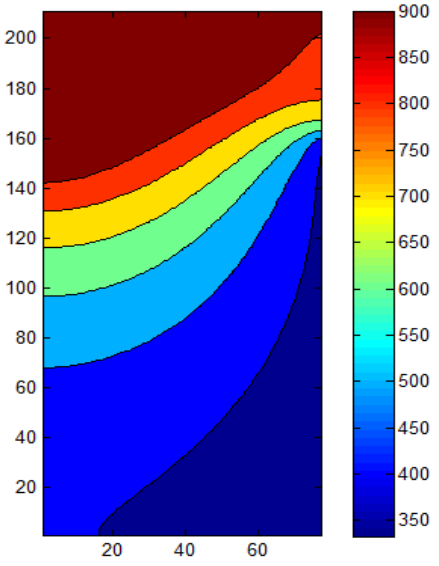
(a)


200
180
160
140
120
100
80
60
40
20
20
40
60
950
900
850
800
750
700
650
600
550
500
450
400

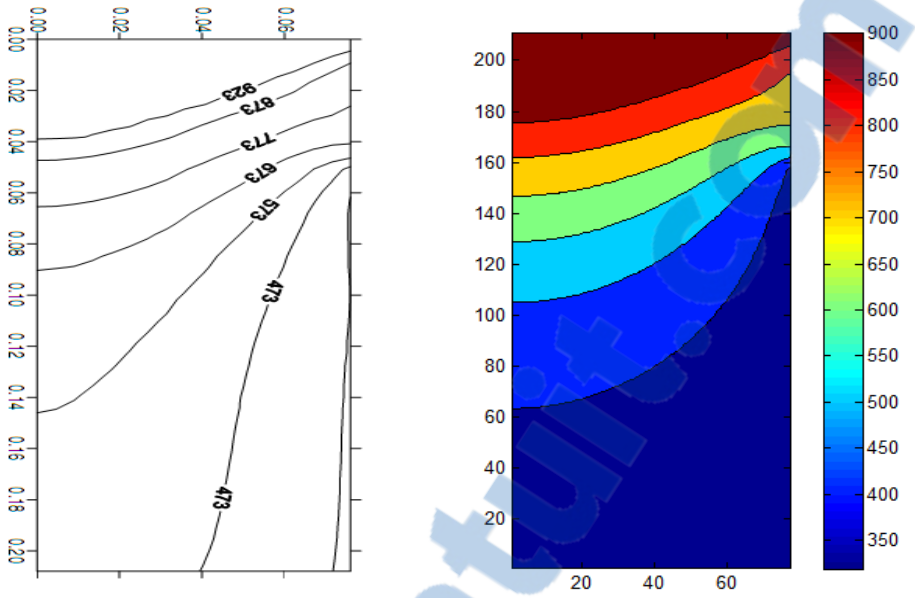
(a')


0.00
0.02
0.04
0.06
0.08
0.10
0.12
0.14
0.16
0.18
0.20
923
873
773
673
573
473

(b)


200
180
160
140
120
100
80
60
40
20
20
40
60
900
850
800
750
700
650
600
550
500
450
400
350

(b')

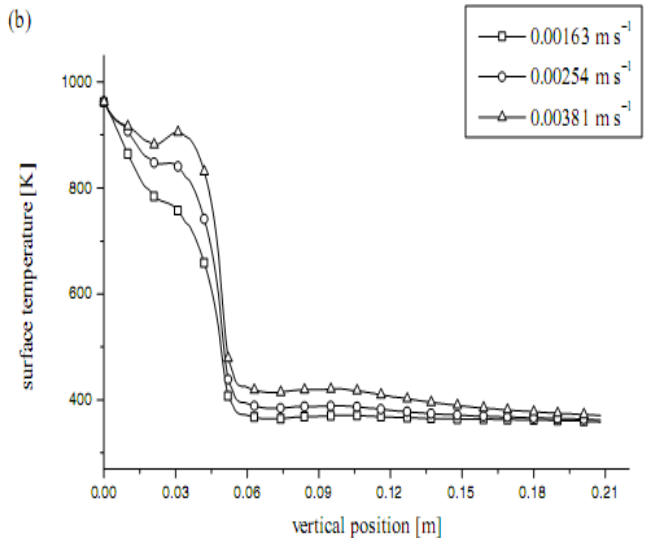


(c) (c’)

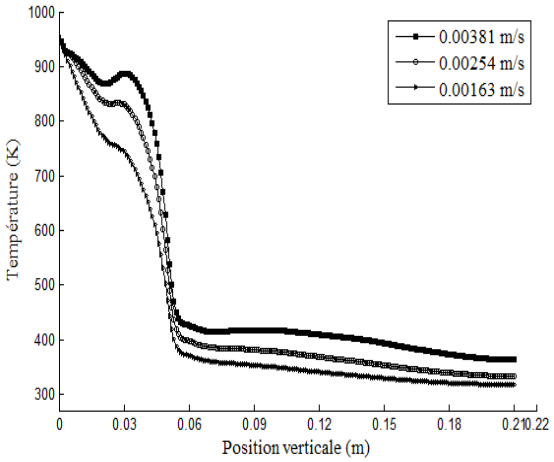
Figure 4.14 : Comparaison de champs de température obtenue pour différentes vitesse de coulé (0.00381 m/s, 0.00254 m/s, 0.00163 m/s) obtenue par Korti et Khadraoui (a, b, et c), et par le présent algorithme (a’, b’ et c’).

