HAL
open science

Simulation numérique des échanges thermiques et des contraintes thermoélastiques dans un tirage Czochralski

Christian Perret

To cite this version:

Christian Perret. Simulation numérique des échanges thermiques et des contraintes thermoélastiques dans un tirage Czochralski. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1989. Français. NNT : . tel-00335809

HAL Id: tel-00335809

https://theses.hal.science/tel-00335809v1

Submitted on 30 Oct 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

TU6672

THESE

présentée par

PERRET Christian

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE 3eme CYCLE
DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER - GRENOBLE I

SIMULATION NUMÉRIQUE DES ÉCHANGES THERMIQUES ET DES CONTRAINTES THERMOÉLASTIQUES DANS UN TIRAGE CZOCHRALSKI

thèse soutenue le 25 Octobre 1989

composition du jury:

J. BLUM	Président
A. LATROBE	
E. MOLVA	
J.C. PAUMIER	
P. WITOMSKI	

Thèse préparée au laboratoire TIM3-IMAG et au Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble :
IRDI /Division LETI / Département optronique.

Ce travail a été préparé au laboratoire TIM3-IMAG et au centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble : IRDI /Division LETI / Département optronique.

Je remercie les membres du jury, et en particulier Monsieur A.LATROBE qui a accepté d'y participer malgré la charge de sa fonction et Monsieur J.BLUM d'en avoir assuré la présidence.

Je remercie Monsieur P.WITOMSKI de m'avoir proposé cette thèse, de l'avoir dirigée et relue. Je lui exprime ma reconnaissance pour ses conseils et son soutien actif qui m'ont aidé à mener à bien ce travail.

Je remercie Monsieur J.C.PAUMIER pour l'interêt qu'il a porté à mon travail et pour ses conseils.

Je remercie Monsieur E.MOLVA et son équipe du LETI, de m'avoir accueilli parmi eux, pour la mise à ma disposition des moyens informatiques nécessaires. Je les remercie de leur collaboration et de m'avoir fait béneficier de leurs travaux et de leurs connaissances pour la validation de mon logiciel.

Enfin, je remercie Monsieur R.KLEIN du LETI, qui m'a assisté et conseillé dans les réalisations informatiques , avec disponibilité et sympathie.

INTRODUCTION

Cette thèse s'inscrit dans l'ensemble des travaux actuels de modélisation et de simulation du tirage Czochralski de l'AsGa (arséniure de gallium) Les phénomènes physiques intervenant dans ce procédé de fabrication doivent être maîtrisés afin d'obtenir des monocristaux de qualité, sans dislocations.

Les premiers de ces travaux ont porté sur des modèles simples, avec un cristal de forme cylindrique et un transport diffusif de la chaleur dans le bain et le cristal. Le rayonnement est calculé de manière simplifié. Nous citerons pour exemple :

- M.Duseaux (1983): (cf[1]) le calcul thermique est suivi du calcul axisymétrique des contraintes.
- A.S.Jordan (1985) : (cf[2]) le calcul thermique est associé à un calcul de ménisque du bain et de l'encapsulant.

On a eu ensuite une amélioration de ces premiers modèles par un calcul complet des échanges par rayonnement :

- P.A.Ramachandran (1985) : (cf[3]) le rayonnement est calculé suivant la méthode de Gebhart. Le rayonnement direct et les réflexions successives sont pris en compte.

Parallélement, la thermohydraulique du bain a été étudiée:

- N.Kobayashi (1980): (cf[4]) modélise la thermohydraulique du bain sans encapsulant L'entraînement à l'interface par le cristal en rotation est simulé.

A ce jour, le code développé par M.J.Crochet (cf[5]) et son équipe simule l'ensemble de ces phénomènes, dans le four de tirage pris dans sa globalité.

Le code présenté dans cette thèse est à rapprocher de celui développé par l'équipe de M.J.Crochet.L'apport essentiel et nouveau de cette étude porte sur la simulation et la mise en évidence des contraintes thermoélastiques dans un cristal anisotrope.

Pour cela, nous travaillons sur une géométrie de four et de tirage donné par l'expérience.

Après discrétisation par éléments finis, nous calculons d'abord la thermique du four en traitant les effets de rayonnement de façon détaillée. C'est un calcul 2D, en raison de l'axisymétrie du problème.

En générant ensuite un maillage 3D pour tenir compte de l'anisotropie de l'AsGa, nous calculons les contraintes dans le cristal en fonction des cartes de températures obtenues.

Les cartographies de température servent de base au calcul des contraintes mais permettent également de mieux connaitre et contrôler la thermique du four.

Les cartes de contraintes thermoélastiques dans le cristal permettent de localiser les zones de dislocations dues aux contraintes thermiques.Nous utilisons le critère de Tresca et les facteurs de Schmid pour leur évaluation.

Ce travail s'est concrétisé par la réalisation d'un logiciel de type industriel, mis à la disposition des physiciens du LETI, le code CRISTAL. Il possède une interface utilisateur conversationnelle et permet d'effectuer des simulations dans des configurations variées.

Le **chapitre 1** est consacré à la modélisation de la thermique du tirage

Il s'agit ici principalement de bien prendre en compte l'environnement thermique du cristal.

Seuls les modes prépondérants de propagation de la chaleur ont été retenus: diffusion dans les milieux solides et liquides, convection libre du gaz dans le four et rayonnement sur lequel un effort particulier a été fourni.

La convection dans le bain et l'encapsulant n'a pas été modélisée, son rôle dans le transport de la chaleur étant négligeable en première approximation. Dans l'encapsulant, c'est une approximation valable car celui-ci est très visqueux. Dans le bain, cette simplification n'est possible que dans le cas du tirage sous champ magnétique qui limite la convection.

Les échanges de chaleur par rayonnement ont été, par contre, traités avec soin, car c'est le mode principal d'échange de chaleur du cristal avec son environnement .
On a retenu la méthode de calcul de Gebhart, seule à prendre en compte les échanges par rayonnement direct et par réflexions successives.

Bien que cela complique le calcul des coefficients d'échange par rayonnement (ou facteurs de forme), une géométrie réaliste du cristal est représentable. L'angle de croissance est ainsi modélisable. L'encapsulant est présent, mais considéré comme transparent à l'infrarouge.Enfin la possibilité de prendre une répartition de température variable sur le creuset est apparue indispensable.

L'étude mathématique du problème de thermique est faite au **chapitre 2**, sur un modèle simplifié.

On s'intéresse à la résolution de l'équation de la chaleur dans un domaine Ω, de frontière $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$, avec des échanges thermiques par rayonnement sur une partie Γ_1 de la frontière de Ω.
Ces échanges se font à l'intérieur d'une enceinte fermée $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$. La prise en compte des réflexions donne un couplage des températures et une condition de Neuman non linéaire sur Γ.

Le modèle est le suivant

trouver T vérifiant:

$$
\left|
\begin{array}{llll}
-\Delta T = 0 & \text{dans } \Omega. & (1) \\
T(x) = T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 & (2) \\
-\lambda \dfrac{\partial T}{\partial n}(x) = \dfrac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \left(\sigma T^4(x) - w(x) \right) & \text{sur } \Gamma_1 & (3) \\
w(x) = (1-\varepsilon(x)) \displaystyle\int_\Gamma \phi(x,y)\, w(y)\, dy + \varepsilon(x)\, \sigma T^4(x) & \text{sur } \Gamma & (4) \\
T(x) = T_2(x) & \text{sur } \Gamma_2 & (5)
\end{array}
\right.
$$

Nous étudions d'abord l'équation intégrale (4) du rayonnement à l'intérieur de Γ.Cette équation est du type (Id - A) w = g , où A est un opérateur borné contractant.

On montre ensuite l'existence d'une solution au problème modèle (1) à (5) par le théorème de point fixe de Schauder .l'unicité est prouvée par une méthode de sous - sur solutions.

Enfin, nous formulons le problème variationnel équivalent au système d'équation complet établi au chapitre 1 en vu de la résolution par éléments finis.

Dans le **chapitre 3**, nous exposons la résolution numérique du problème de thermique.

Nous utilisons les méthodes de discrétisation suivantes:

- une discrétisation par éléments finis sur le domaine de conduction de la chaleur.
- un découpage en facettes de la cavité de rayonnement et calcul des facteurs de formes pour la discrétisation des échanges par rayonnement.Ce découpage est induit par le maillage sur la frontière rayonnante du domaine.

La méthode de Newton a été choisie pour la résolution de ce problème non linéaire car plus rapide que les méthode de sur (-sous) solutions .

Le logiciel et sa réalisation informatique sont présentés au **chapitre 4**.

En première partie nous exposons les possibilités offertes par le logiciel, son mode d'utilisation et les données à fournir par l'utilisateur.

Le logiciel CRISTAL permet d'effectuer des simulations dans différentes configurations.Il peut simuler la thermique du four avec ou sans encapsulant avec ou sans cristal.Des formes de cône de croissance et d'interface de cristallisation obtenues en conditions réelles de tirage sont représentables.
Le déroulement d'une session de simulation est détaillée pour illustrer le fonctionnement du logiciel. C'est un logiciel interactif.La saisie des données par le logiciel est conversationnelle.Le maillage et la résolution numérique s'effectuent automatiquement sans intervention de l'utilisateur.

La réalisation du logiciel fait l'objet de la seconde partie de ce **chapitre 4**.

Pour le développement du logiciel, nous avons eu à notre disposition la bibliothèque modulaire d'éléments finis MODULEF. Le logiciel fait appel aux modules de cette bibliothèque pour tous les calculs standards de la méthode des éléments finis.

La programmation du logiciel s'est déroulée en trois étapes:

1) écriture d'un programme d'appel des modules de la bibliothèque MODULEF permettant la résolution du problème classique de thermique limité à la diffusion et à l'échange avec le gaz ambiant.
2) création des modules traitant la partie rayonnement et de son addition au problème précédent.
3) création de l'interface utilisateur.

Nous n'exposons donc que les parties du logiciel que nous avons nous même programmées.

L'assemblage du système linéaire à résoudre à chaque itération de la résolution numérique est obtenu par sommation de deux systèmes linéaires.
Le premier correspond aux termes de convection et d'échange avec le gaz ambiant.C'est un cas standard d'application de la méthode des éléments finis. Il est réalisé entièrement à l'aide de MODULEF.
Le second est non symétrique, il correspond aux termes de rayonnement. Il exprime le couplage des températures des éléments situés sur la frontière rayonnante du domaine. Nous en avons conçu l'assemblage et nous le détaillons.

Nous avons développé un module de calcul des facteurs de formeà partir d'un formulaire informatique, constitués de calculs analytiques trouvés dans la littérature. Un test de détection des obstacles au rayonnement direct entre deux surfaces a été mis au point.

L'interface pour le mailleur.Il évite un travail long et technique de préparation des données pour le mailleur bidimensionnel de MODULEF. C'est un élément indispensable pour la commodité d'utilisation du logiciel.

Le problème de la thermo-élasticité est traité au **chapitre 5**

Ce problème est classique et le chapitre commence par le rappel des équations et de la preuve de l'existence et de l'unicité de la solution. La formation des dislocations sous l'action des contraintes dans un cristal est expliquée.

Le critère de Tresca et les facteurs de Schmid que nous utilisons pour l'évaluation des contraintes sont définis

Nous résumons ensuite la résolution numérique par la méthode des éléments finis , qui est effectuée sur un maillage 3D du cristal obtenu par rotation de son maillage 2D

Le logiciel effectue cette résolution numérique en grande partie par appels au modules de la bibliothèque MODULEF. L'apport personnel a essentiellement consisté en la création d'un module permettant d'obtenir le maillage 3D

Au **chapitre 6** , nous présentons des résultats de simulation et des éléments de validation du code.

Nous confrontons d'abord la thermique du bain et de l'encapsulant simulée par le code avec des résultats de mesures.
Nous vérifions ensuite que les contraintes calculés par le code et la répartition des dislocations que l'on peut habituellement observer dans un cristal tiré suivant la méthode Czochralski sont cohérentes.
Pour terminer nous présentons une simulation montrant l'influence de la hauteur d'encapsulant sur les contraintes dans le cristal.

En conclusion, le logiciel CRISTAL est un outil essentiel dans l'amélioration de la qualité des cristaux d'AsGa tirés suivant la méthode Czochralski
Il permet de mieux comprendre la formation des dislocations sous l'action des contraintes thermoélastiques.
Les rôles des différents facteurs, géométriques, thermiques et mécaniques, intervenant dans le tirage et par là même dans la génération des contraintes, peuvent être mis en évidence par des études paramétriques.
Des conditions de tirage optimales, permettant de réduire les dislocations, devraient pouvoir ainsi être établies.

CHAPITRE I

MODÈLE THERMIQUE DE LA MÉTHODE CZOCHRALSKI

1. PRESENTATION DE LA METHODE CZOCHRALSKI 9

2. RAPPELS SUR LES ÉCHANGES THERMIQUES 10

2.1. L'équation de la chaleur 10

2.2. Les échanges de surface 11

2.2.1. Loi de Fourier 11

2.2.2. Conduction entre deux milieux de conductivités thermiques différentes 12

2.2.3. Convection gazeuse 12

2.3. Le rayonnement thermique 13

2.3.1. Emission 13

2.3.2. Réception 14

2.3.3. Loi de Lambert 15

2.3.4. Echanges radiatifs dans une enceinte 16

3. LES ECHANGES THERMIQUES DANS LA METHODE CZOCHRALSKI 20

3.1. Le four de tirage.Délimitation du domaine d'étude thermique. 20

3.2. Les différents processus d'écoulement de la chaleur dans la méthode Czochralski 22

3.2.1. Apport de chaleur au creuset 22

3.2.2. Refroidissement du couvercle 23

3.2.3 Diffusion de la chaleur 23

3.2.3 Transmission de la chaleur 24

3.3.4. Bilans des échanges radiatifs 26

1. PRESENTATION DE LA METHODE CZOCHRALSKI.

La méthode Czochralski est un procédé de fabrication de monocristaux par cristallisation à la surface d'un bain fondu. Elle est employée avec de nombreux matériaux tels que quartz, silice , germanium, et l'arseniure de galium (AsGa) utilisés en optronique et en électronique.
La technique de l'encapsulant est pratiquée avec les matériaux à haute pression de vapeur, en particulier l'AsGa. Nous allons maintenant expliquer en quoi cela consiste.

Le tirage Czochralski de l'AsGa sous encasulant.

De l'AsGa est deposé dans un creuset cylindrique puis recouvert par un disque de B_2O_3 (voir figure 1.1).
Le creuset est porté à une température supérieure à la température de fusion de l'AsGa.
Le B_2O_3 flottant à la surface du bain fondu est alors à l'état pâteux. Son rôle est de limiter le dégagement hors du creuset de l'arsenic gazeux produit par la décomposition chimique du bain. C'est l'encapsulant.

Un germe monocristallin est ensuite amené à la surface du bain au travers de l'encapsulant .
La température étant bien choisie la cristallisation s'opère autour du germe.
Le cristal est retiré au fur et à mesure de sa formation a vitesse constante. La régulation du diamètre du cristal se fait en jouant sur la puissance thermique délivrée au creuset.
Cette puissance est diminuée progressivement en début de tirage pour que le diamètre du cristal croisse, puis ajustée de manière à obtenir un diamètre constant .
L'homogénéité de l'ensemble est assurée par une rotation du creuset et du cristal autour de l'axe vertical.

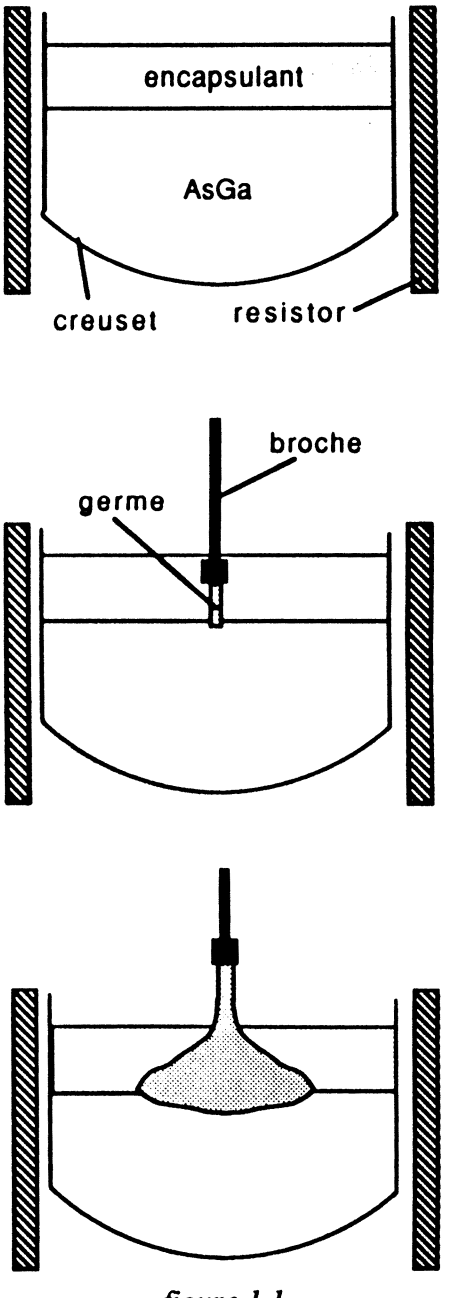


figure 1.1

2. RAPPELS SUR LES ÉCHANGES THERMIQUES

Nous rappelons ici les lois de la thermique intervenant dans le tirage Czochralski.(cf [6] à[9]).

2.1 L'équation de la chaleur

La loi de conservation de la chaleur dans un milieu en mouvement s'écrit :

$$\underbrace{\rho\, c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho\, c\, v \,.\, \nabla T}_{\text{terme convectif}} \;-\; \underbrace{\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T)}_{\text{terme diffusif}} = 0$$

Avec

- ρ : masse spécifique
- c : chaleur massique
- λ : conductivité thermique
- v : vitesse

En régime permanent et lorsque le transport de chaleur par convection est négligeable ou nul, cette équation devient :

$$- \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) = 0$$

et si l'on suppose λ indépendante de T et de la variable d'espace :

$$- \Delta T = 0 \qquad (1)$$

2.2 Les échanges de surface

2.2.1 Loi de Fourier

A la surface d'un corps, le gradient de température et les échanges thermiques avec l'extérieur sont liés par la loi de Fourier.

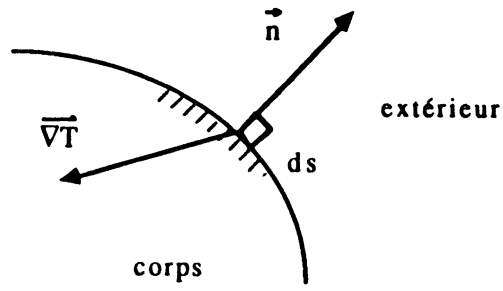


Figure 1.2

pour un élément de surface dS on a

$$dQ = -\lambda \vec{\nabla} T \cdot \vec{n}\, dS \qquad (2)$$

avec

dQ : quantité de chaleur traversant par unité de temps, l'élément de surface dS
$\vec{n}$: normale dirigée vers l'extérieur

Remarques

- dQ est comptée positivement lorsque le corps perd de la chaleur
- on note aussi

$$\vec{\nabla} T \cdot \vec{n} = \frac{\partial}{\partial n} T$$

2.2.2 Conduction entre deux milieux de conductivités thermiques différentes

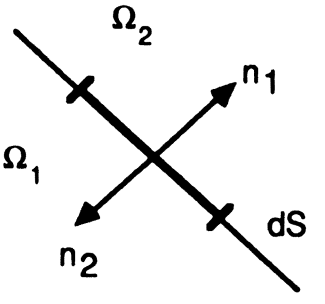


Figure 1.3

A l'interface des deux milieux et en l'absence de changement de phase, le bilan thermique en chaque élément frontière dS donne

$$dQ_1 - dQ_2 = -\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial n_1} dS + \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial n_2} dS = 0$$

2.2.3 Convection gazeuse

Nous ne considérerons que les échanges de type convection libre (cf [6]).

Pour une température Ta du gaz ambiant, la quantité de chaleur dQ traversant un élément de surface dS du milieu par unité de temps est :

$$dQ = \alpha \, |T - T_a|^{0,25} \, (T - T_a) \qquad (3)$$

avec

T : température de l'élément considéré
α : constante physique connue

2.3. Le rayonnement thermique

En tirage Czochralski, le rayonnement est l'échange de chaleur **prédominant** (cf [3]) du cristal avec son environnement.

Nous allons donc l'étudier en détail (cf [7] et [8]).

2.3.1 Emission

Tout corps, du fait de sa température, émet un rayonnement thermique au détriment de son énergie calorifique.

La quantité de chaleur émise par un élément de sa surface dS par unité de temps s'écrit

$$dQ_e = \varepsilon \, \sigma \, T^4 \, dS$$

avec

σ	:	constante de Stephan
ε	:	émissivité
T	:	température de l'élément de surface dS

L'émissivité est une constante physique sans dimension

$\varepsilon = 1$	:	corps noir
$\varepsilon = 0$	:	corps blanc
$0 < \varepsilon < 1$	:	corps gris

Remarque

Nous considérons que tous les corps en présence sont gris, exceptés l'encapsulant B_2O_3 et les gaz ambiants considérés comme blancs.