La figure 4.14 montre la distribution de température pour différents vitesses de moulage. Une bonne concordance a été remarquée entre les résultats obtenus par Korti et Khdraoui et nos valeurs numériques. La légère différence qui existe dans les isothermes est due à l’ajout de l’effet de convection naturelle par Korti et Khadraoui. Il a été remarqué aussi que la vitesse de moulage a une influence considérable sur la distribution de température dans l’alliage cylindrique, plus la vitesse est élevée, plus la région non solidifié est implorante.

Rapport-Gratuit.com

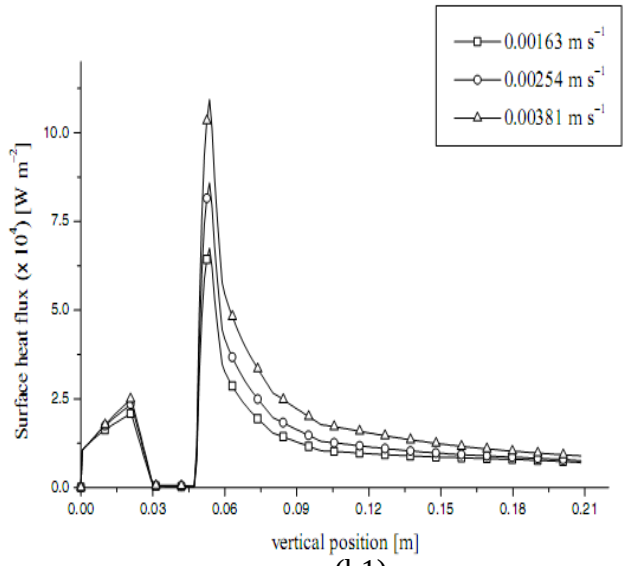


(a1)

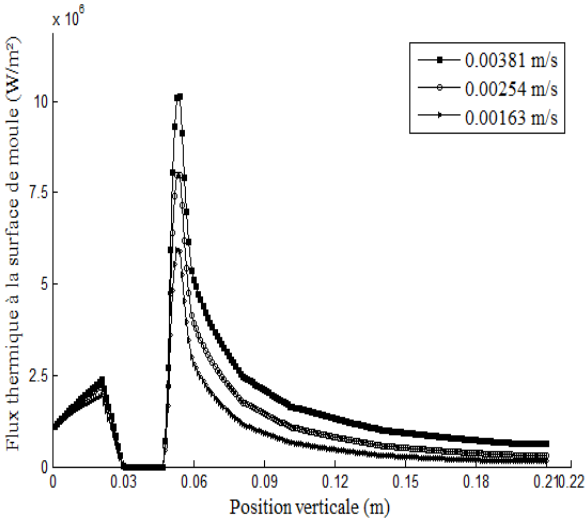


(a1’)

Figure 4.15 : effets de la vitesse de moulage U_s sur la température extérieure, comparaison entre les résultats de [52] (a1) et nos valeurs numériques (a1’)



(b1)



(b1’)

Figure 4.16 : effet de la vitesse de moulage U_s sur le flux thermique à la surface extérieure, comparaison entre les résultats de [52] (b1) et nos valeurs numériques (b1’)

Les figures 4.15 (a1) et (a1') montrent la température à la surface extérieure du lingot moulé pour différentes vitesses. Les résultats obtenus par ce présent algorithme sont très proches des valeurs de référence [52]. D'après les figures ci-dessous, il est clair que l'augmentation de la vitesse de moulage provoque une augmentation de la température dans la surface extérieure. Cela est du à la grande quantité de métal fondu qui résulte de cette augmentation. Plus la vitesse augmente et plus le front de solidification bouge vers le bas, il provoque une température élevée de l'alliage moulé.

Les figures 4.16 (b1) et (b1') montrent les valeurs du flux thermique local le long de la surface extérieure de l'alliage moulé, obtenus par la référence [52] et par notre modèle numérique. Il est noté qu'avec l'augmentation de la vitesse du moulage, le taux de transfert thermique local le long de la surface augmente. Cela est du à l'augmentation du métal fondu. La discontinuité de la courbe dans la figure 4.16 à z=0.05 m est due au changement du taux de refroidissement entre la région du moule et la région de refroidissement par l'eau.

2.2. Problème de congélation de tissu de cancer de poumon au cours de la cryochirurgie

Le problème de traitement de cancer de poumon par cryochirurgie a pris une importance considérable dans les dernières années. L'étude de changement de phase au cours la cryochirurgie représente une clé essentielle pour comprendre le comportement physique de congélation et son effet sur le tissu.

La formulation enthalpique du problème bio-thermique de changement de phase associée à la congélation et à la fusion d'un tissu est donnée par l'équation suivante :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \omega_s \rho_s c_s (T_s - T) + Q_m \qquad (4.12)$$

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

La relation enthalpie-température pour le tissu est donnée par [50] :

$$H(T) = \begin{cases} c_f(T - T_{ms}) & T < T_{ms} \\ (T - T_{ms})\left(\frac{1}{2}(c_f + c_u) + \frac{L}{(T_{ml} - T_{ms})}\right) & T_{ms} \leq T \leq T_{ml} \\ L + \frac{1}{2}(c_f + c_u)(T_{ml} - T_{ms}) + c_u(T - T_{ms}) & T > T_{ml} \end{cases} \quad (4.13)$$

où T_{ml} et T_{ms} sont les températures liquidus et solidus, elles varient entre -1 ℃ et -8 ℃ pour le tissu [50].

Les conditions aux limites sont :

- $T(x, y, t) = 37$ ℃ pour $0 \leq x \leq 4\ cm,\quad y = 0\ et\ y = 4\ cm$
- $T(x, y, t) = T_c$ pour $x = 0.1\ cm,\quad 1.8 \leq y \leq 2.2\ cm$
- $\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial x} = 0$ pour $x = 0,\ 0 \leq y \leq 1.8\ cm\ et\ 2.2 \leq y \leq 4\ cm$
- $k_t \frac{\partial T_t(x,y,t)}{\partial x} = k_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial x}$ et $T_t = T_p$ à l'interface tumeur-poumon

La condition initiale est :

- $T(x, y, 0) = 37$ ℃ (température du corps).

Pour résoudre le modèle bio-thermique présenté ci-dessus, on a adopté les hypothèses suivantes :

- Le transfert thermique est purement par conduction.
- Non considération des propriétés thermo-physique dans les températures liquidus et solidus.
- La génération de la chaleur due au métabolisme et à la perfusion d'eau est présentée quand le tissu n'est pas congelé.
- Les propriétés thermo-physiques sont différentes dans les régions congelées et non-congelées.
- Les propriétés thermiques du tissu de tumeur et du tissu sain de poumon sont différentes.

La figure 4.17 montre une représentation schématique de la géométrie du problème de cryochirurgie étudié.

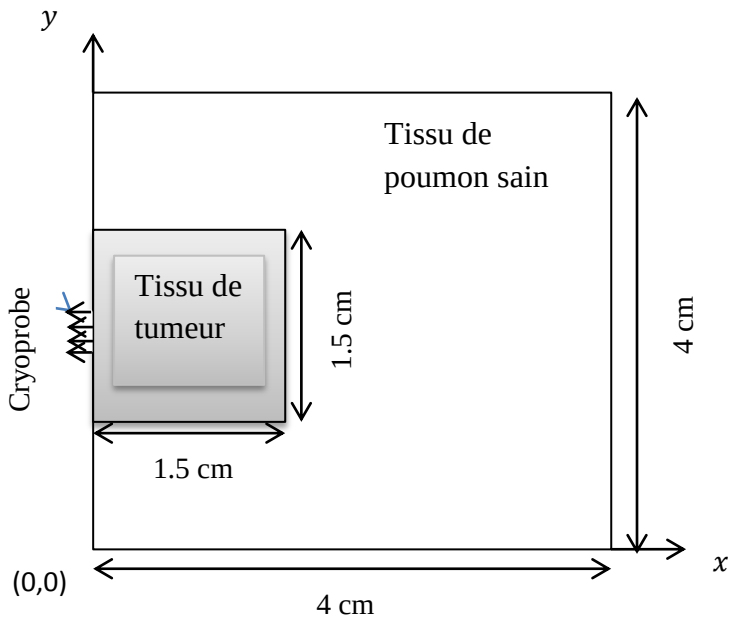


Figure 4.17 : Représentation schématique du problème de traitement de cancer de poumon par cryochirurgie.

Propriétés	Tissu de Tumeur	Tissu de Poumon	Sang
ρ_s (kg/m^3)	--	--	1005
ρ_f (kg/m^3)	921	149	--
ρ_u (kg/m^3)	998	161	--
C_s $(J/kg\,°C)$	--	--	3640
C_f $(J/kg\,°C)$	1230	1221	--
C_u $(J/kg\,°C)$	4200	4174	--
k_f $(W/m\,°C)$	2.25	0.38	--
k_u $(W/m\,°C)$	0.552	0.11	--
Q_m (W/m^3)	42000	672	--
L (J/Kg)	333000	333000	--
ω_s $(ml/s\,/ml)$	0.002	0.0005	--
T_{ms} (°C)	-8	-8	--
T_{ml} (°C)	-1	-1	--
T_s (°C)	--	--	37

Tableau 4.7 : propriétés thermo-physiques des tissus [44]

2.2.1. Résultats et discussions

Le problème représenté dans la figure 4.17 est résolu avec un maillage de 81×81 et un pas de temps de $10\,s$ et un étalon de 10^{-3} pour terminer les itérations.