2.3.2 Réception

Un flux de chaleur rayonné dQ_i, atteignant un élément de surface dS d'un corps se répartit en

$$dQ_i = dQ_a + dQ_r + dQ_t$$

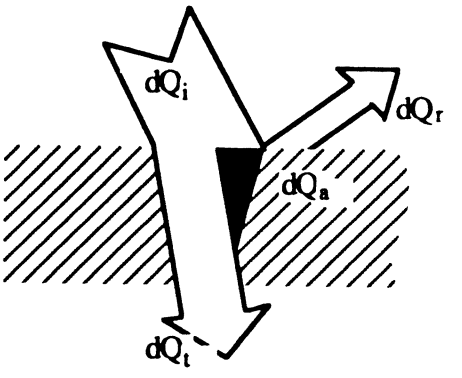


Figure 1.4

dQ_i , dQ_a , dQ_r , dQ_t étant respectivement les quantités de chaleur incidente, absorbée, réfléchie et transmise.

L'absorptivité $\tau_a = dQ_a/dQ_i$, la réflexivité $\tau_r = dQ_r/dQ_i$ et la transmitivité $\tau_t = dQ_t/dQ_i$ sont des constantes physiques ne dépendant que du corps considéré.

On a bien sûr

$$\tau_a , \tau_r \text{ et } \tau_t \geq 0$$

et

$$\tau_a + \tau_r + \tau_t = 1$$

Emissivité et absorptivité sont liées par la loi de Kirchoff (cf [7])

$$\tau_a = \varepsilon$$

Remarque

Nous considérons que tous les corps en présence sont opaques, soit

$$\tau_t = 0, \tau_a = \varepsilon, \tau_r = 1 - \varepsilon$$

excepté l'encapsulant B_2O_3 et le gaz ambiant transparents pour lesquels

$$\tau_t = 1, \tau_a = 0, \tau_r = 0$$

2.3.3 Loi de Lambert

Les rayonnements thermiques émis et réfléchis à la surface d'un corps ayant été caractérisés quantitativement, il reste à préciser leurs directions.

Les surfaces en présence peuvent être assimilées à des surfaces parfaitement dépolies, émettant et réfléchissant le rayonnement thermique de manière diffuse et isotrope dans l'espace.

Une quantité de chaleur dQ_1 quittant un élément de surface dS_1 est rayonnée dans l'espace ambiant suivant la loi de Lambert (cf [7]) :

un élément de surface dS_2, en regard avec dS_1 reçoit alors une fraction dQ_{12} de dQ_1

$$dQ_{12} = dQ_1 \frac{\cos\left(\vec{n}_1, \overrightarrow{x_1 x_2}\right) \cos\left(\vec{n}_2, \overrightarrow{x_2 x_1}\right)}{\pi \left\|\overrightarrow{x_1 x_2}\right\|^2} dS_2 \qquad (4)$$

avec

$\left\|\overrightarrow{x_1 x_2}\right\|$ distance euclidienne de x_1 à x_2

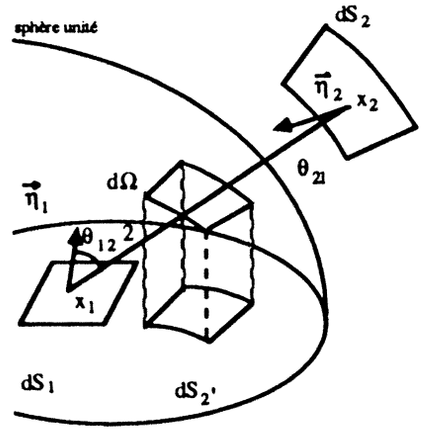


Figure 1.5

En notant :

- $d\Omega$ angle solide sous lequel dS_1 voit dS_2
- dS'_2 projection orthogonale de $d\Omega$ sur le disque de rayon unité tangent à dS_1

On a :

$$dQ_{12} = dQ_1 \frac{1}{\pi} \cos\theta_{12}\, d\Omega = dQ_1 \frac{1}{\pi} dS'_2$$

2.3.4 Echanges radiatifs dans une enceinte

Nous allons établir le bilan des échanges radiatifs dans une enceinte (cf [8])

Les parois sont grises, opaques, diffuses en réflexion et en émission

L'intérieur est occupé par un milieu parfaitement transparent et non absorbant n'intervenant pas dans les échanges radiatifs

La température T supposée connue et maintenue constante dans le temps, peut varier suivant la position x à la surface S de l'enceinte, ainsi que l'émissivité ε.

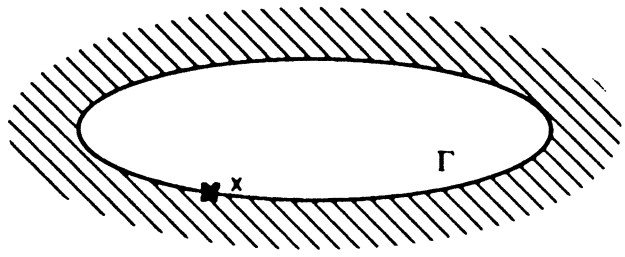


Figure 1.6

Notons e(x), i(x), r(x), a(x) les densités de flux de chaleur respectivement émis, incident, réfléchi et absorbé par unité de temps[1] .

On a

$$\begin{aligned} e(x) &= \sigma\,\varepsilon(x)\,T^4(x) \\ a(x) &= \varepsilon(x)\,i(x) \qquad (5) \\ r(x) &= (1-\varepsilon(x))\,i(x) \end{aligned}$$

et la densité de flux de chaleur quittant la surface par unité de temps est :

$$w(x) = e(x) + r(x) \qquad (6)$$

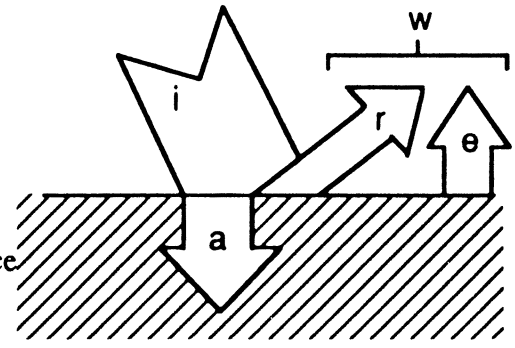


Figure 1.7

---

(1) Ce sont des quantités de chaleur par unité de temps et par unité de surface.

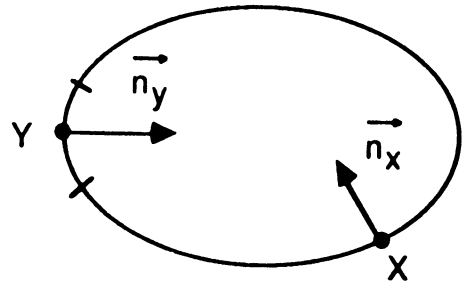


Figure 1.8

La densité de flux incident en x s'obtient à partir de la loi de Lambert par sommation sur S

$$i(x) = \int_S \frac{\cos(\vec{n_x}, \vec{xy}) \cos(\vec{n_y}, \vec{yx})}{\pi \|\vec{xy}\|^2} w(y)\, d\sigma(y) \qquad (7)$$

En utilisant (5) et (6) on peut écrire directement :

$$i(x) = \frac{1}{1-\varepsilon(x)} (w(x) - \sigma\, \varepsilon(x)\, T^4(x)) \qquad (8)$$

En éliminant i(x) entre (7) et (8), on obtient une équation intégrale en w :

$$w(x) = (1 - \varepsilon(x)) \int_S \frac{\cos(\vec{n_x}, \vec{xy}) \cos(\vec{n_y}, \vec{yx})}{\pi \|\vec{xy}\|^2} w(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\ \sigma\ T^4(x) \qquad (9)$$

La densité de flux de chaleur perdue par unité de temps que nous noterons q est simplement la différence des densités de flux quittant et incident :

$$q(x) = w(x) - i(x)$$

D'où avec (8)

$$q(x) = \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} (\sigma\, T^4(x) - w(x)) \qquad (10)$$

Remarques

1. : la perte de chaleur totale sur l'enceinte est toujours nulle.
En effet,on vérifiera facilement (en revenant à la figure 1.5) que :

$$\int_S \frac{\cos(\overrightarrow{n_x}, \overrightarrow{xy}) \cos(\overrightarrow{n_y}, \overrightarrow{yx})}{\pi \|\overrightarrow{xy}\|^2} \, d\sigma(y) = 1$$

alors

$$\int_S q(x)\, d\sigma(x) = \int_S (w(x) - i(x))\, d\sigma(x)$$

$$= \int_S w(x)\, d\sigma(x) - \int_S \int_S \frac{\cos(\overrightarrow{n_x}, \overrightarrow{xy}) \cos(\overrightarrow{n_y}, \overrightarrow{yx})}{\pi \|\overrightarrow{xy}\|^2} \, w(y)\, d\sigma(y)\, d\sigma(x)$$

$$= 0$$

2. Lorsque la température T est uniforme sur S, la densité de perte de chaleur q est identiquement nulle :

si l'on suppose T constant, on voit que w constant est solution de

$$w(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_S \frac{\cos(\overrightarrow{n_x}, \overrightarrow{xy}) \cos(\overrightarrow{n_y}, \overrightarrow{yx})}{\pi \|\overrightarrow{xy}\|^2} \, w(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\, \sigma T^4$$

on a

$$w = \sigma T^4$$

nous obtenons avec (10)

$$q(x) = \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} (\sigma T^4 - w) = 0 \qquad \text{sur } S$$

3. l'équation intégrale à laquelle obéit w est de la forme

$$w(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_S \phi(x, y)\ w(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\, \sigma\, T^4(x) \qquad \text{(E)}$$

en prenant

$$\phi(x,y) = \begin{cases} \dfrac{\cos(\vec{n}_x, \vec{xy})\cos(\vec{n}_y, \vec{yx})}{\pi \|\vec{xy}\|^2} & \text{si le segment xy ne coupe pas S} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \qquad (11)$$

On peut alors traiter le cas d'une cavité non convexe. Dans ce cas, les remarques précédentes restent valables.

3. LES ECHANGES THERMIQUES DANS LA METHODE CZOCHRALSKI

3.1. Le four de tirage. Domaine d'étude thermique.

Notre but est la modélisation de la thermique du bain, du cristal et de l'encapsulant. Il est cependant nécessaire de les replacer dans le four de tirage pour considerer les échanges thermiques avec celui-ci. La figure 1.9 montre une coupe de la machine de tirage , qui apparait comme un assemblage complexe.

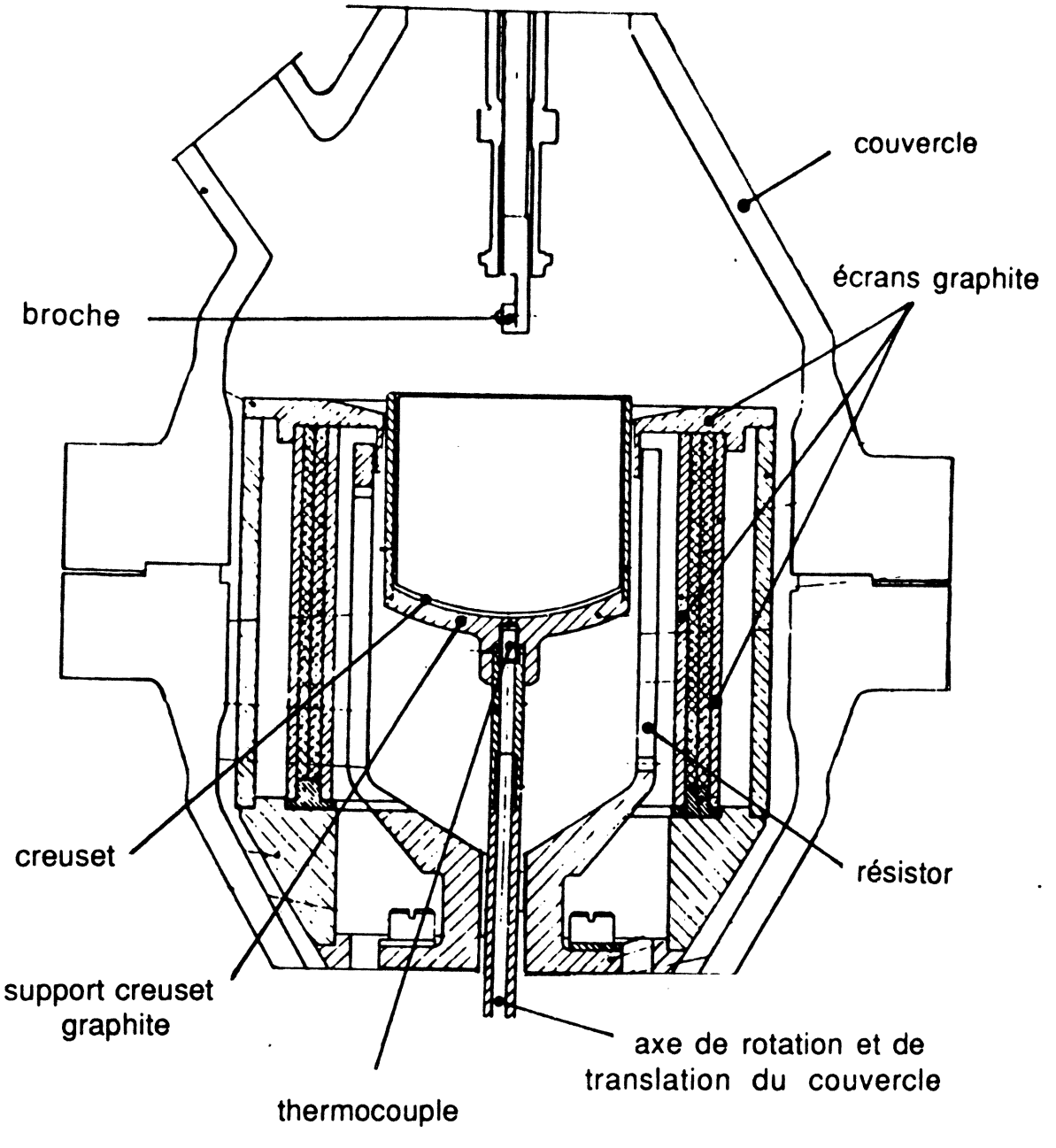


figure 1.9

Une modélisation de la thermique du four de tirage dans son ensemble est possible,mais n'est pas l'objet de ce travail.
Grâce à des mesures thermiques pratiquées par les physiciens du LETI notre domaine de modélisation a pu être limité à l'essentiel.

Ces mesures ont été éffectuées en différents points à l'aide de thermocouples:

sous le creuset:
un thermocouple est placé à demeure dans l'axe de rotation du creuset.Il indique la température quasiment uniforme de l'espace située sous le support creuset.

dans le bain et l'encapsulant:
ces mesures effectuées en l'absence de cristal permettent de connaitre les températures du bain et de l'encapsulant au contact des parois verticales du creuset.

dans le gaz contenu par le couvercle:
la machine de tirage est remplie de gaz neutre sous haute pression qui joue un rôle important dans les échanges thermiques. Une température moyenne de ce gaz dans le couvercle a été mesurée.

sur le couvercle.

Notre modélisation se limitera au domaine réunissant (voir figure 1.10):

- le cristal
- le bain
- l'encapsulant
- le creuset
- le support graphite du creuset
- le couvercle contenant le gaz ambiant.

A l'intérieur de ce domaine, les échanges thermiques sont modélisables.
La température est régulée et sera supposée, ne pas varier dans le temps.

Remarque

Le creuset est considéré sans épaisseur et sans résistance thermique.Il intervient par contre dans les échanges par rayonnement.

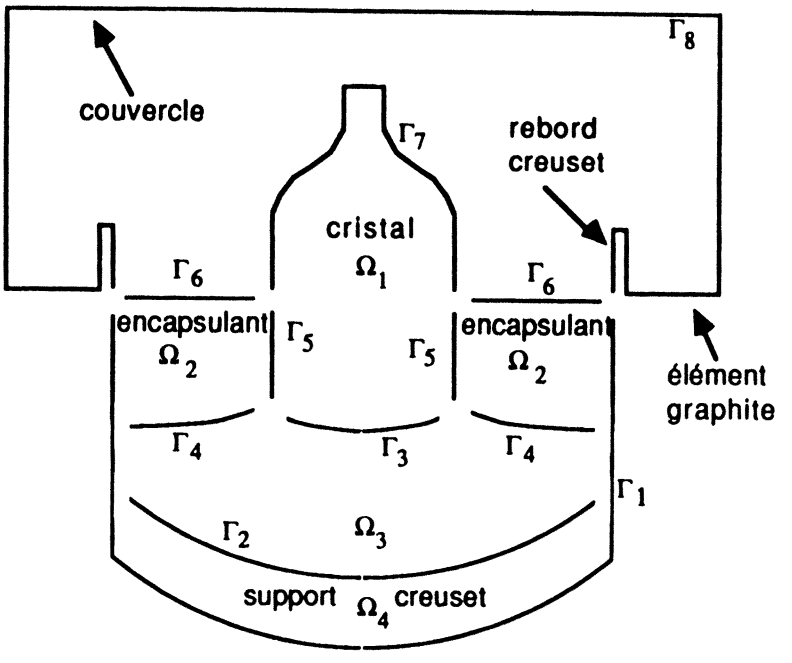


figure 1.8

3.2 Les différents processus d'écoulement de la chaleur dans la méthode Czochralski

3.2.1 Apport de chaleur au creuset

Le creuset est chauffé par un résistor au travers de son support en graphite.

La répartition de température sur les parois latérales du creuset ainsi qu'à la base du support graphite peut être obtenue expérimentalement.

$$T = T_c \text{ sur } \Gamma_1 \qquad (11)$$

Γ_1 est la surface décrite ci-dessus.

Remarque

Faire varier l'épaisseur du fond de graphite, peut être une méthode facilement réalisable pour modifier les isothermes. C'est pourquoi nous en avons tenu compte.

3.2.2 Refroidissement du couvercle

Le couvercle est refroidi par circuit hydraulique. La température est connue et uniforme.

$$T = T_8 \qquad \text{sur } \Gamma_8 \qquad (12)$$

3.2.3 Diffusion de la chaleur

i) Dans le cristal

Le cristal est supposé thermiquement isotrope. Le cristal se déplaçant verticalement à la vitesse de tirage f, la température est donnée par l'équation :

$$\rho_1 c_1 \frac{\partial T}{\partial t} + f \rho_1 c_1 \frac{\partial T}{\partial z} - \lambda_1 \Delta T = 0 \qquad \text{dans } \Omega_1$$

Cependant, les résultats expérimentaux montrent que pour des vitesses de tirage moyennes de 5 à 10 cm/h et pour des cristaux de diamètres modérés (4 à 6 cm) on peut considérer l'état stationnaire :

$$\lambda_1 \Delta T = 0 \qquad \text{dans } \Omega_1 \qquad (13)$$

ii) Dans le bain et l'encapsulant

Dans le bain et l'encapsulant la chaleur est diffusée et transportée par convection. Ceci implique un couplage des équations de la chaleur et de Navier-Stockes.

Cependant, la diffusion est prépondérante. En première approximation la convection peut donc être négligée, on a

$$\lambda_i \Delta T = 0 \qquad \text{dans } \Omega_i \qquad \text{pour } i = 2,3 \qquad (14)$$

iii) Dans le graphite

Le graphite est un solide isotrope dans lequel la chaleur diffuse

$$\lambda_4 \Delta T = 0 \qquad \text{dans } \Omega_4 \qquad (15)$$

3.2.4 Transmission de la chaleur

i) à l'interface graphite-bain

On a un échange de chaleur par conduction entre le graphite et le bain qui se traduit par le bilan :

$$- \lambda_4 \frac{\partial T}{\partial n_4} = + \lambda_3 \frac{\partial T}{\partial n_3} \qquad \text{sur } \Gamma_2 \qquad (16)$$

ii) à l'interface cristal-bain

L'interface étant l'isotherme de fusion on a :

$$T = T_f \qquad \text{sur } \Gamma_3 \qquad (17)$$

(T_f = température de fusion)

De plus, il y a une discontinuité du gradient due au phénomène de cristallisation :

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial n_1} = - \lambda_3 \frac{\partial T}{\partial n_3} + f\, L \cos \theta$$

Le traitement conjoint de ces deux conditions donne lieu à un problème de frontière libre.

Nous ne retiendrons que la première de ces conditions (17) pour traiter le problème de thermique à interface donné. Ceci correspond à une itération dans la résolution du problème à frontière libre.

iii) à l'interface bain-encapsulant

Le bain et l'encapsulant échangent de la chaleur par conduction.

De plus, l'encapsulant étant transparent dans l'infrarouge, le bain fondu échange de la chaleur par rayonnement avec toute surface chaude en regard avec lui.
Notons q_{ray} (T) la densité de perte de chaleur par rayonnement du bain. Le bilan thermique donne

$$- \lambda_3 \frac{\partial T}{\partial n_3} = - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial n_2} + q_{ray}(T) \qquad \text{sur } \Gamma_4 \qquad (18)$$

iv) à l'interface cristal-encapsulant

Le cas est semblable au précédent. Notons encore q_{ray} la densité de perte de chaleur par rayonnement du cristal, nous obtenons :

$$- \lambda_1 \frac{\partial T}{\partial n_1} = - \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial n_2} + q_{ray}(T) \qquad \text{sur } \Gamma_5 \qquad (19)$$

v) à l'interface encapsulant-gaz

La surface libre de l'encapsulant est au contact du gaz contenu dans le couvercle.

Dans les conditions de tirage, la température du gaz T_{gaz} est inférieure à celle de l'ensemble liquide-solide ainsi refroidi. L'encapsulant ne joue aucun rôle dans les échanges radiatifs :

$$- \lambda_2 \frac{\partial T}{\partial n_2} + q_{conv}(T) = a\,|T - T_{gaz}|^{0,25} \cdot (T - T_{gaz}) \qquad \text{sur } \Gamma_6 \qquad (20)$$

vi) à l'interface cristal-gaz

La surface libre du cristal échange de la chaleur à la fois par rayonnement et par convection gazeuse.Il s'en suit :

$$\lambda_1 \frac{\partial T}{\partial n_1} = q_{ray}(T) + q_{conv}(T) \qquad \text{sur } \Gamma_8 \qquad (21)$$

3.2.4 Echanges radiatifs

Pour calculer la perte de chaleur q_{ray}, nous devons faire un bilan des échanges radiatifs qui se font entre :

- La surface du cristal $\Gamma_5 \cup \Gamma_7$
- La surface du bain Γ_4
- La paroi du creuset à hauteur de l'encapsulant $\Gamma_1 \cap \partial \Omega_2$
- La paroi du couvercle Γ_8

L'ensemble de ces surfaces forme une enceinte close que nous appelerons Γ_{ray}.

Pour une répartition de température T sur Γ_{ray}, la perte de chaleur par unité de temps et par unité de surface est donnée par les fomules (9) et (10) établies précédemment :

$$q_{ray}(T,x) = \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \left(\sigma T^4(x) - \omega(x)\right) \qquad \forall x \in \Gamma_{ray}$$

avec ω solution de l'équation intégrale

$$\omega(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \Phi(x,y)\, \omega(y)\, dy + \varepsilon(x)\, \sigma T^4(x) \qquad \forall x \in \Gamma_{ray}$$

CHAPITRE II

MODÈLE MATHÉMATIQUE DE LA THERMIQUE DANS LA MÉTHODE CZOCHRALSKI

1. INTRODUCTION 29

1. LE SYSTEME D'ÉQUATIONS GOUVERNANT LES ÉCHANGES THERMIQUES .. 30

2.RESOLUTION DU PROBLEME MODELE. 33

2.1. Le modèle. 33

2.2. Résolution de l'équation intégrale. 34

2.3. Résolution du modèle complet. 40

INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous récapitulons d'abord le système d'équations gouvernant les échanges thermiques de la méthode Czochralski et formulons le problème variationnel associé.

Les échanges par rayonnement dans l'enceinte du four donnent une condition aux limites intégrodifférentielle sur le bord.
Aprés avoir formulé un problème modèle prenant en compte cette condition, on étudie l'existence et l'unicité d'une solution pour l'équation de la chaleur avec ce type de conditions aux limites non linéaires. Ce résultat généralise ceux obtenus dans [10] où ne sont pas pris en compte les thermes de réflexion dans le rayonnement.

1. LE SYSTÈME D'ÉQUATIONS GOUVERNANT LES ÉCHANGES THERMIQUES

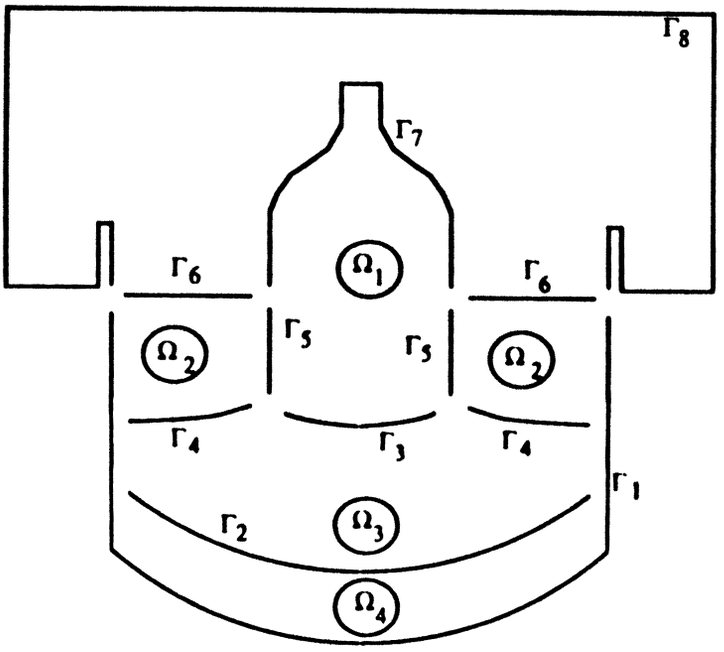


figure 2.1

Le modèle mathématique est le suivant :

La température T dans le domaine $\overline{\Omega} = \bigcup_{I=1}^{4} \overline{\Omega}_i$ est solution de

(1) à (4)	$\lambda_i \Delta T = 0$	dans Ω_i, $i = 1,2,3,4$
(5)	$T = T_c$	sur Γ_1
(6)	$T = T_f$	sur Γ_3
(7)	$\lambda_4 \frac{\partial}{\partial n_4} T + \lambda_3 \frac{\partial}{\partial n_3} T = 0$	sur Γ_2
(8)	$\lambda_3 \frac{\partial}{\partial n_3} T + \lambda_2 \frac{\partial}{\partial n_2} T + q_{ray}(T) = 0$	sur Γ_4
(9)	$\lambda_1 \frac{\partial}{\partial n_1} T + \lambda_2 \frac{\partial}{\partial n_2} T + q_{ray}(T) = 0$	sur Γ_5
(10)	$\lambda_2 \frac{\partial}{\partial n_2} T + q_{conv}(T) = 0$	sur Γ_6
(11)	$\lambda_1 \frac{\partial}{\partial n_1} T + q_{conv}(T) + q_{ray}(T) = 0$	sur Γ_7

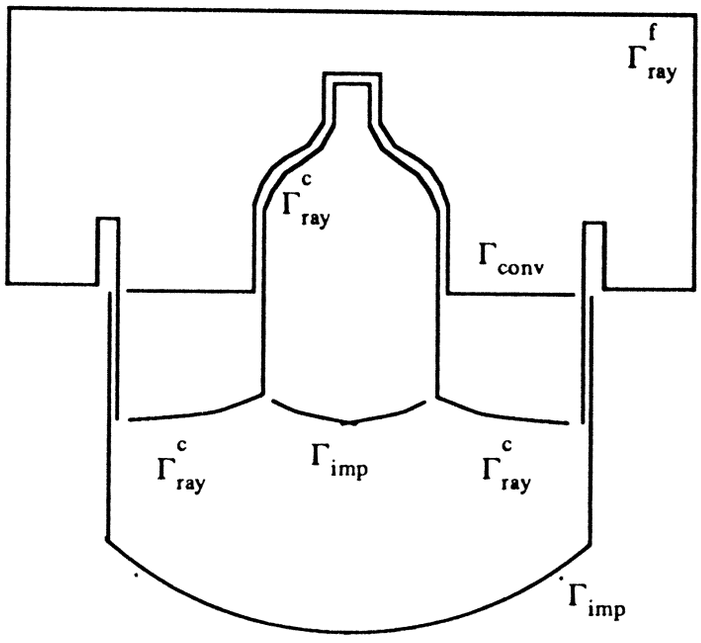


figure 2.2

Nous allons donner la formulation variationnelle associée aux équations modélisant les échanges thermiques de la méthode Czochralski.

Posons :

i) $\Gamma_{imp} = \Gamma_1 \cup \Gamma_3$ — Sur Γ_{imp} la température est donnée.

ii) $\Gamma_{conv} = \Gamma_6 \cup \Gamma_7$ — Sur Γ_{conv} on a des échanges de chaleur par convection.

iii) $\Gamma^c_{ray} = \Gamma_4 \cup \Gamma_5 \cup \Gamma_7$ — Sur Γ^c_{ray} le cristal ainsi que le bain échangent de la chaleur par rayonnement.

iv) $\Gamma^f_{ray} = (\Gamma 1 \cap \partial \Omega_2) \cup \Gamma_8$ — Sur Γ^f_{ray} le four échange de la chaleur par rayonnement.

v) $\Gamma_{ray} = \Gamma^c_{ray} \cup \Gamma^f_{ray}$

Pour obtenir la formulation variationnelle associée au problème (1) à (11), on procède de façon classique.

On choisit des fonctions test v de $H^1(\Omega)$ nulles sur Γ_{imp}.
On multiplie (1), (2), (3), (4) par v et on intègre sur chaque domaine Ω_i, i = 1,...,4.
En utilisant la formule de Green, on obtient :

T vérifie :

$$(P) \quad \left| \begin{array}{l} T = T_{imp} \quad \text{sur } \Gamma_{imp} \text{ et} \\ \displaystyle\int_{\Omega} \lambda \ \nabla T \ \nabla v + \int_{\Gamma_{conv}} q_{conv}(T) \ v + \int_{\Gamma^c_{ray}} q_{ray}(T) \ v = 0 \\ \forall v \qquad \text{tel que } v \equiv 0 \qquad \text{sur } \Gamma_{imp} \end{array} \right.$$

où

- $\lambda_{|\Omega_i} = \lambda_i \qquad i = 1,2,3,4$

- $q_{ray}(T) = \dfrac{\varepsilon}{1-\varepsilon}(\sigma T^4 - w) \qquad \text{sur } \Gamma^c_{ray}$

- w est définie sur Γ_{ray} par l'équation intégrale:

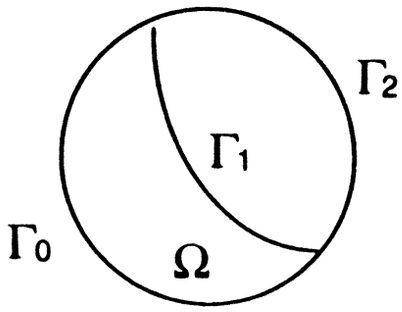
$$w(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \phi(x,y) \ w(y) \ dy + \varepsilon(x) \ \sigma \ T^4(x)$$

$T^4(x)$ étant connu sur Γ^f_{ray}.
où ϕ est la fonction de forme définie en (11) au chapitre 1.

2. RESOLUTION DU PROBLEME MODELE.

2.1. Le modèle.

On cherche la température dans le domaine Ω de frontière $\partial\Omega_2 = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$.
Les échanges par rayonnement ont lieu dans l' enceinte fermée $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$.:



Le modèle est le suivant

trouver T vérifiant:

$$\left|\begin{array}{lcll}
-\Delta T & = & 0 & \text{dans } \Omega. \quad (12) \\
T(x) & = & T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 \quad (13) \\
-\lambda \dfrac{\partial T}{\partial n}(x) & = & \dfrac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)}\left(\sigma T^4(x) - w(x)\right) & \text{sur } \Gamma_1 \quad (14) \\
w(x) & = & (1-\varepsilon(x)) \displaystyle\int_\Gamma \Phi(x,y)\, w(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\, \sigma T^4(x) & \text{sur } \Gamma \quad (15) \\
T(x) & = & T_2(x) & \text{sur } \Gamma_2 \quad (16)
\end{array}\right.$$

T_0 (resp T_2) est une fonction positive et bornée, donnée sur Γ_0 (resp Γ_2)

ε est une fonction positive sur et il existe deux constantes ε_0 et ε_1 telles que:

$$0 < \varepsilon_0 \leq \varepsilon(x) \leq \varepsilon_1 < 1 \qquad \text{pour tout } x \text{ sur } \Gamma \qquad (17)$$

w(x) représente la densité de puissance émise (rayonnement et reflexion.)

ϕ est un noyau positif,symétrique. $\phi \in L^1(\Gamma \times \Gamma)$ et

$$\int_\Gamma \phi(x,y)\, w(y)\, d\sigma(y) = 1 \tag{18}$$

2.2. Résolution de l'équation intégrale.

Dans la suite on notera la norme dans un espace L^p $1 \leq p \leq \infty$ par $\| \ \|_p$ et de la même façon la norme d'une application linéaire de L^p dans L^p.

On considère l'opérateur A défini par

$$Aw(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_\Gamma \phi(x,y)\, w(y)\, d\sigma(y) \tag{19}$$

g étant donné on cherche w tel que

$$(\mathrm{Id} - A)\, w = g \tag{20}$$

proposition 2.1.

Soit $g \in L^p(\Gamma)$ avec $p \geq 1$
L'équation (20) admet une solution et une seule dans $L^p(\Gamma)$.

démonstration.

Montrons que A est un opérateur linéaire continu et contractant de $L^p(\Gamma)$ dans $L^p(\Gamma)$.
Considérons les cas $p = \infty$ et $p = 1$.

i) Soit $w \in L^\infty(\Gamma)$ avec (17),(18) et (19) on a:

$$|Aw(x)| \leq (1 - \varepsilon_0)\, \|w\|_\infty$$

d'où $Aw \in L^\infty(\Gamma)$ et

$$\|A\|_\infty \leq 1 - \varepsilon_0 < 1$$

ii) Soit $w \in L^1(\Gamma)$. On pose $F(x,y) = (1-\varepsilon(x))\,\phi(x,y)\,w(y)$ .On a grâce à (7)

$$\int_\Gamma d\sigma(y) \int_\Gamma |F(x,y)|\, d\sigma(x) \leq (1-\varepsilon_0) \int_\Gamma |w(y)| \int_\Gamma \phi(x,y)\, d\sigma(x)\, d\sigma(y)$$

$$= (1-\varepsilon_0)\, \| w \|_1$$

On déduit du théorème de Fubini que $x \to \int_\Gamma F(x,y)\, d\sigma(y)$ est dans $L^1(\Gamma)$,

c'est à dire $Aw \in L^1(\Gamma)$.De plus

$$\int_\Gamma |Aw(x)|\, d\sigma(x) \leq \int_\Gamma d\sigma(x) \int_\Gamma |F(x,y)|\, d\sigma(y) \leq (1-\varepsilon_0)\, \| w \|_1$$

d'ou $\| A \|_1 \leq 1 - \varepsilon_0$.

On obtient le résultat pour $1 < p < \infty$ par le théorème d'interpolation de Riesz-Thorin [11].On a pour tout $p \in [1,\infty]$ $\| A \|_p \leq 1 - \varepsilon_0 < 1$. L'existence et l'unicité d'une solution pour (20) découlent alors des résultats classiques sur les équations intégrales linéaires.

• •

Nous allons maintenant écrire w, solution de (20),sous forme intégrale.

On pose

$$K^{(1)}(x,y) = (1-\varepsilon(x))\, \phi(x,y)$$

et pour $n \geq 2$

$$K^{(n)}(x,y) = \int_\Gamma K^{(1)}(x,t)\, K^{(n-1)}(t,y)\, d\sigma(t)$$

ii) Soit $w \in L^1(\Gamma)$. On pose $F(x,y) = (1-\varepsilon(x))\,\phi(x,y)\,w(y)$ .On a grâce à (7)

$$\int_\Gamma d\sigma(y) \int_\Gamma |F(x,y)|\, d\sigma(x) \leq (1-\varepsilon_0) \int_\Gamma |w(y)| \int_\Gamma \phi(x,y)\, d\sigma(x)\, d\sigma(y)$$

$$= (1-\varepsilon_0)\, \| w \|_1$$

On déduit du théorème de Fubini que $x \to \int_\Gamma F(x,y)\, d\sigma(y)$ est dans $L^1(\Gamma)$,

c'est à dire $Aw \in L^1(\Gamma)$.De plus

$$\int_\Gamma |Aw(x)|\, d\sigma(x) \leq \int_\Gamma d\sigma(x) \int_\Gamma |F(x,y)|\, d\sigma(y) \leq (1-\varepsilon_0)\, \| w \|_1$$

d'ou $\| A \|_1 \leq 1-\varepsilon_0$.

On obtient le résultat pour $1 < p < \infty$ par le théorème d'interpolation de Riesz-Thorin [11].On a pour tout $p \in [1,\infty]$ $\| A \|_p \leq 1-\varepsilon_0 < 1$. L'existence et l'unicité d'une solution pour (20) découlent alors des résultats classiques sur les équations intégrales linéaires.

• •

Nous allons maintenant écrire w, solution de (20),sous forme intégrale.

On pose

$$K^{(1)}(x,y) = (1-\varepsilon(x))\, \phi(x,y)$$

et pour $n \geq 2$

$$K^{(n)}(x,y) = \int_\Gamma K^{(1)}(x,t)\, K^{(n-1)}(t,y)\, d\sigma(t)$$

Demonstration.

Etablissons le résultat (vrai pour n = 1) par récurrence.

$$A^{(n)}w(x) = \int_\Gamma K^{(1)}(x,y)\left(\int_\Gamma K^{(n-1)}(y,t)\, w(t)\, d\sigma(t)\right) d\sigma(y)$$

On peut appliquer le théorème de Fubini.
En effet la fonction $(x,t) \to |w(t)|\, K^{(n)}(x,t)$ est dans $L^1(\Gamma \times \Gamma)$ car

$$\int_\Gamma |w(t)| \left(\int_\Gamma K^{(n)}(x,t)\, d\sigma(x)\right) d\sigma(t) \leq (1-\varepsilon_0)^n \int_\Gamma |w(t)|\, d\sigma(t) < +\infty$$

On en déduit que :

$$\int_\Gamma |w(t)|\, K^{(n)}(x,t)\, d\sigma(t) < +\infty \qquad \text{p.p.t.x}$$

D'où

$$\int_\Gamma |w(t)| \left(\int_\Gamma K^{(1)}(x,y)\, K^{(n-1)}(y,t)\, d\sigma(y)\right) d\sigma(t) < +\infty \qquad \text{p.p.t x}$$

Il vient donc :

$$A^{(n)}w(x) = \int_\Gamma w(t)\left(\int_\Gamma K^{(1)}(x,y)\, K^{(n-1)}(y,t)\, d\sigma(y)\right) d\sigma(t)$$

$$= \int_\Gamma K^{(n)}(x,t)\, w(y)\, d\sigma(t)$$

• •

La solution de l'équation intégrale s'écrit sous la forme

$$w = (Id - A)^{-1} g = \sum_{n=o}^{\infty} A^n g \qquad (25)$$

D'où

$$w(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\Gamma} K^{(n)}(x,y)\ g(y)\ d\sigma(y) + g(x)$$

proposition 2.3

Soit $g \in L^1(\Gamma)$..Il existe un noyau $K \in L^1(\Gamma \times \Gamma)$, positif tel que

$$w(x) = \int_{\Gamma} K(x,y)\ g(y)\ d\sigma(y) + g(x)$$

Démonstration.

Soit $S_p(x,y) = \sum_{n=1}^{p} K^{(n)}(x,y)$. S_p est une suite croissante de fonctions positives. On pose

$$K(x,y) = \lim_{p \to \infty} S_p(x,y) \qquad (26)$$

Avec (21) on obtient

$$\int_{\Gamma} K(x,y)\ d\sigma(x) = \lim_{p \to \infty} \int_{\Gamma} S_p(x,y)\, d\sigma(x) \leq \sum_{n=1}^{\infty} (1 - \varepsilon_0)^n = \frac{1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_0}$$

On a

$$\int_{\Gamma} |g(y)| \left(\int_{\Gamma} K(x,y)\, d\sigma(x) \right) d\sigma(y) \leq \frac{1 - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} \int_{\Gamma} |g(y)|\, d\sigma(y) < +\infty$$

la fonction $(x,y) \to K(x,y)\ g(y)$ est donc dans $L^1(\Gamma \times \Gamma)$.

Notons $\qquad I_p(x) = \int_{\Gamma} S_p(x,t)\, g(t)\, d\sigma(t)$

En appliquant le théorème de convergence dominée on a p.p.t.x

$$\lim_{p \to \infty} I_p(x) = \int_\Gamma K(x,y)\, g(y)\, d\sigma(y)$$

Comme $I_p = \sum_{n=1}^{p} A^n\, g$ converge dans $L^1(\Gamma)$ vers w-g on en déduit le résultat recherché.

• •

Proposition 2.4:

le noyau K(x,y) vérifie les propriétés suivantes:

i) $$\int_\Gamma K(x,y)\, \varepsilon(y)\, d\sigma(y) = 1 - \varepsilon(x) \qquad (27)$$

ii) $$\int_\Gamma K(x,y)\, \frac{\varepsilon(x)}{1 - \varepsilon(x)}\, d\sigma(x) = 1 \qquad (28)$$

Démonstration.

i) Prenons $g(x) = \lambda\, \varepsilon(x)$, $\lambda \in \mathbb{R}$,dans (9). La solution est $w(x) = \lambda$ car:

$$\lambda - (1-\varepsilon(x)) \int_\Gamma \phi(x,y)\, \lambda\, d\sigma(y) = \lambda\, \varepsilon(x)$$

Avec la proposition 2.3 il vient donc

$$\lambda = \int_\Gamma K(x,y)\, \lambda\, \varepsilon(y)\, d\sigma(y) + \lambda\, \varepsilon(x)$$

D'ou

$$\int_\Gamma K(x,y)\, \varepsilon(y)\, d\sigma(y) = 1 - \varepsilon(x)$$

ii) K est obtenu comme limite de la suite S_p (cf (26)).On a :

$$S_p(x,y) = K^{(1)}(x,y) + \sum_{n=2}^{p} \int_\Gamma K^{(1)}(x,t)\ K^{(n-1)}(t,y)\ d\sigma(t)$$

$$= K^{(1)}(x,y) + \int_\Gamma K^{(1)}(x,t)\ S_{p-1}(t,y)\ d\sigma(t)$$

Passons à la limite. Il vient

$$K(x,y) = K^{(1)}(x,y) + \int_\Gamma K^{(1)}(x,t)\ K(t,y)\ d\sigma(t)$$

$$= (1-\varepsilon(x))\ \phi(x,y) + (1-\varepsilon(x)) \int_\Gamma \phi(x,y)\ K(t,y)\ d\sigma(t)$$

Divisons par $(1-\varepsilon(x))$ et intégrons par rapport à x. On obtient

$$\int_\Gamma \frac{K(x,y)}{1-\varepsilon(x)}\ d\sigma(x) = 1 + \int_\Gamma K(t,y)\ d\sigma(t)$$

D'ou

$$\int_\Gamma \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)}\ K(x,y)\ d\sigma(x) = 1$$

• •

2.3. Résolution du modèle complet.

On cherche une solution du système (1)-(5). Physiquement, la température doit être comprise entre :

$$T_{inf} = \text{Min}\ \{ \inf_{\Gamma_0} T_0 , \inf_{\Gamma_2} T_2 \}$$

$$T_{sup} = \text{Max}\ \{ \sup_{\Gamma_0} T_0 , \sup_{\Gamma_2} T_2 \}$$

T_{inf} et T_{sup} sont strictement positifs.