Une fois le champ de température calculé, on peut déterminer l'évolution des deux fronts corresponds aux températures liquidus et solidus en fonction du temps. Pour cela, la figure 4. 18 montre le mouvement des deux fronts suivant x pour y=2 cm pour $0 \leq t \leq 400\,s$ et pour une température cryogénique de -196 °C.

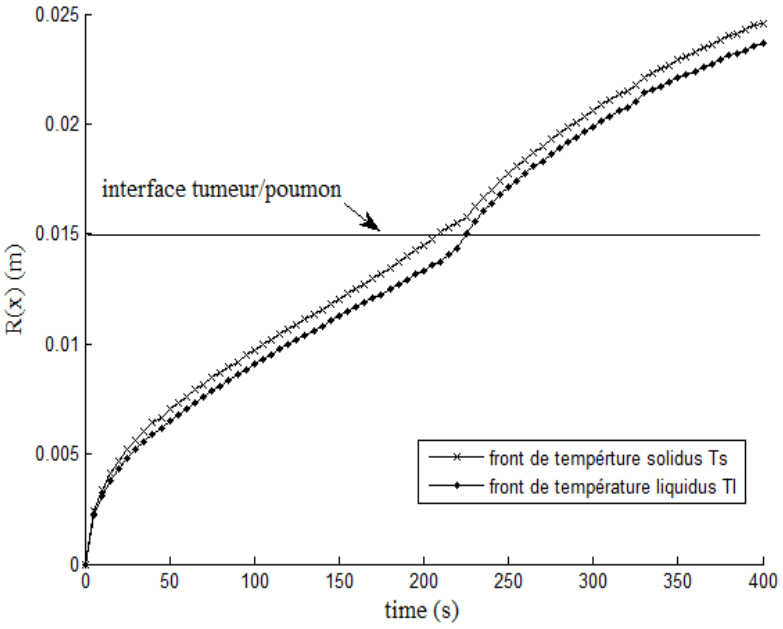


Figure 4. 18 : fronts de changement de phase au cours de congélation des tissus (tumeur et poumon) à $y = 2\,cm$.

La figure 4.18 montre que les deux fronts s'accélèrent, ils démarrent de la zone de tumeur et entrent dans la zone de tissu sain de poumon, cela est dû à la faible densité de poumon par rapport à la tumeur. Cette remarque est confirmée par l'étude de Bischof, Bastacky et Rubinsky (1992) sur le cancer de poumon.