On se restreint à cet intervalle [T_{inf} ,T_{sup}] ,en posant

$$\overline{T}(x) = \begin{cases} T_{inf} & \text{si} \quad T(x) \leq T_{inf} \\ T(x) & \text{si} \quad T_{inf} \leq T(x) \leq T_{sup} \\ T_{sup} & \text{si} \quad T_{sup} \leq T(x) \end{cases}$$

Etant donné $T \in L^2(\Gamma)$ on note $\varphi(T)$ l'élément de $L^\infty(\Gamma)$. défini par

$$\varphi(T)(x) = (\overline{T}(x))^4$$

On étudie alors le problème modifié:

trouver T vérifiant:

$$\begin{cases} -\Delta T = 0 & \text{dans } \Omega. \quad (29) \\ T(x) = T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 \quad (30) \\ -\lambda \dfrac{\partial T}{\partial n}(x) = \dfrac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} (\sigma\, \varphi(T)(x) - w(x)) & \text{sur } \Gamma_1 \quad (31) \\ w(x) = (1-\varepsilon(x)) \displaystyle\int_\Gamma \phi(x,y)\, w(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\, \sigma\, \varphi(T)(x) & \text{sur } \Gamma \quad (32) \\ T(x) = T_2(x) & \text{sur } \Gamma_2 \quad (33) \end{cases}$$

avec la proposition 2.3 on peut éliminer w entre (31) et (32).On obtient sur Γ_1.

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n}(x) = \varepsilon(x)\, \sigma\, \varphi(T)(x) - \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \int_\Gamma K(x,y)\ \varepsilon(y)\ \sigma\, \varphi(T)(y)\ d\sigma(y) \qquad (34)$$

Dans l'intégrale on a prolongé T sur Γ_2 en utilisant (33) .Le couplage des températures sur la frontière Γ_1 apparait clairement sur cette formule.

On note q l'opérateur défini sur $L^2(\Gamma_1)$ par:

$$q(T)(x) = \varepsilon(x)\,\sigma\,\varphi(T)(x) - \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \int_{\Gamma} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ \sigma\,\varphi(T)(y)\ d\sigma(y) \qquad (35)$$

Proposition 2.5.

q est un opérateur lipschitzien de $L^2(\Gamma_1)$ dans $L^2(\Gamma_1)$ et l'image de $L^2(\Gamma_1)$ par q est bornée dans $L^\infty(\Gamma_1)$..

Démonstration.

Soient U et V dans $L^2(\Gamma_1)$.On a en posant $C = T^3_{sup}$:

$$|q(U)(x) - q(V)(x)| \leq C\,\sigma\,|U(x) - V(x)|$$

$$+ \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)}\ \sigma \int_{\Gamma_1} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ |U(y) - V(y)|\ d\sigma(y)$$

Posons :

$$\psi(x) = \int_{\Gamma_1} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ |U(y) - V(y)|\ d\sigma(y).$$

Comme $\sup\limits_{x \in \Gamma_1} \int_{\Gamma_1} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ d\sigma(y) \leq \sup\limits_{x \in \Gamma_1} \int_{\Gamma} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ d\sigma(x) \leq 1 - \varepsilon_0$

on obtient avec l'inégalité de Young (cf [11]) :

$$\|\psi\|_2 \leq (1-\varepsilon_0)\ \|U - V\|_2$$

D'ou :

$$\|q(U) - q(V)\|_2 \leq \sigma C \left[\varepsilon_1 + \frac{\varepsilon_1}{1-\varepsilon_1}(1-\varepsilon_0)\right] \|U - V\|_2$$

Ce qui montre que q est lipschitzien de $L^2(\Gamma_1)$ dans $L^2(\Gamma_1)$.

$$|q(U)(x)| \leq \varepsilon_1 \sigma T_{sup}^4 + \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \sigma \int_{\Gamma_1} K(x,y)\, \varepsilon(y)\, T_{sup}^4 \, d\sigma(y) \leq 2\, \varepsilon_1 \sigma T_{sup}^4$$

L'image de $L^2(\Gamma_1)$ par q est donc bornée dans $L^\infty(\Gamma_1)$.

• •

Proposition 2.6.

Si $T(x) \geq T_{sup}$ (respectivement $T(x) \leq T_{inf}$) on a

$q(T)(x) \geq 0$ (respectivement $q(T)(x) \leq 0$)

Démonstration.

$T(x) \geq T_{sup}$ implique $\varphi(T)(x) = T_{sup}^4$.

D'autre part ,on a pour tout $x \in \Gamma$, $\varphi(T)(x) \leq T_{sup}^4$ En utilisant (26) il vient donc

$$q(T)(x) \geq \varepsilon(x) \sigma T_{sup}^4 - \frac{\sigma T_{sup}^4 \varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \int_{\Gamma} K(x,y)\, \varepsilon(y)\, d\sigma(y) = 0$$

• •

Le problème (29), (30), (33), (34) s'écrit

$$\left|\begin{array}{lcll} -\Delta T & = & 0 & \text{dans } \Omega. \quad (36) \\ T(x) & = & T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 \quad (37) \\ -\lambda \dfrac{\partial T}{\partial n}(x) & = & q(T)(x) & \text{sur } \Gamma_1 \quad (38) \end{array}\right.$$

Proposition 2.7.

Le problème (36), (37), (38) admet une solution dans $H^1(\Omega)$.

Démonstration.

On note M_0 l'opérateur d'itération dans $H^1(\Omega)$ défini par le diagramme suivant

$$\begin{tikzcd}
H^1(\Omega) \arrow[r, "M_0"] \arrow[d, "t"'] & H^1(\Omega) \\
H^{1/2}(\Gamma_1) \arrow[d, "j"'] & H^{1/2}(\Gamma_1) \arrow[u, "r"'] \\
L^2(\Gamma_1) \arrow[r, "q"'] & L^2(\Gamma_1) \arrow[u, "j^*"]
\end{tikzcd}$$

où t est l'opérateur trace sur Γ_1 , j l'injection de $H^{1/2}(\Gamma_1)$ dans $L^2(\Gamma_1)$, j^* l'adjoint de j et r l'opérateur continu qui à tout $v \in H^{-1/2}(\Gamma_1)$ associe $u \in H^1(\Omega)$ solution de

$$\left|\begin{array}{lcll}
-\Delta u & = & 0 & \text{dans } \Omega. \\[2ex]
u(x) & = & T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 \\[2ex]
-\lambda \dfrac{\partial u}{\partial n}(x) & = & v(x) & \text{sur } \Gamma_1
\end{array}\right.$$

Par composition l'opérateur $M_0 = r \circ j^* \circ q \circ j \circ t$ est continu de $H^1(\Omega)$ dans $H^1(\Omega)$. L'existence d'une solution s'obtient en appliquant le théorème de Schauder.

Comme l'image par q de $L^2(\Gamma_1)$ est bornée dans $L^\infty(\Gamma_1)$, il existe une boule fermée B de $L^\infty(\Gamma_1)$ telle que $q(L^2(\Gamma_1))$ soit inclus dans B. De plus J^* étant un opérateur linéaire et compact , l'adhérence de $D = r(j^*(B))$ est un convexe compact de $H^1(\Omega)$.

M_0 est donc un opérateur continu de $H^1(\Omega)$ dans $H^1(\Omega)$ tel que $M_0(\overline{D})$ soit inclus dans $\overline{D}$.

M_0 admet donc un point fixe u solution de (36), (37), (38).

• •

Proposition 2.8

Toute solution de (25), (26), (27), est dans l'intervalle $[\, T_{inf}, T_{sup} \,]$

Démonstration.

Posons $v = T - T_{sup}$. On note $v^+ = \sup(v, 0)$ et $v^- = \sup(-v, 0)$. On a $T \leq T_{sup}$ si et seulement si $v^+ = 0$.

Sur Γ_0, on a $T = T_0 \leq T_{sup}$ et donc $v^+ = 0$. En multipliant (25) par v^+ et en utilisant la formule de Green , il vient

$$\lambda \int_\Omega \nabla T \, \nabla v^+ \, d\Omega + \int_{\Gamma_1} q(T)\, v^+ \, d\sigma = 0 \, \lambda$$

$$\lambda \int_\Omega |\nabla v^+|^2 \, d\Omega + \int_{\Gamma_1} q(T)\, v^+ \, d\sigma = 0$$

Avec la proposition (6) on a

$$\int_{\Gamma_1} q(T)\, v^+ \, d\sigma \geq 0 \qquad \text{d'où} \qquad \int_\Omega |\nabla v^+|^2 \, d\Omega = 0$$

et $v^+ = 0$ car $v^+ = 0$ sur Γ_0. De la même façon , on obtient $T \geq T_{inf}$.

• •

On a donc vérifié que toute solution du problème modifié (36), (37), (38) est solution du problème initial (1)-(5).

On va maintenant établir l'unicité de la solution pour (36), (37), (38), en utilisant la technique des sous et sur solutions.

On considère l'opérateur d'itérations $M_\nu : T_k \rightarrow T_{k+1}$ défini par :

$$\left|\begin{array}{llll} -\Delta T_{k+1} & = & 0 & \text{dans } \Omega. \quad (39) \\ T_{k+1}(x) & = & T_0(x) & \text{sur } \Gamma_0 \quad (40) \\ -\nu\, T_{k+1}(x) - \lambda \dfrac{\partial T_{k+1}}{\partial n}(x) & = & -\nu\, T_k(x) + q(T_k)(x) & \text{sur } \Gamma_1 \quad (41) \end{array}\right.$$

où ν est choisi de façon que $u_2 \geq u_1$ implique

$$\nu\, u_2(x) - \varepsilon(x)\, \sigma\, \varphi(u_2)(x) - \nu\, u_1(x) + \varepsilon(x)\, \sigma\, \varphi(u_1)(x) \geq 0 \qquad \text{p.p.}$$

Pour cela ,on prend $\nu \geq 4\ \varepsilon_1\ \sigma\ T^3_{sup}$.

Proposition 2.9.

Pour $\nu \geq 4\ \varepsilon_1\ \sigma\ T^3_{sup}$, M_ν est un opérateur monotone croissant de $H^1(\Omega)$ dans $H^1(\Omega)$

Démonstration.

Soient v_2 et v_1 dans $H^1(\Omega)$,tels que $v_2 \geq v_1$. On pose $u_2 = M_\nu v_2$, $u_1 = M_\nu v_1$. $u = u_2 - u_1$ est solution de

$$-\Delta u = 0 \quad \text{dans } \Omega.$$

$$u(x) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_0$$

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu\, u(x) = \nu\,(v_1 - v_2)(x) - \varepsilon(x)\ \sigma\ (\varphi(v_2) - \varphi(u_1))(x)$$

$$+ \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \int_{\Gamma_1} K(x,y)\ \varepsilon(y)\ \sigma\ (\varphi(v_2) - \varphi(u_1))(y)\ d\sigma(y) \quad \text{sur } \Gamma_1$$

Comme K est un noyau positif et avec le choix de ν , on voit que $\lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu\, u \geq 0$ sur Γ_1. u est donc positif ce qui montre la croissance de M_ν.

Définition.

On dit que u est une sous-solution (resp^t sur solution) de (39), (40), (41) si
$u \leq M_\nu u$ (resp^t $u \geq M_\nu u$)

Pour le problème considéré on a une sous-solution naturelle T_{inf} et une sur solution T_{sup}

Proposition 2.10.

On pose $u_i = T_{inf}$ et $u_s = T_{sup}$.
On a $u_i \leq M_\nu.u_i$ et $u_s \geq M_\nu.u_s$

Démonstration .

Vérifions que u_i est une sous-solution.
On pose $u = u_i - M_\nu u_i$. On a $\lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu u \geq 0$ sur Γ_1 .En effet on a

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu u = \varepsilon(x)\sigma T_{inf}^4 - \frac{\varepsilon(x)}{1-\varepsilon(x)} \int_{\Gamma_1} K(x,y)\, \sigma\, \varepsilon(y)\, T_{inf}^4 \, d\sigma(y)$$

Avec (16) on obtient $\lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu u = 0$ et u est solution de :

$$\left|\begin{array}{lcll} -\Delta u & = & 0 & \text{dans } \Omega. \\ u(x) & \leq & 0 & \text{sur } \Gamma_0 \\ \lambda \frac{\partial u}{\partial n}(x) + \nu u(x) & \leq & 0 & \text{sur } \Gamma_1 \end{array}\right.$$

On en déduit que $u \leq 0$ et u_i est bien une sous-solution . De la même façon on démontre que T_{sup} est une sur solution.

Comme $T_{inf} \leq T_{sup}$, il résulte de la monotonie de M_ν la

Proposition 2.11.

Le système (25), (26), (27) admet deux solutions u_* et u^* .
On a $T_{inf} \leq u_* \leq u^* \leq T_{sup}$
Toute solution u de (25), (26), (27) est comprise entre u_* et u^*

Démonstration.

Elle se fait comme dans [10] , en utilisant les méthodes de monotonie dans $H^1(\Omega)$.
Pour établir l'unicité il suffit maintenant de montrer que $u_* = u^*$

Proposition 2.12.

Le système (36), (37), (38) admet une solution unique.

Démonstration.

On pose $v = u_* - u^* \cdot v$ est solution de

$$\left|\begin{array}{lcll} -\Delta v & = & 0 & \text{dans } \Omega. \\ v(x) & = & 0 & \text{sur } \Gamma_0 \\ \lambda \dfrac{\partial v}{\partial n}(x) & = & q(u_*) - q(u^*) & \text{sur } \Gamma_1 \end{array}\right.$$

On a $\displaystyle\int_{\partial\Omega} \frac{\partial v}{\partial n}(x)\, d\sigma(x) = 0$ .Comme $v \leq 0$ sur Ω et $v = 0$ sur Γ_0 , on a $\dfrac{\partial v}{\partial n} \geq 0$ sur Γ_0

Nous allons établir que $v = 0$ sur Ω en montrant que $\dfrac{\partial v}{\partial n} = 0$ sur Γ_0. Pour cela ,il suffit de prouver que

$$\int_{\Gamma_1} \frac{\partial v}{\partial n}(x)\, d\sigma(x) \geq 0 \qquad \text{soit encore} \qquad \int_{\Gamma_1} \left(q(u_*)(x) - q(u_*)(x) \right) d\sigma(x) \leq 0$$

Prolongeons u_* et u^* sur Γ_2 par T_2. On a alors

$$\int_{\Gamma_1} \left(q(u_*)(x) \right) d\sigma(x) = \int_{\Gamma} \varepsilon(x)\ \sigma\ \varphi(u_*)(x)\ d\sigma(x)$$

$$+ \int_{\Gamma} \frac{\varepsilon(x)}{1 - \varepsilon(x)} \int_{\Gamma} K(x,y)\ \sigma\, \varepsilon(y)\ \varphi(u_*)(y)\ d\sigma(y)\ d\sigma(y)$$

En permuttant l'ordre d'intégration dans l'intégrale double et en utilisant (17) on obtient

$$\int_{\Gamma_1} \left(q(u_*)(x) \right) d\sigma(x) = 0$$

Ce qui traduit la conservation du flux.On a la même relation pour u^*.

On en déduit que

$$\int_{\Gamma_1} (q(u_*)(x) - q(u^*)(x)) \, d\sigma(x) = 0$$

et donc $\frac{\partial v}{\partial n} = 0$ sur Γ_0 .

D'aprés le principe du maximum de Hopf on en déduit que $v = 0$ sur Ω.(cf [12]).

Si on modifie le problème (1)-(5) en travaillant sur un intervalle $[T_i,T_s]$ avec Ti < Tinf et $T_{sup} < T_s$ on obtient de la même manière une solution et une seule dans cette intervalle qui est solution de (5).Le problème initial admet donc une seule solution bornée sur Ω .Cette solution est comprise entre T_{inf} et T_{sup}.

En utilisant les mêmes techniques de démonstration , on obtiendrait l'existence et l'unicité d'une solution pour le problème complet.

• •

CHAPITRE III

RESOLUTION NUMERIQUE

INTRODUCTION..... 53

1. APPROXIMATION DU RAYONNEMENT..... 54

1.2. Rappel de l'équation intrégrale (E)..... 55

1.2. Espace d'approximation..... 55

1.3. L équation intégrale approchée (Eh)..... 56

1.4. Calcul de la perte de chaleur par rayonnement qh..... 57

1.4.1. Calcul des facteurs de forme..... 57

1.4.2. Résolution du système de Gebhart..... 58

1.5. Propriétés de la perte de chaleur par rayonnement qh..... 58

2. RESOLUTION DU PROBLEME (P) PAR DES ELEMENTS FINIS.....
DE REVOLUTION 61

2.1. Invariance par rotation du problème et de sa solution..... 61

2.3. Construction du sous espace d'approximation..... 62

2.3. Le probleme variationnel approche (Ph)..... 64

2.3.1. Approximation de la condition aux limites de type rayonnement 64

2.3.2. Approximation de la condition aux limites de type convection 65

2.3.3. Formulation variationnelle de (Ph) 65

2.4. Résolution de (Ph) par la méthode de Newton 66

2.5. Résolution du système linéaire à chaque itération 68

2.5.1. Le système linéaire 68

2.5.2. Prise en compte de la condition aux limites bloquée..... 69

2.5.1. Résolution du systeme lineaire 70

INTRODUCTION

Le calcul complet de la température nécessite la résolution d'un système non linéaire qui résulte de la discrétisation de la formulation variationnelle.

Les non-linéarités sont dûes aux échanges par rayonnement et convection. Elles apparaissent sous forme d'intégrales de surface dans la matrice de rigidité et dans le second membre.

La partie délicate à traiter est la contribution du rayonnement qui introduit un couplage des températures sur le bord du domaine.

C'est l'équation intégrale (cf para 2.3.4, chap.1) qui donne la relation entre la température à la frontière et le flux de chaleur perdu par rayonnement par cette frontière.

On résoud d'abord cette équation intégrale dans le paragraphe 1.Ce qui après discrétisation et calcul des facteurs de forme conduit à l'inversion de la matrice de Gebhart.

Dans le paragraphe 2, on developpe la méthode de Newton pour la résolution du problème complet.

1. APPROXIMATION DU RAYONNEMENT.

1.2. Rappel de l'équation intrégrale (E).

Rappelons que le calcul de la perte de chaleur par rayonnement q_{ray} à température donnée T sur $\Gamma_{ray} = \Gamma^c_{ray} \cup \Gamma^f_{ray}$ nous conduit à résoudre l'équation intégrale

$$(E) \qquad w(x) = (1 - \varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \Phi(x,y)\, w(y)\, dy + e(x)$$

où nous avons posé $e(x) = \sigma\, \varepsilon(x)\, T^4(x)$. On a ensuite:

$$q_{ray}(x) = \frac{\varepsilon(x)}{1 - \varepsilon(x)} \left(w(x) - e(x) \right)$$

1.2. Espace d'approximation.

La cavité de rayonnement est découpée en facettes :

$$\Gamma_{ray} = \bigcup_{i \in \mathcal{J}_{ray}} S_i$$

L'équation intégrale se résolvant dans $L^1(\Gamma_{ray})$, on choisit une approximation P_0:

$$W_h(\Gamma_{ray}) = \{ v : \Gamma_{ray} \to \mathbb{R}, \text{ constante par facette } \}$$

Les fonctions indicatrices $\{X_i\}_{i \in \mathcal{J}_{ray}}$ des facettes S_i forment une base de $W_h(\Gamma_{ray})$

L'émissivité ε , constante par matériau et donc par facette s'écrit :

$$\varepsilon(x) = \sum_{i \in \mathcal{J}_{ray}} \varepsilon_i\, X_i(x)$$

1.3. L'équation intégrale approchée (E_h).

L'équation intégrale (E) est une équation de bilan qui doit être vérifiée par w presque partout sur Γ_{ray}. On calcule une solution approchée w_h de w par une méthode variationnelle en faisant des bilans locaux.

On cherche w_h de la forme :

$$w_h(x) = \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} w_h^i \; X_i(x)$$

tel que

$$\int_{\Gamma_{ray}} w_h(x)\, X_i(x)\, d\sigma(x) =$$

$$\int_{\Gamma_{ray}} \left((1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \phi(x,y)\, w_h(y)\, d\sigma(y) + \varepsilon(x)\, \sigma\, T^4(x) \right) X_i(x)\, d\sigma(x)$$

$$\forall\, i \in \mathcal{F}_{ray}$$

En notant S_i l'aire de la facette n° i et comme $\varepsilon(x)$ est constante par facette, il vient:

$$w_h^i\, S_i =$$

$$(1-\varepsilon_i) \sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} \left(\int_{\Gamma_i} \int_{\Gamma_j} \phi(x,y)\, d\sigma(y)\, d\sigma(x) \right) w_h^j + \sigma\, \varepsilon_i \int_{\Gamma_i} T^4(x)\, d\sigma(x)$$

$$\forall\, i \in \mathcal{F}_{ray}$$

Posons:

$$F_{i,j} = \frac{1}{S_i} \left(\int_{\Gamma_i} \int_{\Gamma_j} \phi(x,y)\, d\sigma(y)\, d\sigma(x) \right)$$

$$W_h = (w_h^1, w_h^2, \ldots, w_h^r) \quad \text{ou} \quad r = \mathrm{card}(\mathcal{F}_{ray})$$

$$E_h = (e_h^1, e_h^2, \ldots, e_h^r) \quad \text{avec} \quad e_h^i = \frac{1}{S_i}\, \sigma\, \varepsilon_i \int_{\Gamma_i} T^4(x)\, d\sigma(x)$$

On obtient ainsi l'équation intégrale discrétisée $(E)_h$, appelée équation de Gebhart:

trouver $W_h \in \mathbb{R}^r$ tel que :

$$(E)_h \qquad \boxed{w_h^i = (1-\varepsilon_i) \sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j}\, w_h^j + e_h^i}$$

Proposition

Les coefficients $F_{i,j}$ ont les propriétés suivantes :

i) $F_{i,j} \geq 0 \qquad \forall\ i,j \in \mathcal{F}_{ray}$

ii) $\displaystyle\sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j} = 1 \qquad \forall\ i \in \mathcal{F}_{ray}$

Démonstration

i) $F_{i,j} \geq 0$ car $\phi \geq 0$.

ii) $$\sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j} = \sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} \frac{1}{S_i}\left(\int_{\Gamma_i}\int_{\Gamma_j} \phi(x,y)\ d\sigma(y)\, d\sigma(x)\right)$$

$$= \frac{1}{S_i}\int_{\Gamma_i}\left(\sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}}\int_{\Gamma_j} \phi(x,y)\ d\sigma(y)\right) d\sigma(x) = \frac{1}{S_i}\int_{\Gamma_i} d\sigma(x) = 1$$

• •

Si l'on note F la matrice $F_{i,j}$ et D_ε la matrice diagonale $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_r)$, résolution de $(E)_h$, est celle du système linéaire dans $\mathbb{R}^r$:

$$\boxed{(\mathrm{Id} - (\mathrm{Id} - D_\varepsilon)\, F)\, W_h = E_h}$$

Proposition

La matrice $M = \mathrm{Id} - (\mathrm{Id} - D_\varepsilon)\, F$ est inversible.
Son inverse M^{-1} est positive.

Démonstration:

On peut calculer la norme de $(\mathrm{Id} - D_\varepsilon)\, F$.

$$\|(\mathrm{Id} - D_\varepsilon)\, F\|_\infty = \max_{i \in \mathcal{F}_{ray}}\left(|1 - \varepsilon_i| \sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j}\right) = \max_{i \in \mathcal{F}_{ray}} |1 - \varepsilon_i| < 1$$

On en déduit que M est inversible et on a

$$M^{-1} = \sum_{n \geq 0} [(\mathrm{Id} - D_\varepsilon)\, F)]^n$$

et comme $0 < \varepsilon_i < 1$ et $F_{i,j} \geq 0$, M^{-1} est positive.

1.4. Calcul de la perte de chaleur par rayonnement q_h.

Le calcul de chaleur par rayonnement se déroule en deux étapes.

La première étape est le calcul des coefficients $F_{i,j}$, appelés facteurs de forme et qui expriment le rôle de la géométrie de la cavité Γ_{ray}.dans les échanges par rayonnement.

La seconde étape consiste à calculer, pour des facteurs de formes et une répartition de température donnés de Γ_{ray}.la perte de chaleur par rayonnement .C'est la résolution du système de Gebhart.

1.4.1. Calcul des facteurs de formes

Nous précisons d'abord la signification physique des facteurs de forme.
w_h^i étant la densité de flux sortant de la facette S_i., le flux total sortant de la facette S_i est:

$$\phi_i = w_h^i \, S_i$$

Le flux sortant de la facette S_i atteignant lafacette S_j est:

$$\phi_{i,j} = \int_{\Gamma_j}\int_{\Gamma_i} \phi(x,y)\, w_h(y)\, d\sigma(y)\; d\sigma(x) = F_{i,j}\, w_h^i\, S_i$$

Donc $F_{i,j}$ est le rapport $\dfrac{\phi_{i,j}}{\phi_i}$

Les coefficients $F_{i,j}$ sont appelés **facteurs de forme**.Il ne dépendent que de la géométrie et du positionnement des facettes S_i.
Pour des géométries simples ,en particulier dans le cas axisymétrique,les facteurs de forme peuvent se calculer par une méthode analytique.
Il existe des formulaires recensant de nombreux cas de figure(cf[20]). C'est ainsi que nous obtiendrons nos facteurs de forme.
En outre, il est possible d'obtenir les facteurs de forme pour des géométries plus complexes, lorsque la décomposition des surfaces en éléments simples est possible.
Les propriétés montrées paragraphe 1.3 sont alors très utiles.

1.4.2. Résolution du système de Gebhart.

On les relations dans $\mathbb{R}^r$:

i) $E_h = (e_h^1, e_h^2, \ldots, e_h^r)$ avec $e_h^i = \frac{1}{S_i} \sigma \varepsilon_i \int_{\Gamma_i} T^4(x)\, d\sigma(x)$

ii) $W_h = M^{-1} E_h$ avec $M = Id - (Id - D_\varepsilon) F$

iii) $Q_h = D_\varepsilon (Id - D_\varepsilon)^{-1} [W_h - E_h]$

L'objectif est de calculer le flux de chaleur Q_h perdu par la paroi rayonnante fonction de sa température T. Pour cela, il faut donc résoudre successivement i , ii et iii .

i) Nous expliquons le calcul de E_h au paragraphe 2.3.1. Il relève d'une méthode d'intégration numérique.

ii) Il s'agit de la résolution d'un système linéaire.Cependant, dans le cadre de la résolution numérique du problème complet de la thermique du tirage, nous devons expliciter la relation entre T et Q_h, il faut donc calculer M^{-1}.

Pour calculer les colonnes de la matrice M^{-1}, nous procédons à une factorisation de Gauss de la matrice M:

$$M = LU$$

ou L est triangulaire inférieure à diagonale unité,
U est triangulaire supérieure.

Les r colonnes de la matrice M^{-1} sont alors calculées par r descentes-remontées

La relation entre E_h et Q_h s'écrit :

$$Q_h = D_\varepsilon (Id - D_\varepsilon)^{-1} [M^{-1} - Id] E_h$$

1.5. Propriétés de la perte de chaleur par rayonnement q_h.

Nous montrons que l'équation intégrale discrétisé $(E)_h$ est équivalente à une équation intégrale dans $W_h(\Gamma_{ray})$ formulée avec un noyau ϕ_h .Le noyau ϕ_h possède les mêmes propriété que le noyau de l'équation intégrale ϕ dans l'espace continu (E), on en déduit alors des propriétés de q_h.

Nous définissons e_h par:

$$e_h(x) = \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} e_h^i \, X_i(x) \qquad \text{avec} \qquad e_h^i = \frac{1}{S_i} \sigma \, \varepsilon_i \int_{\Gamma_i} T^4(x) \, d\sigma(x)$$

Proposition

$w_h \in W_h(\Gamma_{ray})$ est solution de $(E)_h$ si et seulement si :

$$w_h(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \phi_h(x,y) \, w_h(y) \, d\sigma(y) + e_h(x)$$

avec

$$\phi_h(x,y) = \sum_{i,j \in \mathcal{F}_{ray}} X_i(x) \; X_j(y) \frac{1}{S_i S_j} \left(\int_{\Gamma_i} \int_{\Gamma_j} \phi(s,t) \, d\sigma(s) \, d\sigma(t) \right)$$

Le noyau ϕ_h possède les propriétés :

i) $\quad \phi_h(x,y) \geq 0 \qquad \forall \, x,y \in \Gamma_{ray}$

ii) $\quad \phi_h(x,y) = \phi_h(y,x) \qquad \forall \, x,y \in \Gamma_{ray}$

ii) $\quad \displaystyle\int_{\Gamma_{ray}} \phi_h(x,y) \; d\sigma(x) = \int_{\Gamma_{ray}} \phi_h(x,y) \; d\sigma(y) = 1$

démonstration

soit $w_h \in W_h(\Gamma_{ray})$ solution de :

$$w_h(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \phi_h(x,y) \, w_h(y) \, d\sigma(y) + e_h(x)$$

en exprimant le noyau ϕ_h à l'aide des facteurs de forme ceci est équivalent à:

$$w_h(x) = (1-\varepsilon(x)) \int_{\Gamma_{ray}} \left(\sum_{i,j \in \mathcal{F}_{ray}} \frac{F_{i,j}}{S_j} X_i(x) \, X_j(y) \right) w_h(y) \, d\sigma(y) + e_h(x)$$

soit

$$w_h(x) = (1-\varepsilon(x)) \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} X_i(x) \left(\sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} \frac{F_{i,j}}{S_j} \int_{\Gamma_{ray}} X_j(y) \, w_h(y) \, d\sigma(y) \right) + e_h(x)$$

soit

$$w_h(x) = (1-\varepsilon(x)) \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} X_i(x) \left(\sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j}\, w_h^j \right) + e_h(x)$$

soit

$$(E)_h \qquad w_h^i = (1 - \varepsilon_i) \sum_{j \in \mathcal{F}_{ray}} F_{i,j}\, w_h^j + e_h^i$$

• •

Posons

$$T_h(x) = \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} T_i X_i(x) \qquad \text{avec } T_i = \left(\frac{1}{S_i} \int_{\Gamma_i} T^4(x)\, d\sigma(x) \right)^{1/4} \quad \forall\ i \in \mathcal{F}_{ray}$$

alors la température T_h est une température constante par facette qui donne la même émission e_h que T

Proposition 3.4.

q_h posséde les propriétés suivantes:

i). $$\int_{\Gamma_{ray}} q_h(x)\, dx = 0$$

ii). $T_h = C^{ste} \Rightarrow q_h = 0.$

iii). $T_i = \max_{j \in \mathcal{F}_{ray}} T_j \Rightarrow q_h^i \geq 0$, $T_i = \min_{j \in \mathcal{F}_{ray}} T_j \Rightarrow q_h^i \leq 0$

démonstration.

Le noyau ϕ_h possède les mêmes propriétés que le noyau ϕ. La perte de chaleur approchée possède donc les mêmes propriétés que la perte q du probléme continu.

2. RESOLUTION DU PROBLEME (P) PAR DES ELEMENTS FINIS DE REVOLUTION.

2.1 INVARIANCE PAR ROTATION DU PROBLEME (P) ET DE SA SOLUTION.

Soit un repère orthonormé Oxyz dans $\mathbb{R}^3$, l'axe Oz coïncidant avec l'axe de symétrie de Ω.
Le problème (P) (cf para.1,chap.2) est invariant par rotation d'axe Oz.On démontre qu'il en est de même de sa solution (cf[10]).
Soit $V = \{ v \in H^1(\Omega) \,/\, v \circ R = v \cdot \forall R$ rotation d'axe Oz $\}$. La formulation variationelle de (P) est alors :

$$\left|\begin{array}{l} T \in V \,,\, T = T_{imp} \quad \text{sur } \Gamma_{imp} \\[2ex] \displaystyle\int_{\Omega} \lambda \, \nabla T \, \nabla v + \int_{\Gamma_{conv}} q_{conv}(T) \, v + \int_{\Gamma_{ray}^{c}} q_{ray}(T) \, v = 0 \\[2ex] \qquad \forall v \in V \quad \text{tel que } v \equiv 0 \quad \text{sur } \Gamma_{imp} \end{array}\right.$$

2.2 Construction du sous-espace d'approximation V_h de V.

Nous allons construire un sous-espace d'approximation axisymétrique V_h de V,par rotation d'un espace d'approximation 2D ,$\mathcal{V}_h$.

un maillage 2D.

Désignons par ω l'ouvert de $\mathbb{R}^2$ suivant:

$$\omega = \Omega \cap \{ (x,y,z) \in \mathbb{R}^3 \ / \ x > 0 \ , \ y = 0 \}$$

Nous supposerons que ω est un ouvert polygonal de et donnons sur une quadrangulation $\mathcal{T}_h$ vérifiant:

1) $\forall K \in \mathcal{T}_h \quad , K < \overline{\omega}$

2) $\bigcup_{K \in \mathcal{T}_h} K = \overline{\omega}$

3) $\forall K_1 , K_2 \in \mathcal{T}_h \ , K_1 \neq K_2$
$K_1 \cap K_2$ est soit vide,soit un sommet,soit un côté.

Nous désignerons les noeuds du maillage par N_i ,$i \in \mathcal{N}$

Interpolation 2D.

Nous avons choisi l'élément fini de Lagrange ($\hat{K}$,$\hat{P}$,$\hat{\Sigma}$) (cf[23]):

$\hat{K} = [0,1]^2$
$\hat{P} = Q_1 = \{ p(\hat{x} , \hat{y}) = a_0 + a_1 \hat{x} + a_2 \hat{y} + a_3 \hat{x} \hat{y} \}$
$\hat{\Sigma} = \{ \hat{N}_1 , \hat{N}_2 , \hat{N}_3 , \hat{N}_4 \}$ (les quatres sommets)

Le quadrilatère courant K se déduit du carré de référence $\hat{K}$ par la transformation F_K définie par:

$$F_K(\hat{x} ,\hat{y}) = \left| \begin{array}{l} x_1 + (x_2 - x_1) \hat{x} + (x_4 - x_1) \hat{y} + (x_3 + x_1 - x_2 - x_4) \hat{x} \hat{y} \\ y_1 + (y_2 - y_1) \hat{x} + (y_4 - y_1) \hat{y} + (y_3 + y_1 - y_2 - y_4) \hat{x} \hat{y} \end{array} \right|$$

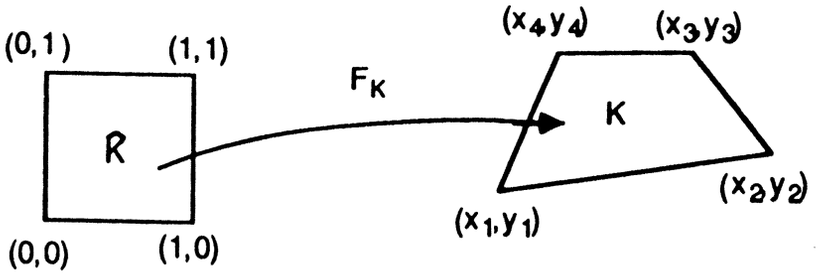


figure 3.1

L'élément courant (K,P,Σ) se déduit de l'élément de référence $(\hat{K},\hat{P},\hat{\Sigma})$ par F_K:

$$K = F_K(\hat{K})$$
$$P_K = \{ p : K \to \mathbb{R} \ / \ p \circ F_K \in \hat{P} \}$$
$$\Sigma = F_K(\hat{\Sigma})$$

Nous remarquons que la restriction de toute application $p \in P_K$ à tout côté s de K est affine. Cela nous permet de construire sur ω l'espace d'interpolation $\mathcal{V}_h$:

$$\mathcal{V}_h = \{ v_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\omega}) \ / \ \forall K \in \mathcal{T}_h \ , v_{/K} \in P_K \} < H^1(\omega)$$

admettant pour base :

$$\{\varphi_i\}_{i \in \mathcal{N}} \qquad \text{avec} \qquad \varphi_i(N_j) = \delta_{i,j} \quad \forall \ i,j \in \mathcal{N}$$

Le sous espace V_h

Les éléments de V_h sont obtenus par rotation des éléments de $\mathcal{V}_h$.:

$$V_h = \{ u_h \in C^0(\bar{\Omega}) \ / \ u_h(x,y,z) = v_h(\sqrt{x^2+y^2},z) \ v_h \in \mathcal{V}_h \} < H^1(\Omega)$$

Nous noterons $\{\Phi_i\}_{i \in \mathcal{N}}$ la base de V_h déduite de $\{\varphi_i\}_{i \in \mathcal{N}}$.On a encore :

$$\Phi_i(N_j) = \delta_{i,j} \quad \forall \ i,j \in \mathcal{N}$$

2.3. Le probleme variationnel approche (P_h).

2.3.1 Approximation de la condition aux limites de type rayonnement.

Le maillage de l'ouvert ω engendre par rotation un découpage en facettes axisymétriques de Γ^c_{ray}. De même, on découpe Γ^f_{ray} en facettes axisymétriques.

$$\Gamma^c_{ray} = \bigcup_{i \in \mathcal{F}^c_{ray}} \Gamma_i \qquad \Gamma^f_{ray} = \bigcup_{i \in \mathcal{F}^f_{ray}} \Gamma_i$$

La première étape du calcul de la perte de chaleur q_h^{ray} en fonction de la température T_h sur Γ_{ray} est le calcul de l'émission e_h :

$$e_h(x) = \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} e_h^i \, X_i(x) \qquad \text{avec} \qquad e_h^i = \frac{1}{S_i} \sigma \varepsilon_i \int_{\Gamma_i} (T_h)^4 (x) \, d\sigma(x)$$

Sur Γ^f_{ray} ,la température T_h^f est donnée constante par facette :

$$T_h^f(x) = \sum_{i \in \mathcal{F}_{ray}} T_f^i \, X_i(x)$$

Sur Γ^c_{ray} , nous prendrons, pour le calcul de e_h ,un valeur moyenne par facette de la température T_h, qui est affine sur les facettes puisqu'approximée par du Q_1 Cette moyenne est calculée sur une facette à partir des valeurs aux sommets:

$$p_h(T_h) = \sum_{i \in \mathcal{F}^c_{ray}} \frac{1}{2} \left(T_h(N_{e_1(i)}) + T_h(N_{e_2(i)}) \right) X_i$$

où:

$N_{e_1(i)}$ et $N_{e_2(i)}$ sont les sommets de la facette S_i .et X_i sa fonction indicatrice.

l'émission s'écrit :

$$e_h = \varepsilon_h \sigma \varepsilon_h \left((p_h(T_h))^4 + (T_h^f)^4 \right)$$

q_h^{ray} s'exprime linéairement en fonction de e_h. Nous pouvons donc écrire

$$q_h^{ray}(T_h) = \mathcal{G}_h(\sigma(p_h(T_h))^4) + (\sigma(T_h^f)^4)$$

où $\mathcal{G}_h$ est l' opérateur linéaire dont la matrice dans la base $\{X_i\}_{i \in \mathcal{J}_{ray}}$ est :

$$G = D_\varepsilon (Id - D_\varepsilon)^{-1} [M^{-1} - Id] D_\varepsilon$$

2.3.2. Approximation de la condition aux limites de type convection.

Nous définissons donc q_h^{conv} comme une application de V_h à valeur dans $L^\infty(\Gamma_{conv})$:

$$q_h^{conv} : V_h \rightarrow L^\infty(\Gamma_{conv})$$

$$q_h^{conv}(T_h) = \alpha | T_h - T_{gaz}|^{0.25} (T_h - T_{gaz})$$

2.3.3. Formulation variationnelle de (Ph) .

La formulation variationnelle de (P_h) est semblable à celle du problème (P):

T_h est solution de (P_h) si et seulement si:

$$(P_h) \left| \begin{array}{l} T_h \in V_h \\ T_h = T_h^{imp} \quad \text{sur } \Gamma_{imp} \\ \displaystyle\int_\Omega \lambda \nabla T_h \nabla v_h + \int_{\Gamma_{conv}} q_h^{conv}(T_h) v_h + \int_{\Gamma_{ray}^c} q_h^{ray}(T_h) v_h = 0 \\ \qquad \forall v_h \in V_h / \ v \equiv 0 \ \text{ sur } \Gamma_{imp} \end{array} \right.$$

2.4. Résolution de (Ph) par la méthode de Newton.

Notons :

$$V_h^0 = \{ v_h \in V_h / \ v \equiv 0 \ \text{ sur } \Gamma_{imp} \} \ \text{ et } \left(V_h^0\right)' \text{ son dual ,}$$

$$V_h^1 = \{ v_h \in V_h / \ v \equiv T_h^{imp} \ \text{ sur } \Gamma_{imp} \}.$$

Considérons l'application:

$$F_h : V_h \to \left(V_h^0\right)'$$

$$u_h \to F_h(u_h) \text{ défini par:}$$

$$F_h(u_h).v_h = \int_\Omega \lambda \ \nabla u_h \nabla v_h + \int_{\Gamma_{conv}} q_h^{conv}(u_h) \ v_h + \int_{\Gamma_{ray}^c} q_h^{ray}(u_h) \ v_h \quad \forall \ v_h \in V_h^0$$

Alors (Ph) est équivalent à :

$$\left| \begin{array}{l} \text{trouver } T_h \in V_h^1 \ \text{ tel que :} \\ \qquad F_h(T_h) = 0 \end{array} \right.$$

Proposition :

L'application F_h est différentiable de V_h^1 dans $\left(V_h^0\right)'$ et a pour différentielle:

$$F_h' : V_h^1 \to \mathcal{L}(V_h^0, (V_h^0)')$$:

$$[F_h'(u_h).v_h].w_h = \int_\Omega \lambda \ \nabla v_h \nabla w_h$$

$$+ \int_{\Gamma_{conv}} (1.25 \ \alpha \ | u_h - T_{gaz}|^{0.25} \ v_h) \ w_h$$

$$+ \int_{\Gamma_{ray}^c} \mathcal{G}_h (4 \ \sigma \ (p_h(u_h))^3 \ p_h(v_h)) \ w_h \quad \forall \ u_h \in V_h^1 , \forall \ v_h, w_h \in V_h^0$$