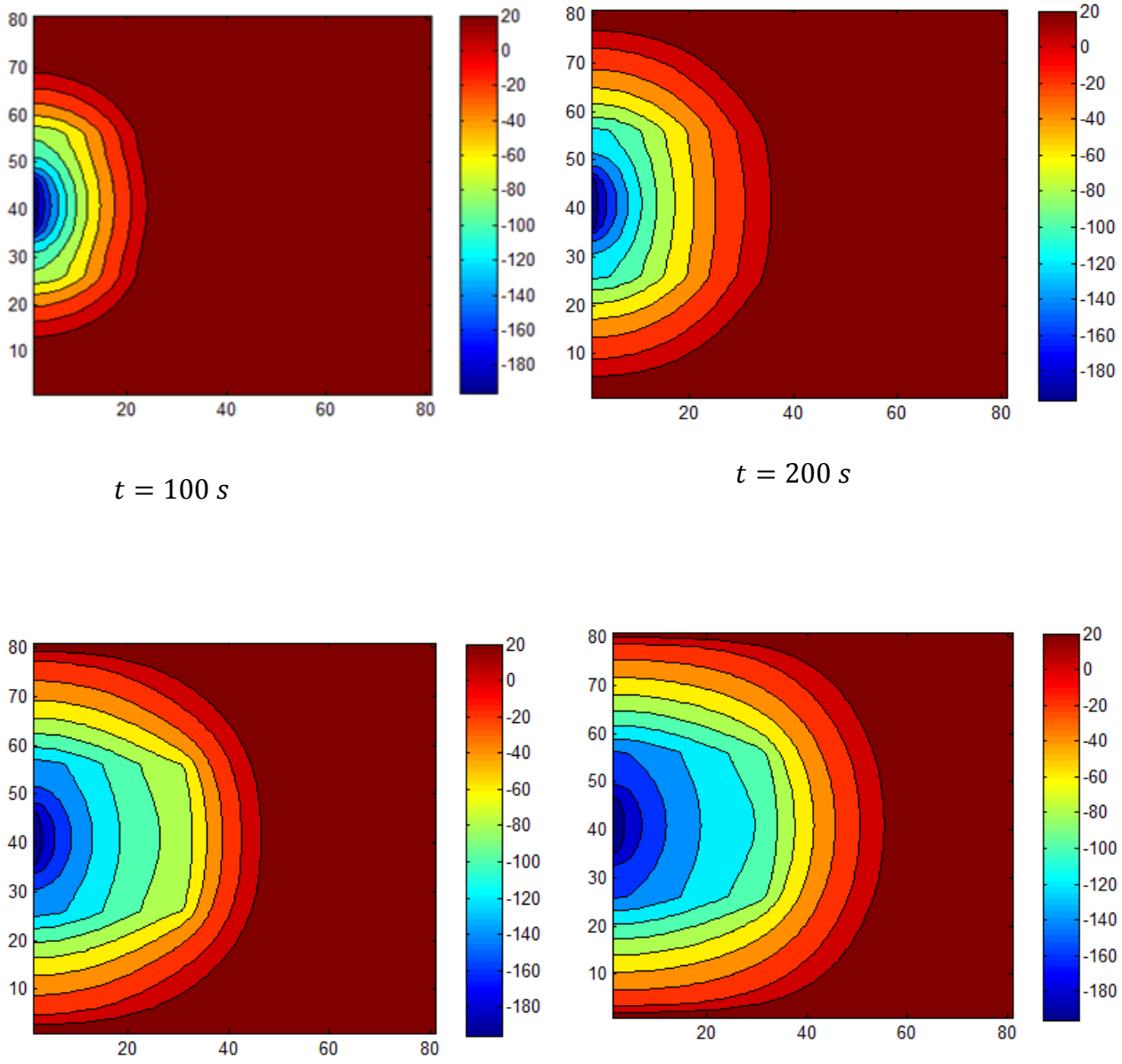


Figure 4.19 : distributions de température dans les tissus au cours de congélation

La figure 4.19 montre la distribution de température à t=100, 200, 300 et 400 s au cours de congélation. Après 400 s, la température maximale dans la zone de tumeur est de -85 °C qui est différente de -50 °C (référence de la mort des cellules). Cette information nous permet de dire que la zone de poumon saine

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

peut être touchée où il y a des endommagements des cellules, le fait qu'il est indésirable dans l'opération de cryochirurgie. Et par conséquent, nous devons contrôler le temps de congélation pour minimiser les endommagements du tissu sain.

Conclusion Générale

Dans ce mémoire, nous avons modélisé le problème de solidification en utilisant un nouvel algorithme basé sur la méthode d'enthalpie.

Un programme en MATLAB a été élaboré. Ce programme est capable de modéliser des cas en deux dimensions (cartésien et axisymétrique).

Pour valider notre modèle, deux exemples ont été traités.

Le premier est celui de la solidification au cours de processus du moulage continu. C'est un cas de convection-diffusion stationnaire avec changement de phase iso-thermiques. Pour remédier au phénomène des instabilités numériques dues au terme de convection, nous avons utilisé le schéma SUPG qui a donné des résultats très satisfaisants pour différents nombres de Stefan et de Peclet.

Le second exemple, concerne la modélisation d'un cancer de poumon, c'est un cas non stationnaire. Nous notons le caractère satisfaisant des résultats.

Ce travail nous a permis d'aboutir aux conclusions suivantes :

- Notre modèle numérique permet de traiter les deux cas de changement de phase : iso-thermique et non iso-thermique.
- Le schéma SUPG est très stable même dans le cas d'une convection dominante.
- La convergence de l'algorithme nécessite un maillage minimale dans le cas de changement de phase non iso-thermique comparé au cas iso-thermique.

En perspective, les études suivantes peuvent être réalisées :

- Etendre l'étude au cas 3D
- Considération de transport convectif au cours de solidification
- Comparaison la méthode d'enthalpie avec d'autres approches.

Références bibliographiques

[1] Lame G and Clapeyron BPE 1831, *« Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe solide »*, **Ann.Chem. Phys**. 47 250–60

[2] Stefan J 1889 S B Wien ,**Akad. Mat. Natur**. 98 473–84, 965–83 ;

[3] Stefan J 1891 ,*"Uber die theorie der eisbildung, inbesondere uber die eisbildung im polarmeer"*, **Ann. Chem. Phys**. 42 269–86

[4] Michael Ttruex, *« Numerical Simulation of Liquid-Solid, Solid-Liquid Phase Change Using Finite Element Method in h,p,k Framework with Space-Time Variationally Consistent Integral Forms »*, **Master Thesis**, University of Kansas,

[5] Han Chan, *« A Level Set Approach to the Numerical Simulation of the Stefan Problem on Non-Graded Adaptive Cartesian Grids »*, **PhD Thesis**, University of California Santa Barbara.