Le schéma itératif est le suivant :

$$
\left|
\begin{array}{l}
* \; T_h^0 \in V_h^1 \\[2ex]
* \; T_h^n \rightarrow T_h^{n+1} \text{ vérifiant:} \\[2ex]
\qquad T_h^{n+1} \in V_h^1 \\[2ex]
\qquad F_h'(T_h^n).\, T_h^{n+1} = F_h'(T_h^n).\, T_h^{n+1} - F_h(T_h^n)
\end{array}
\right.
$$

Ce qui donne à résoudre à chaque itération :

connaissant T_h^n, trouver $T_h^{n+1} \in V_h^1$ tel que:

$$
\left|
\begin{array}{l}
\displaystyle\int_\Omega \lambda \; \nabla T_h^{n+1} \; \nabla v_h + \int_{\Gamma_{conv}} 1.25 \; (\alpha | T_h^n - T_{gaz}|^{0.25}) \quad T_h^{n+1} v_h \\[2ex]
\displaystyle + \int_{\Gamma_{ray}^c} \mathcal{G}_h(\sigma \, 4 \, (p_h(T_h^n))^3 \, p_h(T_h^{n+1})) \; v_h \\[2ex]
= \\[2ex]
\displaystyle\int_{\Gamma_{conv}} (\alpha | T_h^n - T_{gaz}|^{0.25} (1.25 - T_h^n + T_{gaz})) \; v_h \\[2ex]
\displaystyle + \int_{\Gamma_{ray}^c} \mathcal{G}_h(\sigma \, 3 \, (p_h(T_h^n))^4) \; v_h \; - \int_{\Gamma_{ray}^c} \mathcal{G}_h(\sigma (T_h^f)^4) \; v_h \\[2ex]
\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \forall \; v_h \in V_h^0
\end{array}
\right.
$$

2.5. Résolution du système lineaire à chaque itération

2.5.1. Le systeme lineaire

Les éléments v_h de V_h se décomposent sur la base $\{\Phi_i\}_{i \in \mathcal{N}}$:

$$v_h = \sum_{i \in \mathcal{N}} v_h(N_i)\,\Phi_i = \sum_{i \in \mathcal{N}} v_i\,\Phi_i$$

Nous noterons $\{v\}$ le vecteur colonne des coordonnées de v_h dans cette base.
Notons:

$$^t\{v\}\,[A_c^n]\,\{u\} = \int_\Omega \lambda\ \nabla v_h \nabla u_h + \int_{\Gamma_{conv}} (\,1.25\ \alpha |\,T_h^n - T_{gaz}|^{0.25}\,)\ v_h\,u_h$$

$$^t\{v\}\,\{b_c^n\} = \int_{\Gamma_{conv}} v_h\ (\,\alpha |\,T_h^n - T_{gaz}|^{0.25}\,(\,1.25\ -T_h^n + T_{gaz})\,)$$

et

$$^t\{v\}\,[A_r^n]\,\{u\} = \int_{\Gamma_{ray}^c} v_h\ \ \mathcal{G}_h\,(\,4\,\sigma\,(p_h(\,T_h^n\,))^3\,p_h(u_h)\,)$$

$$^t\{v\}\,\{b_r^n\} = \int_{\Gamma_{ray}^c} v_h\ \ \mathcal{G}_h(3\,\sigma\,(p_h(\,T_h^n\,))^4\,) - \int_{\Gamma_{ray}^c} v_h\ \ \mathcal{G}_h(\,\sigma(T_f^f)^4)$$

la matrice $[A_c^n]$ et le second membre $\{b_c^n\}$ proviennent des termes de diffusion et de convection,la matrice $[A_r^n]$ et le second membre $\{b_r^n\}$ proviennent des termes de rayonnement.

Notons

$$[A^n] = [A_c^n] + [A_r^n] \quad , \qquad \{b^n\} = \{b_c^n\} + \{b_r^n\}$$

Alors à chaque itération il faut calculer $\{T^{n+1}\} \in \mathbb{R}^N$ tel que:

$$\left|\begin{array}{ll} T_i^{n+1} = T_i^{imp} & ,\forall\ i \in \mathcal{N}_{imp} \\ ^t\{v\}\,[A^n]\,\{T_i^{n+1}\} = {}^t\{v\}\,\{b^n\} & \forall\ \{v\} \in \mathbb{R}^N\ ,\ \text{tel que}\ v_i = 0\ ,\ \forall\ i \in \mathcal{N}_{imp} \end{array}\right.$$

où $\mathcal{N}_{imp}$ est l'ensemble des noeuds de la frontière à température imposée.

2.5.2. Prise en compte de la condition aux limites bloquée.

On choisit de traiter la condition de Dirichlet en gardant comme variables les valeurs sur Γ_{imp} et en prenant en compte les équations $v_i = T_{imp}(i)$.

Supposons que les degrés de libertés à bloquer soit les derniers :

$$\mathcal{N}_{imp} = \{p+1,\dots,N\}$$

Le système précédent peut se réécrire:

trouver $(T_1^{n+1}, T_2^{n+1}) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^{N-p}$ tel que:

$$\left|\begin{array}{l} T_2^{n+1} = T_2^{imp} \text{ dans } \mathbb{R}^{N-p} \\ \left|{}^t v_1, 0\right| \begin{vmatrix} A_{11}^n & A_{12}^n \\ A_{21}^n & A_{22}^n \end{vmatrix} \begin{vmatrix} T_1^{n+1} \\ T_2^{imp} \end{vmatrix} = \left|{}^t v_1, 0\right| \begin{vmatrix} b_1^n \\ b_2^n \end{vmatrix} \quad \forall\, v_i \in \mathbb{R}^p \end{array}\right.$$

soit encore

$$\left|\begin{array}{l} T_2^{n+1} = T_2^{imp} \text{ dans } \mathbb{R}^{N-p} \\ A_{11}^n\, T_1^{n+1} = b_1^n - A_{12}^n\, T_2^{imp} \end{array}\right.$$

soit encore

$$\begin{vmatrix} A_{11}^n & 0 \\ 0 & Id \end{vmatrix} \begin{vmatrix} T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1^n - A_{12}^n\, T_2^{imp} \\ T_2^{imp} \end{vmatrix}$$

ce que nous noterons:

$$[\tilde{A}^n]\,\{T^{n+1}\} = \{\tilde{b}^n\} \text{dans } \mathbb{R}^N.$$

2.5.1. Résolution du systeme lineaire

la matice $[\tilde{A}^n]$ étant non symétrique on utilise une méthode de double gradient conjugué avec préconditionement par factorisation de Gauss incomplete (cf [14]) .Les itérations sont initialisées avec $\{T^n\}$.

CHAPITRE IV

LE LOGICIEL CRISTAL

INTRODUCTION 75

1. PRESENTATION DU LOGICIEL 77

1.1. Les différentes configurations de tirage représentables 77

1.2. Deroulement d'une session de calcul 78

1.3. Données à fournir par l'utilisateur 80

1.3.1. Description du creuset, du cristal et de l'encapsulant 80
1.3.2. Définition de l'épaule du cristal 81
1.3.3. Définition de l'interface de cristallisation 81
1.3.4. Définition du ménisque 82
1.3.5. Description du couvercle.Positionnement du creuset 82
1.3.6. Propriétés physiques des matériaux 82
1.3.7. Températures 83

2. INTERFACE UTILISATEUR POUR LE MAILLEUR 84

2.1. Technique de maillage 84

2.1.1. Définition d'un domaine simple en vue de son maillage 84
2.1.2. Maillage d'un domaine simple 85
2.1.3. Maillage d'un domaine complexe par recollement de maillage de sous-domaines simples - Application à notre cas 85

2.2. Fonctionnement de l'interface 86

2.3. Programmation de l'interface 87

3. CALCUL DES FACTEURS DE FORME 80

3.1. Décomposition en facettes de la cavité de rayonnement Γray. 80

3.2. Calcul des facteurs de forme. 91

3.2.1. Le choix de la méthode 91

3.2.2. Utilisation des propriétés algébriques des facteurs de forme..... 91

3.2.3. Limites de la géométrie du tirage 93

3.3. Realisation informatique..... 94

3.3.1. Le tableau des facettes..... 94

3.3.2. Tests préliminaires au calcul des facteurs de forme..... 95

i) Test sur l'orientation des facettes 95

ii) Test de détection d'un obstacle aux échanges par rayonnement direct entre deux facettes..... 97

3.3.3. Organisation du formulaire..... 97

4. CALCUL DE LA MATRICE DE RAIDEUR..... 98

4.1. Itérations et préparation des itérations..... 98

4.2. Traitement de $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$ .....

4.2.1. Calculs et assemblage méthode éléments finis de $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$ 99

4.2.2. Mise en oeuvre de MODULEF 101

4.3. Traitement de $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$ 104

4.3.1. Décomposition de $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$ en vue de l'assemblage..... 104

4.3.2. L'assemblage de la matrice $[A_r^n]$ 105

4.3.3. Stockage MORSE de la matrice $[A_r^n]$..... 107

4.3.4. Assemblage rapide de $\left[A_r^n\right]$ à chaque itération 109

4.3.5. Calcul et assemblage du second membre $\{b_r^n\}$..... 109

4.4. Traitement de $[A_n]$ et $[b_n]$ 110

4.4.1. Construction des pointeurs de la matrice-somme avant les itérations. 111

4.4.2. Assemblage rapide de $[A_n]$ à chaque itération 113

INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous présentons le logiciel CRISTAL mettant en oeuvre la méthode de résolution numérique exposée au chapitre précédent.
Le logiciel que nous avons conçu fait appel aux modules de la bibliothèque MODULEF (cf[15]) pour tous les calculs standard de la méthode des éléments finis.Par contre, nous avons programmé les fonctions du logiciel particulier à notre application. Ce sont les points suivants:

Une interface pour le mailleur

La bibliothèque MODULEF comprend un mailleur bidimensionnel, le module APNOPO (cf[16]). Il permet de mailler un domaine complexe par étapes successives.

Cependant, son utilisation est technique. Le travail de préparation des données est important. Nous avons donc créé une interface pour le mailleur. Cette interface est conversationnelle et conçue pour un utilisateur non averti. Elle simplifie la tâche de l'utilisateur du logiciel et diminue considérablement le temps de réalisation d'un maillage.

Nous présentons le fonctionnement et la réalisation de cet interface après un rappel sur la technique du maillage.

Le calcul de la matrice de Gebarht

La matrice de Gebarht est obtenue par discrétisation de l'équation intégrale du rayonnement. (cf para.1, chap.3)
La principale difficulté est dans le calcul des facteurs de forme. Nous avons écarté le calcul par intégration numérique de mise au point difficile.
Nous avons réalisé un formulaire informatique à l'aide de calculs analytiques de facteurs de forme trouvés dans la littérature (cf [19] et [20]). Le domaine d'application de ce formulaire a été étendu par l'exploitation des propriétés algébriques des facteurs de forme.
Nous avons aussi mis au point un test permettant de détecter les obstacles au rayonnement direct entre deux surfaces.
Bien qu'il ait fallu restreindre la généralité des géométries de tirage, la méthode retenue permet de modéliser les conditions d'expérimentation réelles.
Cette réalisation est exposée de manière détaillée car le calcul des facteurs de forme est toujours un problème pour qui l'aborde.

L'assemblage de la matrice de raideur et du second membre

Le problème à résoudre est non linéaire à cause des échanges thermiques par rayonnement et convection gazeuse. La méthode de Newton est utilisée et à chaque itération, on doit construire la matrice de raideur et le second membre du système linéaire résultant de la discrétisation par éléments finis.Ceci se déroule en trois étapes :

i) Assemblage de la matrice $[A_c^n]$ et du second membre $\{b_c^n\}$ dus aux termes de diffusion et de convection:

c'est l'assemblage classique d'une matrice élément finis pour un problème de thermique. Nous en rappelons brièvement la technique. Il est entièrement réalisé à l'aide de MODULEF.

ii) Assemblage de la matrice $[A_r^n]$ et du second membre $\{b_r^n\}$ dus aux termes de rayonnement:

le système linéaire du rayonnement exprime le couplage des températures des éléments situés sur la frontière rayonnante du domaine. Nous en avons conçu l'assemblage. Il est complètement détaillé.

iii) Sommation des deux systèmes précédents pour obtenir le système total $[A_n]$ et $[b_n]$.

La technique **morse** (cf [17]) est utilisée pour le **stockage** de ces trois matrices.

En effet , $[A_c^n]$,$[A_r^n]$ et [An] sont des matrices creuses et leurs profils ne varient pas au cours des itérations. Le profil de $[A_c^n]$ est déterminé par le maillage, celui de $[A_r^n]$ se déduit de la liste des noeuds situés.sur la frontiere soumise au rayonnemment et celui de [An] par superposition des deux précédents.

Pour chacune de ces matrices, seuls les coefficients non nuls sont stockés dans un tableau unidimensionnel. Des tableaux d'adresses, appelés pointeurs, permettent de retrouver les coefficients en fonction de leurs indices de ligne et de colonne dans leur tableau de stokage.
Ces pointeurs liés aux profils sont construits avant les itérations.

Les pointeurs de $[A_c^n]$ sont construit par le code MODULEF, par contre nous avons programmé la construction des pointeurs de $[A_r^n]$
Il en est de même pour $[A_n]$, car $[A_r^n]$ et $[A_c^n]$ sont toutes deux stockées suivant la technique morse, mais $[A_c^n]$ est symétrique, et $[A_r^n]$ ne l'est pas. Dans ce cas, leurs pointeurs sont de structures différentes et la somme ne peut être effectuée par MODULEF.Nous avons donc écrit un module créant les pointeurs de la matrice somme et permettant le calcul de ses coefficients.

1 PRESENTATION DU LOGICIEL.

Ce logiciel a été conçu pour une équipe du LETI expérimentant le tirage des cristaux d'ASGA.

Nous avons donc realisé un logiciel de type industriel.Il est intéractif et son utilisation ne requiert pas la connaissance de la méthode numérique employée.Pour obtenir une cartographie de temperature, il suffit de répondre aux questions du logiciel concernant les conditions de tirage.

1.1 Les différentes configurations de tirage représentables -

Le logiciel permet d'effectuer des simulations dans différentes configurations. Il peut simuler la thermique du four avec ou sans encapsulant, avec ou sans cristal.

En présence du cristal il est possible de représenter le cône de croissance, l' interface de cristallisation et le menisque du bain au contact du cristal.

L'utilisateur peut choisir les formes et les dimensions des éléments du tirage dans certaines limites que nous préciserons.

La figure.4.1 montre un exemple de geometrie de tirage représentable avec cristal:

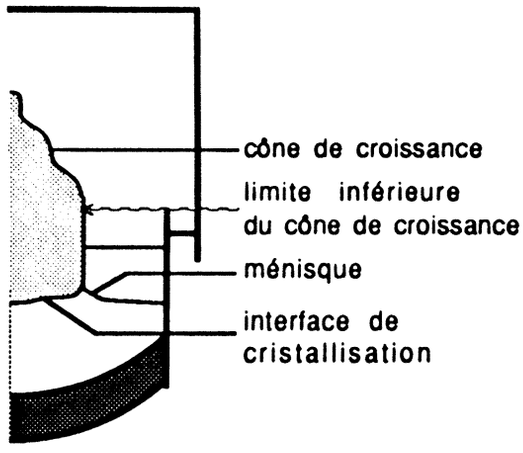


figure 4.1

Le calcul des facteurs de forme impose des restrictions quant au choix de la forme du cristal:

i) le corps du cristal est cylindrique et le cône de croissance est en dehors du creuset,

ii) au niveau du cône de croissance, le rayon du cristal est une fonction decroissante de la hauteur.

Ces limitations seront expliquées au paragraphe 2.1 consacré au calcul des facteurs de forme.

1.2 deroulement d'une session de calcul.

Une session de calcul se décompose suivant les trois étapes de la résolution d'un problème par la méthode des éléments finis:

1_création du maillage,
2_résolution numérique,
3_visualisation des résultats.

Ce logiciel ne fonctionne donc pas comme une "boite noire".

Nous pensons, en effet, que la possibilité de pouvoir effectuer ces trois étapes indépendemment permet une plus grande souplesse d'utilisation et une diminution du temps calcul.

Malgrè cela, l'utilisation du logiciel ne demande pas de savoir faire technique particulier.Il suffit a l'utilisateur d'ordonner au logiciel l 'éxecution des taches 1, 2 et 3 dans l'ordre qu'il convient.Une session de calcul se déroule donc comme suit:

1. creation du maillage:

i) constitution du jeu de données:

Il s'agit pour l'utilisateur de définir la géometrie des éléments du tirage constituant le domaine triangulé.Ce sont le creuset, son support, le cristal et l'encapsulant .(voir figure 4.3).
Les dimensions à fournir son indiquées au paragraphe 1.3.
Ces données sont saisies conversationnellement par l'interface de maillage et stockées sur un fichier texte.Ce fichier (MAIL.DON) est commenté et pourra être modifié ultérieurement par éditeur de texte.

ii) execution:

Il suffit à l' utilisateur d'ordonner au logiciel la création du maillage en désignant le fichier de données précédemment crée (MAIL.DON).Le résultat est un maillage du tirage et un maillage du cristal ,lorsque celui ci est simulé, sur fichiers (MAIL.TIR et MAIL.CRIS) .

iii) visualisation du maillage:

Cela permet de verifier la conformité de la géometrie avant de lancer le calcul de thermique.

2- *résolution numérique:*

i) création du jeux de données:

Le jeux de données a créer pour la résolution numérique complete le jeu de données pour le maillage et achève la description du tirage.

Il comprend:

_les caracteristiques géométriques du couvercle et d'autres parties du four qui participent aux échanges par rayonnement.

_les propriétés physiques -émissivités et conductivités- des matériaux du tirage.

_des données en températures:

le profil de température sur le creuset,les temperatures du couvercle et du gaz qu'il contient et la température de fusion du cristal.

Ces données sont saisies conversationnellement par l'interface de maillage et stockées sur un fichier texte. Ce fichier (TEMP.DON) est commenté et pourra être modifié ultérieurement par éditeur de texte.

ii) exécution:

L' utilisateur ordonne au logiciel la résolution numérique en désignant le fichier de données précédement crée (TEMP.DON) et le fichier contenant le maillage

En sortie il obtient deux fichiers. L'un (TEMP.NOEUD) contient les temperatures aux noeuds du maillage qui serviront au calcul des contraintes. L'autre (TEMP.ISO) est un fichier post-traitement pour la visualisation des isothermes.

3- *visualisation des isothermes*

Pour la visualisation l'utilisateur désigne le fichier des isothermes (TEMP.ISO) Il répond ensuite au questions du module conversationnel de tracé MODULEF de nom ISOVXX auquel le logiciel fait appel. Il choisit ainsi les caractéristiques du tracé suivant les possibilités offertes par ce module

1.3 Données à fournir par l'utilisateur.

1.3.1 Description du creuset, du cristal et de l'encapsulant

Le creuset est cylindrique avec un fond et un support en forme de calotte sphérique.

L'utilisateur définit d'abord ses dimensions,puis la profondeur du bain qu'il contient et la hauteur d'encapsulant (cette dernière pouvant être nulle):

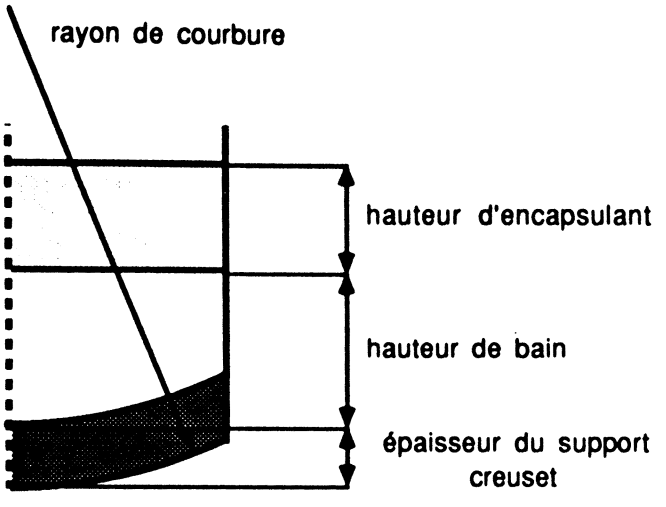


figure 4.2

La figure 4.2 représente donc une configuration représentable pour une simulation de la thermique du four.

Le cristal est défini en dernier. Il faut d'abord donner ses dimensions générales et sa position par rapport à la surface du bain.A ce stade, la géométrie peut être figée telle qu'elle apparaît sur la figure ci-après. Dans ce cas, les lignes **1**, **2**, et **3** sont rectilignes.

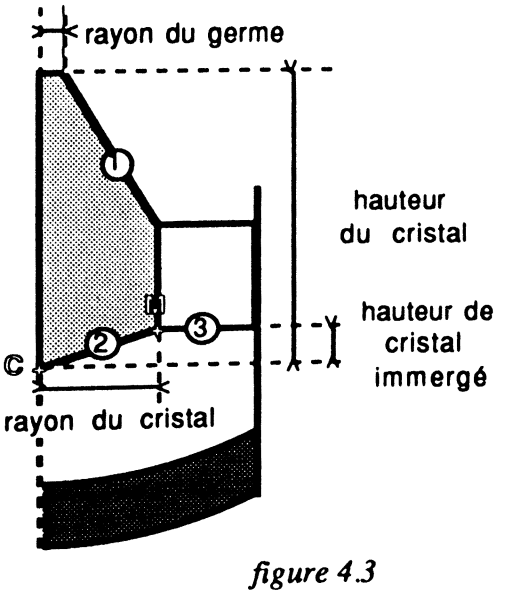


figure 4.3

L'utilisateur a aussi la possibilité de redéfinir ces lignes par la donnée de points dans des systèmes de coordonnées locaux appropriés.