[6] Henry Huy and Stavros A. Argyropoulosz, *« Mathematical modelling of solidification and melting: a review »*, **Modelling Simul. Mater. Sci. Eng**. 4 (1996) pp 371-396

[7] Emilie M, Philippe G, Nicholas C et Jean R, *« A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics »*, **Journal of computational physics** 225 (2007) pp 949-974.

[8] R. W. Lewis and K. Ravindra, *« Finite element simulation of metal casting »*, **Int. J. Numer. Engng.** 47 (2000) pp 29-59.

[9] Rubinsky B. and Cravahlo EG, *"A finite element method for the solution of one-dimensional phase change problems"*, **International Journal for Heat and Mass Transfer**; 24 (1981) pp 1987-1989.

[10] Askar HG. *"The front-tracking scheme for the one-dimensional freezing problem"*, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 24 (1987) pp 859-869.

[11] Ettouney HM, Brown RA, *"Finite-element methods for steady solidification problems"* **Journal of Computational Physics**, 49 (1983) pp 118-150.

[12] Lynch DR, O'Neill K. *"Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems, with and without phase change"*, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**; 17 (1981) pp 81-96.

[13] Sullivan JM, Lynch DR. *"Numerical simulation of dendritic solidification of an under-cooled melt"*. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**; 25 (1988) pp 415- 444.

[14] Yoo J, Rubinsky B. *"Numerical computation using finite elements for the moving interface in heat transfer problems with phase transformation"*. **Numerical Heat Transfer**; 6 (1983) pp 209-222.

[15] Yoo J and Rubinsky B. *"A finite element method for the study of solidification processes in the presence of natural convection"*. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**; 23 (1986) pp 1785-1805.

[16] Carey GF and McLay R. *"Viscous flow and heat transfer with moving phase boundary"*. **ASME WA Meeting**, Heat Transfer Division, Paper No. 85-WA/HT 48 (1985).

[17] Bonnerot .R and Jamet P ,*"Numerical computation of the free boundary for the two-dimensional stefan problem by space-time finite elements"*. **Journal of Computational Physics**; 25 (1977) pp 163-181.

[18] Shamsundar .N and Rooz E, *"Numerical methods for moving boundary problems"*. In **Hand Book of Numerical Heat Transfer** by Minkowycz I, Sparrow EM, Schneider GE, Pletcher RH (eds); Wiley: New York, 1988 pp 747-786.

[19] C. Hirt, A. Amsden and J. Cook, *"An arbitrary Lagrangian–Eulerian computing method for all flow speeds"*, **Journal of Computational Physics**; 135 (2) (1997) pp 203–216.

[20] T. Hughes, W. Liu and T. Zimmermann, *"Lagrangian–Eulerian finite element formulation for incompressible viscous flows"*, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**; 29 (1981) pp 239–349.

[21] T. Tezduyar, M. Behr and J. Liou, *"A new strategy for finite-element computations involving moving boundaries and interfaces – the deforming–spatial–domain/space–time procedure: I. The concept and the preliminary tests"*, **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**; 94 (1992) pp 339–351.

[22] S. Unverdi and G. Tryggvason, *"A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows"*, **Journal of Computational Physics**; 100 (1) (1992) pp 25–37.

[23] C. Hirt and B. Nichols, *"Volume of FluidMethod (VOF) for the dynamics of free boundaries"*; **Journal of Computational Physics** 39 (1981) pp 201–225.

[24] J. Pilliot and E. Puckett, *"Second order accurate Volume-of-Fluid algorithms for tracking material interfaces"*, **Journal of Computational Physics**; 199 (2004) pp 465–502.

[25] S. Osher and J.A. Sethian, *"Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on Hamilton–Jacobi formulations"*, **Journal of Computational Physics**; 79 (1988) pp 12–49.

Rapport-Gratuit.com

[26] Eyres N R, Hartree D R, Ingham J, Jackson R, Sarjant R J and Wagstaff J B, *"The calculation of variable heat flow in solid"*, **Phil. Trans. R. Soc**, A 240 (1947) pp 1–57.

[27] Rose M E, *"A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary"*, **Math. Comput**, 14 (1960) pp 249–56.

[28] Shamsunder N and Sparrow E M, *"Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model"*, **J. Heat Transfer**, 97 (1975) pp 333–40.

[29] Bell G E and Wood A S, "*On the performance of the enthalpy method in the region of a singularity"*, **Int. J. Numer. Meth. Eng**, 19 (1983) pp 1583–92.

[30] Carslaw H S and Jaeger J C, *"Conduction of Heat in Solid"*, **Oxford: Clarendon**, 1959.

[31] Poirier D and Salcudean M, "*On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals"*, **Trans. ASME J. Heat Transfer**, 110 (1988) 562–70.

[32] Tacke K H, *"Discretization of the explicit enthalpy method for planar phase change"*, **Int. J. Numer. Meth.Eng**, 21 (1985) 543–54.