1.3.2. Définition de l'épaule du cristal

Les points sont repérés par leur hauteur h par rapport au point C du cristal et leur distance r à l'axe de symétrie.L'utilisateur liste les points par hauteur h croissante : (h_1, r_1), (h_2, r_2), ..., (h_n, r_n) ... Le module de calcul des facteurs de forme impose une forme d'épaule monotone : sans "surplomb". L'utilisateur veillera donc à ce que sa suite de points vérifie :

$r_1 \geq .... \geq r_n \geq r_{n+1} \geq ...$

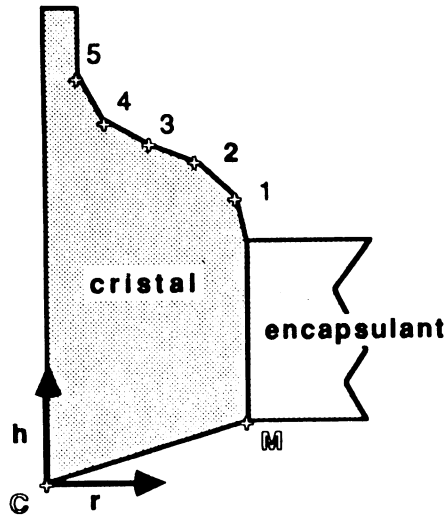


figure 4.4

1.3.3. Définition de l'interface de cristallisation

Les points sont repérés par leur distance r à l'axe de symétrie et leur profondeur p par rapport au point de mouillage M du cristal:

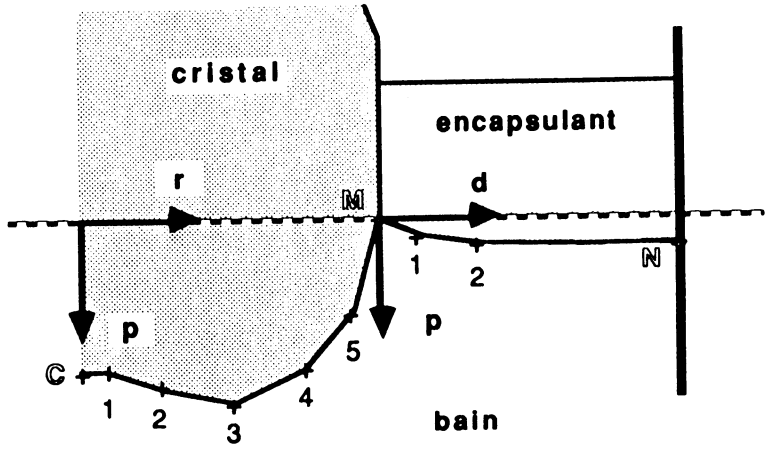


figure 4.5

1.3.4. Définition du ménisque

Il est possible de représenter un ménisque au contact du cristal C. L'utilisateur définit d'abord la profondeur p_N du point N (mouillage creuset) par rapport au point M (mouillage cristal). Les points intermédiaires sont définis ensuite par leur distance et leur profondeur p par rapport au point M. Le module de calcul des facteurs de forme impose ici aussi une pente monotone.(voir figure 4.5)

1.3.5. Description du couvercle. Positionnement du creuset.

L'utilisateur décrit les caractéristiques géométriques du couvercle - diamètre surface, ainsi que la hauteur et le positionnement du creuset (voir figure 4.6).

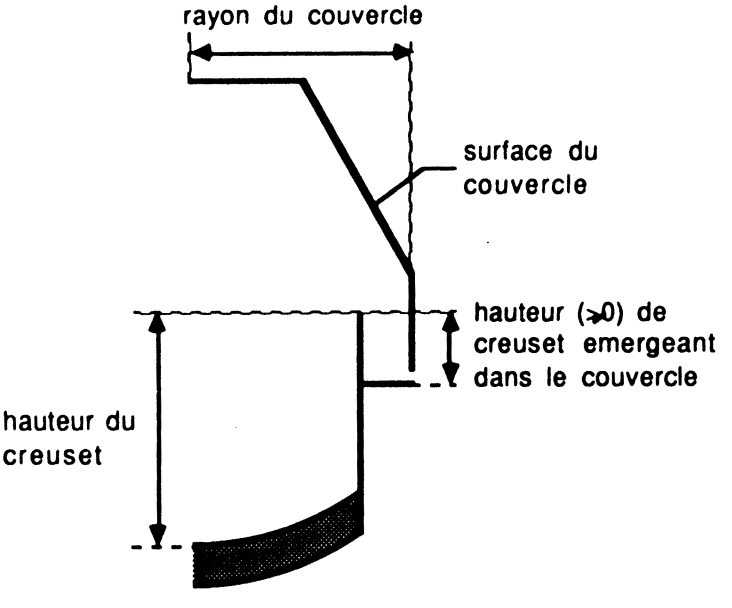


figure 4.6

1.3.6 Propriétés physiques des matériaux.

L'utilisateur définit les émissivités et les conductivités des différents éléments du tirage.

Pour cela, il peut choisir les valeurs prédéterminées du logiciel ou bien en imposer de nouvelles.

1.3.7 Températures

L'utilisateur précise les températures (uniformes) du couvercle, du gaz contenu dans le couvercle, de l'interface de fusion et un profil de température sur le creuset.

Ce profil est défini par la donnée de la température en des points sur le creuset choisis par l'utilisateur.

Les points situés sur la base du support creuset sont repérés par leur distance par rapport à l'axe du creuset, tandis que ceux situés sur la paroi verticale du creuset sont repérées par leur hauteur par rapport au fond du creuset (voir figure 4.7).
Une interpolation linéaire est pratiquée entre ces points.
Au point de raccordement la température est imposée par le profil à la base du creuset.

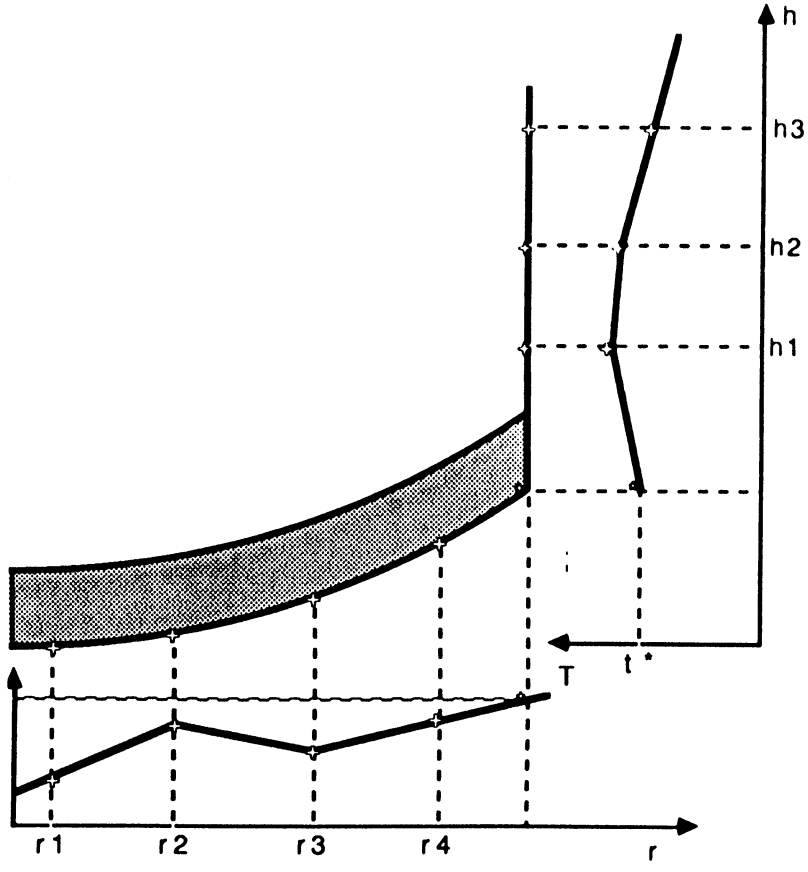


figure 4.7

2. INTERFACE UTILISATEUR POUR LE MAILLEUR.

Le maillage est la première étape de la résolution d'un problème par la méthode des éléments finis.
Nous avons choisi d'utiliser des éléments finis de type Q_1 (cf [18]). Nous devons décomposer le domaine d'étude thermique en quadrangles.
Des numéros de référence sont attribués aux différents éléments géométriques (éléments, arêtes, points) afin de localiser les données physiques du problème (matériau, flux, conditions aux limites bloquées, ...).

Nous avons donc construit un interface-utilisateur autour du mailleurge MODULEF-APNOPO. Il permet à l'utilisateur d'obtenir un maillage du tirage, par la donnée de quelques dimensions caractéristiques.(cf [16])

2.1 Technique de maillage

Le maillage d'un domaine complexe est obtenu par recollement du maillage de sous-domaines.

2.1.1 Définition d'un domaine simple en vue de son maillage

Un domaine simple est défini par son contour, composé de lignes joignant des points caractéristiques de sa frontière. Les points caractéristiques sont définis par leurs coordonnées.

Les lignes sont définies par leurs extrémités, sont droites ou courbes d'équation F(X, Y) donnée. En vue du maillage, la répartition des noeuds sur chaque ligne est fixée.

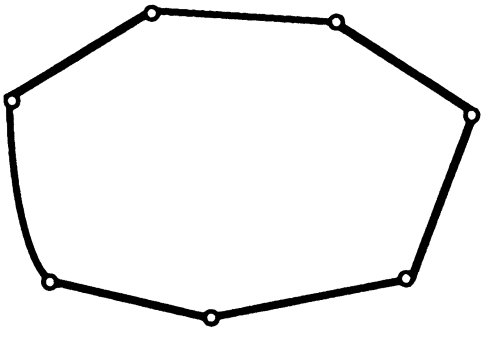


figure 4.8

Des numéros de référence sont attribués aux points caractéristiques et aux lignes. Ils détermineront le numéro de référence des sommets et cotés des éléments situés sur le contour.

2.1.2 Maillage d'un domaine simple

Le mailleur APNOPO de la bibliothèque MODULEF permet d'obtenir un maillage en quadrangle.

Le maillage d'un domaine simple, est obtenu par déformation du maillage d'un rectangle, dont le contour possède le même nombre de points.
Le maillage est stocké dans une structure de données NOPO.

2.1.3 Maillage d'un domaine complexe par recollement de maillage de sous-domaines simples - Application à notre cas

On doit chercher une décomposition en sous-domaines dont la géométrie se rapproche au mieux de rectangles et respectant la notion de matériau.

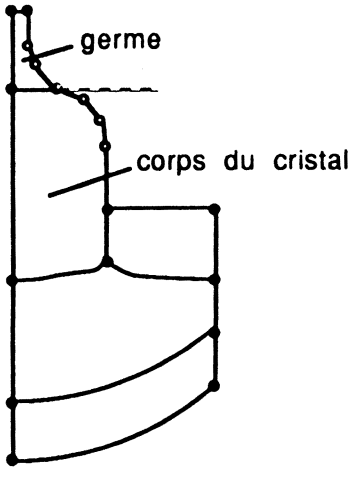


figure 4.9

En fait, chacun des milieux : support graphite, bain encapsulant, peuvent être maillés d'un seul tenant. Seul le cristal doit être maillé en deux parties, lorsque celui-ci présente un point d'inflexion sur son épaule.

En effet, dans ce cas, le maillage d'une seule pièce du cristal n'est pas satisfaisant, les quadrangles étant complètement écrasés au niveau du rétrécissement, ce qui nuit à la résolution numérique par éléments finis (cf [13]).

Le cristal est coupé à la base du germe. Le niveau de coupe est déterminé par le premier point d'inflexion détecté parmi les points de définition de l'épaule, en partant du haut.

2.2. Fonctionnement de l'interface

L'interface que nous avons réalisée permet d'obtenir un maillage en deux étapes :

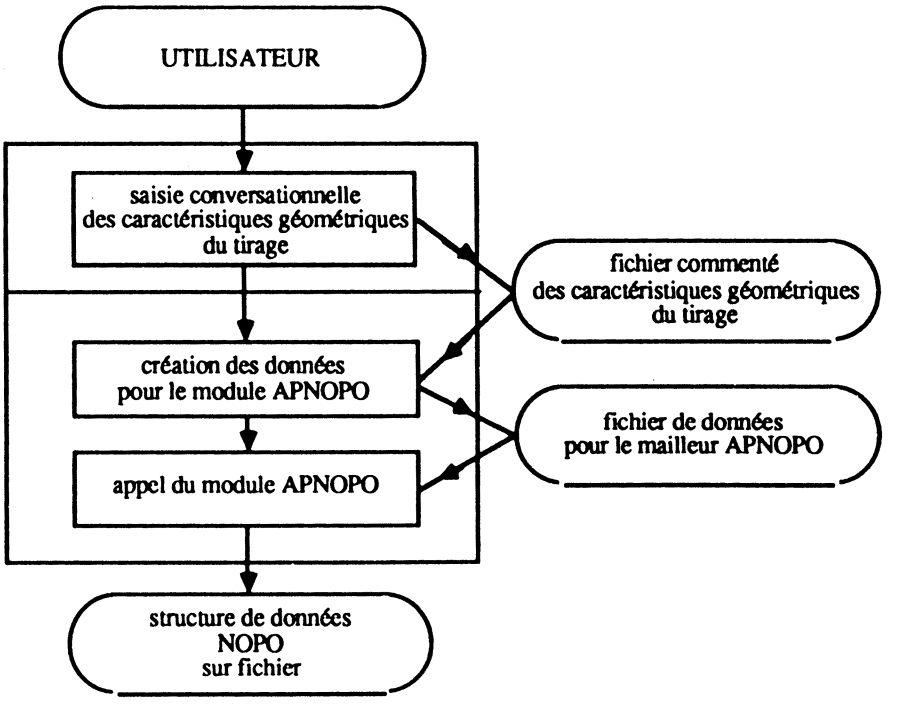
1. Remplir, de manière conversationnelle un fichier de caractéristiques du tirage.

   Ce fichier texte comporte des commentaires indiquant la signification des différentes valeurs numériques. En cas d'erreur, ces valeurs peuvent être corrigées par éditeur de texte.Nous appellerons ce fichier MAIL.DON.

2. Créer un maillage à partir du fichier MAIL.DON via le mailleur APNOPO. Le résultat est une structure de données NOPO stockée sur fichier.

Bien entendu, le fichier créé par l'utilisateur n'est pas directement utilisable par le mailleur NOPO.

Un fichier aux normes MODULEF doit être créé avant appel d'APNOPO. Il contient la description des points et lignes caractéristiques, contours des sous-domaines à mailler et recollements à effectuer selon la méthode décrite précédemment. Ce fichier est constitué automatiquement par programme.Nous appelerons ce fichier APNOPO.DON.



2.3 Programmation de l'interface

Nous avons apporté un soin particulier à sa programmation. Dans un premier temps, cela a facilité la mise au point du maillage à réaliser.

A l'avenir, l'ingénieur chargé de la maintenance du programme pourra aisément modifier et développer cette interface.

La tâche principale de cette interface est la génération du fichier APNOPO.DON à partir du fichier MAIL.DON des caractéristiques du tirage définies par l'utilisateur

Le fichier APNOPO.DON aux normes MODULEF doit contenir quatre listes descriptives qui sont dans l'ordre :

1. La liste des points caractéristiques du maillage.
2. La liste des lignes.
3. La liste des sous-domaines à mailler, définis par leurs contours.
4. La liste des recollements à effectuer

Nous avons programmé l'interface de la manière suivante :

- chaque liste est stockée dans un tableau FORTRAN
- pour remplir ces tableaux, nous avons créé des sous-programmes utilitaires spécifiques POINT, LIGN, QUAC et RECO.
- L'impression de ces listes sur le fichier Modulef est faite par le sous-programme IMPR.

-le programme principal consiste en une serie d'appels de ces sous programmes en fonction des informations stockées sur MAIL.DON.

Nous présentons maintenant le texte FORTRAN du programme principal Les instructions FORTRAN sont en caractères majuscules. Les commentaires sont en caractères minuscules.

```
*   lecture des données sur MAIL.DON
    CALL SAISIR

*   boucle sur les sous-domaines à mailler
|
|    *  boucle sur les points du sous-domaine
|    |      X =              coordonnées
|    |      Y =
|    |      NREF =           numéro de référence
|    |      CALL POINT
|
|    *  fin
|
|    *  boucle sur les lignes du sous-domaine
|    |
|    |      NREF =           numéro de référence
|    |      NOELIG =         nombre de noeuds sur la ligne
|    |      NFFRON =         indique si la ligne est droite ou défini par fonction
|    |      RAISON =         raison géométrique des noeuds sur la ligne
|    |      CALL LIGNE
|
|    *  fin
|
|    *  remplissage du tableau des sous-domaines
|
|         NDSD =             numéro de matériau
|         CALL QUAC
|
|    *  fin
|
|    *  remplissage du tableau des recollements
|
|         CALL RECO
|
|    *  écriture du fichier des données par APNOPO
|
|       CALL IMPR
```

remarque:

les sous-programmes POINT,LIGNE,QUAC et RECO ne possèdent pas d'arguments d'entrée-sortie.la transmission des données se fait par zones communes FORTRAN ou "COMMON".

Le programme définit les sous-domaines les uns après les autres en fonction des paramètres initialisés par le sous-programme SAISIR. La seule obligation pour le programmeur est de décrire les points puis les lignes dans le sens trigonométrique.

Avantages

- Outre la description sous-domaine après sous-domaine, le programmeur ne gère **aucun** numéro de points, lignes, sous-domaines.
- Le recollement et l'impression sont **automatiques**.
- L'adjonction ou la modification de sous-domaines est rendue possible sans modification d'ensemble de l'interface.

3 CALCUL DES FACTEURS DE FORME

3.1 Décomposition en facettes de la cavité de rayonnement Γ_{ray}.

Le calcul des échanges de chaleur par rayonnement repose sur une partition en facettes de géométrie simple de la cavité $\Gamma_{ray} = \Gamma^{c}_{ray} \cup \Gamma^{f}_{ray}$ (chap.II, para.1).
Les facettes étant axisymétriques, nous les confondons avec les segments qui les engendrent par rotation.
Les facettes de Γ^{c}_{ray} comprenant les surfaces rayonnantes du bain et du cristal sont issues du maillage.
Dans le découpage de Γ^{f}_{ray} est le suivant:

le bord interne du creuset,le bord externe du creuset,l'élement hoizontal en graphite et le couvercle constituent chacun une facette.

Le module de calcul des facteurs de forme, qui sera présenté ultérieurement est limité.
En conscéquence,t oute facette ,à l'exception du couvercle, est obligatoirement de l'un des quatre types geometriques suivants:

figure 4.10

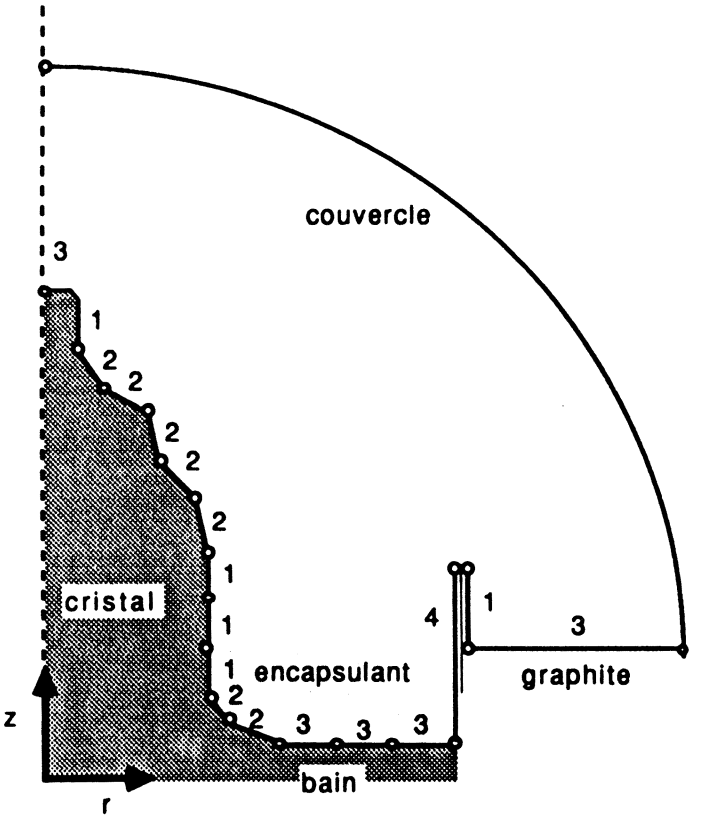
$\vec{n} = (n_r, n_z)$ désignant ici la normale unitaire à la facette dans le plan Orz.

type 1
cylindriques orientés extérieur
$n_r = 1$, $n_z = 0$

type 2 :
cônes tronqués
$0 < n_r < 1$, $0 < n_z < 1$

type 3 :
couronnes
$n_r = 0$, $n_z = 1$

type 4 :
cylindriques orientés intérieur
$n_r = -1$, $n_z = 0$



3.2. Calcul des facteurs de forme.

3.2.1 Le choix de la méthode

Deux méthodes sont envisageables pour le calcul des facteurs de forme :

- Calculer à la main les facteurs de forme pour chaque couple "type" de facettes (cylindre à couronne, cylindre à cylindre, etc ...).Les facteurs de forme s'écrivent alors comme des fonctions des dimensions et positions des facettes et peuvent être programmés.
- Procéder par intégration numérique.