[33] Voller V R, Swaminathan C R and Thomas B G, *"Fixed grid techniques for phase change problems: a review"*, **Int. J. Numer. Meth. Eng**, 30 (1990) 875–98.

[34] Cames-Pintaux AM, Nguyen-Lamba M, *"Finite-element enthalpy method for discrete phase change"*, **Numerical HeatTransfer**, 9 (1986) pp 403- 417.

[35] Pham QT, *"The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change"*, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, 29 (1986) pp 285-291.

[36] Tamma KK, Namburu RR, *"Prediction of thermal stress and deformations due to phase change in solidifying objects via flux/stress based finite element representations"*, **Int. J. Numer. Meth. Eng,** 29 (1990) pp 1473-1485.

[37] Thevoz Ph, Rappaz M, Desbiolles JL, *"3-MOS: a general FEM code for the prediction of microstructures in castings"*, **In Light Metals 1990, Bickert CM (ed.). The Minerals, Metals and Materials Society**, (1990) pp 975-984

[38] Nedjar B, *"An enthalpy-based finite element method for non-linear heat problems involving phase change"*, **computer & structures**, 80 (2002) pp 9-21.

[39] JohnW. Cahn and John E. Hilliard. *"Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy"*; **The Journal of Chemical Physics**, 28(2) (1958) pp 1015–1031,.

[40] Lev D. Landau, EvgenijMichailoviˇ c Lifšic, and Lev P. Pitaevskij, *"Statistical Physics: Course of Theoretical Physics"*; **Pergamon Press plc**, London, 1980.

[41] Gafur, M. A., Nasrul Haque, M., Narayan Prabhu, and K., *"Effect of Chill Thickness and Superheat on Casting/Chill Interfacial Heat Transfer during Solidification of Commercially Pure Aluminum"*, **Journal of Materials Processing Technology**, 133 (2003) pp 257-265.

[42] Wu, M., Augthun, M., Wagner, I., Sahm, P. R., and Spiekermann, H., *"Numerical Simulation of th e Casting Process of Titanium Tooth Crowns and Bridges"*, **Journal of Materials Science: Materials in Medicine**, 12 (2001) pp 485-490.

[43] Shepel, S. V., and Paolucci, S., *"Numerical Simulation of Filling and Solidification of Permanent Mold Castings"*, **Applied Thermal Engineering**, 22 (2002) pp 229-248.

[44] Schweikert, R. J., and Keanini, R. G., *"A Finite Element and Order of Magnitude Analysis of Cryosurgery in the Lung"*, **International Communications in Heat and Mass Transfer**, 26 (1999) pp 1-12.

[45] Baissalov, R., Sandison, G. A., Donnelly, B. J., Saliken, J. C., McKinnon, J. G., Muldrew, K., and Rewcastle, J. C., **"A S emi-empirical Treatment Planning Model for Optimization of Multiprobe Cryosurgery"**, *Physics in Medicine and Biology*, 45 (2000) pp 1085-1098.

[46] Anahita Ayasoufi, *"Numerical simulation of heat conduction with melting and/or freezing by space-time conservation element and solution element method"*,**PhD thesis** (2004), University of Toledo

[47] Robert .J.S, Russel .G.K, *"A finite element and order of magnitude analysis of cryosurgery in the lung"*, **Int. Comm. Heat Mass Transfer**, 26 (1999) pp 1-12.

[48] K.J. Chua, *"computer simulations on multi-probe freezing of irregularly shaped tumors"*, **Computer in Biology and Medecine**, 41 (2011) pp 493-505.

[49] Eric .L, G.R. Liu, Vincent .T, Z.C. He, *"An efficient algorithm for phase change problem in tumor treatment using αFEM"*, **International journal of thermal sciences**, 49 (2010) pp 1954-1967

[50] Nothan .E, J.C. Bischof, *"cryosurgery of normal and tumor tissue in the Dorsal Skin Flap Chamber: Part I – Thermal Response",* **Journal of Biomechanical engineering**, 123 (2001) pp 301-308.

[51] Elie Hachem, *"Stabilized Finite Element Method for Heat Transfer and Turbulent Flows inside Industrial Furnaces"*,**PhD thesis** (2009), Ecole des Mines de Paris.

[52] A.N. Korti, Y. Khadraoui, *"A numerical simulation of the DC continues casting using average heat capacity"*, **Scandinavian Journal of Metallurgy**, 33 (2004) pp 347-354.

Rapport-gratuit.com
LE NUMERO 1 MONDIAL DU MÉMOIRES

Solutions analytiques :

1. Problème 1D de convection-diffusion stationnaire :

$$\begin{cases} v\frac{\partial H(T)}{\partial x} - k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \\ T\ (x=0) = T_0 \quad et \quad T\ (x=l) = Tl \end{cases} \tag{1}$$

La solution analytique de l'équation est donnée pour l'équation multi-domaine définis dans le domaine $[x_0, x_h]$suivante :

- Pour la zone solide :
  $$\rho_s c_s v\frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_s\frac{\partial T_s}{\partial x}\right) \tag{2}$$
- Pour la zone liquide :
  $$\rho_l c_l v\frac{\partial T_l}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_l\frac{\partial T_l}{\partial x}\right) \tag{3}$$

Sachant que x_{int} est la position de front qui sépare les deux phases :

$$\begin{cases} T(x_{int}) = T_m \\ k_s\left.\frac{\partial T_s(x)}{\partial x}\right|_{x=x_{int}} - k_l\left.\frac{\partial T_l(x)}{\partial x}\right|_{x=x_{int}} = \rho_s L v_m.n \end{cases} \tag{4}$$

La forme adimensionnelle de ce problème de solidification stationnaire est comme suivant :

$$Pe\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} \tag{5}$$

Avec : $0 < \xi < 1$

$$Pe = \frac{\rho c v(x_h - x_0)}{k} \tag{6}$$

Où :

$$\Theta = \frac{T(x)-T_h}{T_0-T_h},\ \xi = \frac{x-x_0}{x_h-x_0}$$

La solution analytique de ce problème dans le cas des deux températures imposées est donnée comme suivant :

$$\Theta(\xi) = \begin{cases} (1-\Theta_m)\frac{1-e^{Pe(\xi-\xi_m)}}{1-e^{-Pe\xi_m}} + \Theta_m & 0 \le \xi \le \xi_m \\ \Theta_m\frac{1-e^{Pe(\xi-1)}}{1-e^{-Pe(\xi_m-1)}} & \xi_m \le \xi \le 1 \end{cases} \tag{7}$$

Où :

$\Theta_m = \frac{T_m - T_h}{T_0 - T_h}$, $\xi_m = \frac{x_{int} - x_0}{x_h - x_0}$;

La position de l'interface est donnée par l'équation suivante :

$$\xi_m = (\log(\psi)/k) + 1 \tag{8}$$

ψ est la solution de l'équation suivante :

$$\left(1 + \frac{1}{Ste}\right)\psi^2 - \left(\frac{e^{-Pe}}{Ste} + \Theta_m(e^{-Pe} - 1) + 1\right)\psi + \frac{e^{-Pe}}{Ste} = 0 \tag{9}$$

Avec : $Ste = \frac{\rho c(T_0 - T_h)}{\rho L}$

2. Problème 1D de conduction instationnaire (cas de solidification d'un domaine semi-infini avec variation uniforme de température) :

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial H(T)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \\ T(0,x) = Tl, T\,(x=0) = T_0 \quad et \quad T\,(x=l) = Tl \end{cases} \tag{10}$$

La solution exacte de problème de solidification instationnaire a été donnée dans le cas où $x = l \to \infty$; cette hypothèse nous permet de considérer le domaine $[x_0, x_l]$ comme $[x_0, \infty]$

Le problème de changement de phase est décrit par le formulation multi-domaine suivante :

Dans la phase solide :

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = a_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \qquad 0 < x < x_{int};\ t > 0 \tag{11}$$

Avec :

$T_s|_{x=0} = T_0 \quad t > 0,$

$T_s|_{x=x_{int}} = T_m \quad t > 0,$

Dans la phase liquide :

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = a_l \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \qquad x_{int} < x < \infty;\ t > 0 \tag{12}$$

Avec :

$T_s|_{x=x_{int}} = T_m \quad t > 0,$

$T_s|_{x=\infty} = T_p \quad t > 0,$

La condition initiale est :

$T_l|_{t=0} = T_p$,

À l'interface :

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x}\Big|_{x=x_{int}} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x}\Big|_{x=x_{int}} = \rho_s L \frac{dx_{int}(t)}{dt} \quad (13)$$

La position de l'interface est donnée par

$$x_{int}(t) = 2\beta\sqrt{a_s t} \quad (14)$$

La solution de cette équation est donnée par :

$$\begin{cases} T_s(x,t) = T_0 + (T_m - T_0).\dfrac{\mathrm{erf}(x/\sqrt{4a_s t})}{\mathrm{erf}\,\beta} \\ T_l(x,t) = T_p + (T_m - T_p).\dfrac{\mathrm{erf\,c}(x/\sqrt{4a_l t})}{\mathrm{erf\,c}\left(\beta\sqrt{\frac{a_s}{a_l}}\right)} \end{cases} \quad (15)$$

β est la racine de l'équation non linéaire suivante :

$$\frac{e^{-\beta^2}}{erf\beta} + \frac{k_l}{k_s}\sqrt{\frac{a_s}{a_l}}\frac{T_m - T_p}{T_m - T_0}\frac{e^{-\beta^2(a_s/a_l)}}{erfc\left(\beta\sqrt{\frac{a_s}{a_l}}\right)} = \frac{\beta\sqrt{\pi}}{Ste_s} \quad (16)$$

Où : $Ste_s = \frac{c_s(T_m - T_0)}{L}$