Nous avons retenu la première méthode car c'est la plus rapide à mettre en oeuvre. En effet :

- De nombreux calculs de facteurs de forme sont disponibles dans la littérature.(cf [19],[20]).
- La mise au point de la seconde méthode est délicate et le résultat hasardeux, la confrontation avec la première est indispensable.

Bien évidement, la seconde aurait l'avantage d'être plus générale.

Notre travail a donc commencé par une recherche bibliographique, le plus grand nombre de facteurs de forme susceptible d'intéresser notre application a été réuni. Après tri, les limites du modèle ont été définies.

3.2.2. Utilisation des propriétés algébriques des facteurs de forme.

Comme nous l'avons indiqué dans l'introduction de ce chapitre ,nous avons exploité les propriétés algébriques des facteurs de formes
Nous allons illustrer sur deux exemples l'utilité de ces propriétés algébriques.

a. coéfficients d'échange avec le couvercle.

Le couvercle de température quasiment uniforme peut être considéré comme une seule et dernière facette venant fermer la cavité de rayonnement Γ_{ray}.
Les propriétés algébriques des facteurs de forme permettent d'eviter un calcul analytique des coefficients d'échange avec celui-ci.
Les facteurs de forme entre toutes les autres facettes, au nombre de N_T , sont d'abord calculés.
Les coefficients d'échange avec le couvercle restant les seuls inconnus, on les obtient alors facilement grâce au propriétés montrées au paragraphe 1.4 du chapitre II :

1. $F_{i,N_T+1} = 1 - \sum_{j=1}^{N_T} F_{i,j}$ pour $1 \leq i \leq N_T$

2. $F_{N_T+1,i} = \frac{A_i}{A_{N_T+1}} F_{i,N_T+1}$ pour $1 \leq i \leq N_T$

3. $F_{N_T+1 N_T+1} = 1 - \sum_{j=1}^{N_T} F_{N_T+1,j}$

A_i désigne l'aire de i^{eme} facette pour $1 \leq i \leq N_T + 1$

Remarque :

- Il n'est nécessaire de connaître du couvercle que sa surface A_{N_T+1}.
- Dans le cas d'une température, non uniforme du couvercle, celui-ci doit être découpé en facettes. Le calcul de facteurs de forme qui en résulte n'est alors pas faisable analytiquement.

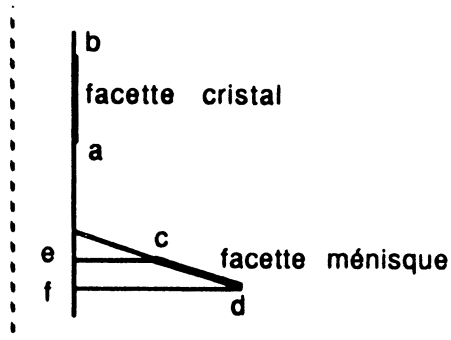
b. coefficients d'échange avec le ménisque et l'épaule.

Au départ notre formulaire permettait de prendre en compte des facettes de type 1, 3 ou 4 (couronnes et cylindres).
Pour simuler le ménisque et une forme réelle d'épaule,nous avons dû introduire des facettes de type 2 (cônes tronqués).
Grâce au propriétés algébriques ,la plupart des facteurs de forme supplémentaires ont pu être déduits de ceux déjà calculés.

Exemple/

$$F_{ab,cd} = F_{ab,ec} - F_{ab,fd}$$

$$F_{cd,ab} = \frac{A_{ab}}{A_{cd}} F_{ab,cd}$$



3.2.3. Limites de la géométrie du tirage.

la partie du cristal contenue par le creuset est cylindrique

Les facteurs de forme les plus difficiles à calculer sont ceux faisant intervenir le bord interieur du creuset.

Il faut en effet tenir compte du cristal qui fait obstacle aux échanges bain -creuset et creuset - creuset.
Le calcul analytique n'est possible que si le cristal est cylindrique dans sa partie contenue par le creuset.

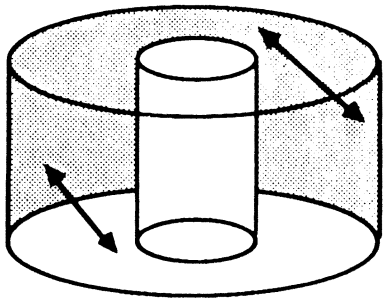


figure 4.11

remarque:

Dans le cas où cette condition n'est pas vérifiée,le code permet tout de même une simulation.
Dans le calcul des facteurs de forme on considère alors le cylindre de plus petit rayon contenant le cristal comme obstacle au échanges avec le creuset.
Nous pensons que cette approximation est raisonnable et influe peu sur le calcul de la thermique du cristal.

La croissance du cône est monotone

L'épaule du cristal ne peut être constituée que de facettes de types 1 et 2.
On ne peut donc pas représenter un rétrécissement du rayon du cristal dû à un à-coup de la régulation du tirage.

3.3. Realisation informatique.

3.3.1. Le tableau des facettes.

Les facettes sont de deux provenances :

- Les facettes issues du maillage:

Elle sont extraites de la structure de données NOPO. Les numéros de références permettent de déterminer les quadrangles appartenant au bain ou au cristal ,puis leurs côtés rayonnants s'ils en ont.

- Les facettes du four :

elles sont définies directement à partir des données geométriques fournies par l'utilisateur

Les caractéristiques géométrique et physique de chacune des facettes de Γ_{ray} sont stockées dans le tableau FAC en vue du calcul des facteurs de forme et de la matrice de gebhart.

Les données pour chaque facette Γ_{ray} sont:

-les numéros des extrémités lorsque celles-ci appartiennent au maillage .
Ils seront utiles pour l'assemblage de la matrice $[A_r^n]$ (voir le para 3.3 de ce chapitre)
-les coordonnées des extrémités.
-les composantes de la normale.
-le type de la facette : 1, 2, 3 ou 4.
-numéro de matériau pour déterminer l'émissivité de la facette.Il est égal au numéro de sous domaine pour les facettes issues du maillage.

Le tableau FAC est un tableau monodimensionnel,pour la gestion dynamique de la mémoire.
Il comprend l'un apres l'autre, les descriptifs tels que celui ci-dessus, des facettes de Γ_{ray}.
Le sous programme FACLIR permet de lire le descriptif d'une facette de numéro donné dans le tableau FAC.

3.3.2. Tests préliminaires au calcul des facteurs de forme

Le calcul des facteurs de forme se déroule en deux étapes:
1. calcul des facteurs de forme entre facettes du tableau FAC.
2 .calcul des facteurs de forme avec le couvercle.

Les tests préliminaires au calcul des facteurs de forme sont pratiqués lors de la phase1.

En effet,les facteurs de forme sont des coefficients d'échanges par rayonnement direct entre surfaces.

Pour chaque couple de facettes $\{S_i, S_j\}$, i.j ε $\{1, ..., N_T\}$ le programme doit vérifier d'abord que S_i et S_j sont effectivement en regard l'une de l'autre, soit :

1. S_i et S_j sont convenablement orientés.
2. Aucune facette S_k, n'est placée entre S_i et S_j interférant dans leur échanges directs.

S'il en est ainsi, les facteurs de forme $F_{i,j}$ et $F_{j,i}$ sont calculés à l'aide d'un formulaire dont la programmation est décrite ultérieurement.Sinon, $F_{i,j}$ et $F_{j,i}$ sont mis à zéro.

i) Test sur l'orientation des facettes

Deux facettes distinctes sont bien orientées l'une vers l'autre si chacune d'elle se trouve entièrement dans le demi plan visible par l'autre,voir la figure ci dessous :

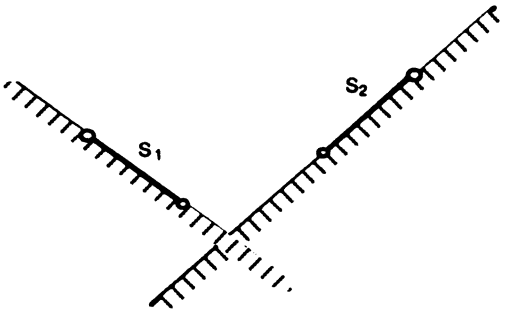


figure 4.12

et voit l'autre sous un angle suffisant.:

la tangente des angles θ_1 et θ_2 sont supérieures à $10.^{-2}$

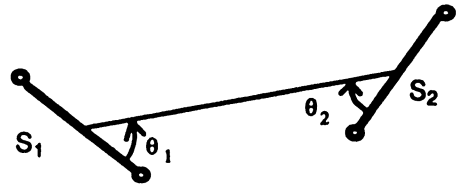


figure 4.13

Ce test est effectué par un sous-programme, dont le paramètre de sortie NRET indique le résultat.

* NRET = 0 : les deux facettes ne peuvent se voir, les deux facteurs de forme sont mis à zéro.

* NRET = 1 : les deux facettes sont bien orientées l'une vers l'autre, mais une troisième peut faire obstruction entre celles-ci. Le test numéro deux est nécessaire avant ce calcul des facteurs de forme.

* NRET = 2 : les facettes sont bien orientées, identiques ou se jouxtent le test numéro deux n'est pas nécessaire avant le calcul des facteurs de forme.

Une même facette ne peut se voir elle-même que si elle est tournée vers l'axe de symétrie, donc :

* NRET = 2 : pour la facette intérieure du creuset
* NRET = 0 : pour toutes les autres

ii). Test de détection d'un obstacle aux échanges par rayonnement direct entre deux facettes

Soient deux facettes S_1 et S_2. D'après les restrictions imposées sur la forme de Γ_{ray}, une autre facette S_3 est située soit dans les demis-plans verticaux π_1 ou π_2, soit dans la bande $B = (\pi_1 \cup \pi_2)^c$.

Alors S_3 ne peut faire obstruction que si elle est contenue dans la bande B et coupe la zone hachurée.On en déduit que S_3 fait obstacle entre S_1 et S_2, si et seulement si, S_3 n'est contenue par aucun des demi-plan π_1, π_2, π_3, ou π_4.

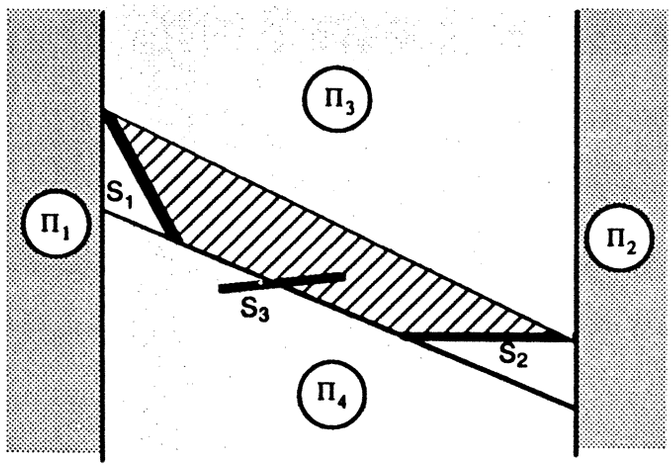


figure 4.14

3.3.3 Organisation du formulaire

Il y a quatre types différents de facettes. Il y a donc autant de configurations de calcul des facteurs de formes que de couples (I,J), $I \leq J$, $I \leq I,J \leq 4$.

Le tableau qui suit indique soit le nom du sous-programme, formule correspondant à chaque configuration, soit 0 lorsque les facteurs de forme sont a priori nuls et que le sous-programme n'a pas lieu d'exister.

J I	1	2	3	4
1	0	COEF12	COEF13	COEF14
2	COEF12	COEF22	COEF23	COEF24
3	COEF13	COEF23	0	COEF34
4	COEF14	COEF24	COEF34	COEF44

L'appel du sous-programme adéquat COEF** est réalisé par l'intermédiaire du sous-programme d'aiguillage de nom COEF, en fonction du type géométrique des deux facettes en présence.

4.2 Traitement de $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$

La matrice $[A_c^n]$ et le second membre $\{b_c^n\}$ sont construits à l'aide de MODULEF. La technique d'assemblage, propre à la méthode des éléments finis, est d'abord rappelée. La mise en oeuvre de MODULEF est ensuite précisée.

4.2.1 Calculs et assemblage méthode éléments finis de $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$

Nous reprenons les notations du paragraphe 2.5.1 chapitre III. Les éléments de V_h sont décomposés sur la base $\{\Phi_i\}_{i \in \mathcal{N}}$:

$$V_h = \sum_{i \in \mathcal{N}} v_h(N_i)\,\Phi_i = \sum_{i \in \mathcal{N}} v_i\,\Phi_i \qquad (N_i : \text{noeud de mesures } i)$$

nous noterons $\{v\}$ le vecteur colonne des coordonnées de V_h dans cette base. $[A_c^n]$ est la matrice d'une forme bilinéaire sur V_h :

$$\int_\Omega \lambda\, \nabla u_h\, \nabla v_h + \int_{\Gamma con} 1.25\ \alpha\, |T_h^n - T_{gaz}|^{0,25}\, u_h\, v_h = {}^t\{v\}\,[A_c^n]\,\{u\} \quad \forall\, u_h, v_h \in V_h$$

$\{b_c^n\}$ est la matrice unicolonne d'une forme linéaire sur V_h

$$\int_\Omega \alpha\, |T_h^n - T_{gaz}|^{0,25}\ (1,25 - T_h^n + T_{gaz})\ v_h = {}^t\{v\}\,\{b_c^n\} \quad \forall\, u_h, v_h \in V_h$$

Nous notons :

$$g^n = 1.25\ \alpha\, |T_h^n - T_{gaz}|^{0,25}$$
$$f^n = \alpha\, |T_h^n - T_{gaz}|^{0,25}\ (1,25 - T_h^n + T_{gaz})$$

g^n et f^n ne dépendent alors que de T_h^n .

Alors :

$$ {}^t\{v\}\,[A^n]\,\{u\} = \int_{\Omega} \lambda\, \nabla u_h\ \nabla v_h + \int_{\Gamma conv} g^n\, u_h\, v_h $$

$$ {}^t\{v\}\,\{b^n\} = \int_{\Gamma conv} f^n\, v_h $$

Notons

- T, tout élément de volume obtenu par rotation d'un quadrangle K de la quadragulation
- $n_1^T, n_2^T, n_3^T, n_4^T$, les numéros des sommets du quadrangle K associé à T.
- $\{u^T\} = \begin{bmatrix} v_{n_1^T} \\ v_{n_2^T} \\ v_{n_3^T} \\ v_{n_4^T} \end{bmatrix}$
- $[\Phi^T] = \left[\Phi_{n_1^T}, \Phi_{n_2^T}, \Phi_{n_3^T}, \Phi_{n_4^T}\right]$
- $[\nabla\Phi^T] = \left[\nabla\Phi_{n_1^T}, \nabla\Phi_{n_2^T}, \nabla\Phi_{n_3^T}, \nabla\Phi_{n_4^T}\right]$

Alors :

$$ {}^t\{v\}\,[A_c^n]\,\{u\} = \sum_T \int_T \lambda\, {}^t\{v^T\}\, {}^t[\nabla\Phi^T]\,[\nabla\Phi^T]\,\{u^T\} $$

$$ + \sum_T \int_{\delta T \cap \Gamma conv} g^n\, {}^t\{v^T\}\, {}^t[\Phi^T]\,[\Phi^T]\,\{u^T\} $$

$$ {}^t\{v\}\,\{b_c^n\} = \sum_T \int_{\delta T \cap \Gamma conv} g^n\, {}^t\{v^T\}\, {}^t[\Phi^T] $$

4. CALCUL DE LA MATRICE DE RAIDEUR.

4.1. Itérations et préparation des itérations

Avant de rentrer dans le détail de l'assemblage de la matrice de raideur,nous traçons le plan de la résolution numérique exécutéee par le code.

Elle se déroule en deux phases:

1) la préparation des itérations, où est fait ce qui peut l'être une fois pour toute.
2) les itérations , où est fait uniquement ce qui varie à chaque itération.

La **préparation des itérations** comporte :

- le calcul de [G] matrice des coefficients d'échanges par rayonnement.
- la préparation du stockage et du calcul de:
  $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$ matrice et second membre de diffusion convection,
  $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$ matrice et second membre de rayonnement,
  $[A^n]$ et $\{b^n\}$ matrice et second membre totaux.
- la préparation de la prise en compte des conditions aux limites bloquées sur $[A^n]$.et $\{b^n\}$
- la construction de $\{u^0\}$ pour l'initialisation des itérations

chaque **itération** comprend

- la construction du système lineaire:
  - calculs successifs de $[A_c^n]$ et $\{b_c^n\}$
    $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$
    $[A^n]$ et $\{b^n\}$
  - la prise en compte des conditions aux limites bloquées sur $[A^n]$ et $\{b^n\}$ qui deviennent $[\tilde{A}^n]$ et $\{\tilde{b}^n\}$
- la résolution du système linéaire:
  calcul de $\{T^{n+1}\}$ solution de $[\tilde{A}^n]\{T^{n+1}\} = \{\tilde{b}^n\}$
- l'évaluation de l'écart $|\{T^{n+1}\} - \{T^n\}|$ pour l'arrêt des itérations.

Notons $[B_T]$ la matrice booléenne permettant d'extraire de l'ensemble des degrés de liberté ceux de l'élément :

$$\{u^T\} = [B_T]\,\{u\}$$

$$[A_T] = \int_T \lambda\ {}^t[\nabla\Phi^T]\,[\nabla\Phi^T] + \int_{\delta T \cap \Gamma conv} g^n\ {}^t[\Phi^T]\,[\Phi^T]$$

$$\{b_T\} = \int_{\delta T \cap \Gamma conv} g^n\ {}^t[\Phi^T]$$

Alors :

$$[A_c^n] = \sum_T {}^t[B_T]\,[M_T]\,[B_T] \qquad (1)$$

$$\{b_c^n\} = \sum_T {}^t[B_T]\,\{b_T\} \qquad (2)$$

$[A_T]$ et $\{b_T\}$ sont appelés respectivement matrice et second membre élémentaire associés à l'élément T.
Ces tableaux élémentaires étant calculés pour chaque élément T, $[A_c^n]$ et $\{b\}$ sont assemblés : sommation (1) et (2).

4.2.2 Mise en oeuvre de MODULEF

a. Phase de préparation

Choix de l'élément fini et prise en compte de l'interpolation

Le choix d'un type d'élément fini de la bibliothèque thermique de MODULEF se fait en fonction du type d'interpolation désiré et de la formulation variationnelle du problème à résoudre.
Pour chaque type d'élément fini, cette bibliothèque contient des sous-programmes spécifiques de calcul des tableaux élémentaires.

L'élément "QUAD AQ1C", permet de traiter un problème axisymétrique avec interpolation de Lagrange - Q_1 .

Ces sous-programmes associés calculent des tableaux élémentaires de la forme :

$$[K_T] = \int_T \lambda \; {}^t[\nabla\Phi^T]\,[\nabla\Phi^T] + \int_{\delta T \cap \Gamma conv} g^n \; {}^t[\Phi^T]\,[\Phi^T]$$

$$\{b_T\} = \int_{\delta T \cap \Gamma conv} f \; {}^t[\Phi^T]$$

avec :

- λ constant dans l'élément T
- f et g sont donnés en deux points d'intégration numérique sur chaque facette de $\delta T \cap \Gamma$.

Le maillage qui ne contient que des éléments géométriques est stocké dans une structure de donnée NOPO.

La prise en compte de l'interpolation est alors réalisée par appel du module COMACO en précisant le nom de l'élément fini choisi.On obtient alors deux structures de données :

- une SD.MAIL contenant une description du maillage et de l'interpolation,
- une SD.COOR contenant les coordonnées des points nécessaires à la définition de la géométrie de l'élément.

Préparation du calcul des tableaux élémentaires

Deux structures de données sont construites, afin de préciser la provenance de λ, g et f lors du calcul des tableaux élémentaires.

La SD.MILI indique que :

1. La conductivité thermique sera trouvée pour chacun des numéros de sous-domaine 1, 2, 3 et 4 dans un tableau associé à la SD.MILI.
2. Le coefficient g sera calculé par le sous-programme MILIEV pour les facettes dont le numéro de référence indique un échange avec le gaz ambiant en fonction de $\{T_h^n\}$ stocké dans une SD.B (stockage vecteur).

La SD.FORC indique que :
Les valeurs de f aux points d'intégrations seront calculées par le sous-programme FORCE pour les facettes dont le numéro de référence indique un échange avec le gaz ambiant en fonction de $\{T_h^n\}$. Les SD.MILI et ses tableaux associés, ainsi que la SD.FORC sont créés à l'aide des modules COMILI et COFORC et de cartes données.

Nous avons programmé les s.p. MILIEV et FORCE suivant les normes imposées par MODULEF.

Création des pointeurs de la matrice

La matrice $[A_c^n]$ est du type élément fini et son profil ne variera pas au cours des itérations.
Elle est donc stockée dans une structure de donnée AMAT symétrique (voir paragraphe 4.3.3) dont les premiers tableaux ou "pointeurs" seront calculés avant les itérations.Le module PREPGC permet de créer la structure de donnée AMAT qui contiendra $[A_c^n]$, à partir de la SD.NOPO.

b. Phase de calcul

Calcul des tableaux élémentaires

Les tableaux élémentaires sont recalculés à chaque itération et stockés sur fichier séquentiel (SD Tableaux Associés aux Eléments) par le MODULE THELAS. C'est un module important qui doit gérer les données de structures MAIL, COOR, FORC, MILI, et appeler les sous-programmes, MILIEV, FORCE et sous-programmes de calcul des tableaux élémentaires.

Assemblage de la matrice et du second membre

- La matrice $[A_c^n]$ est assemblée à partir des matrices élémentaires stockées dans la structure de données TAE et stockée dans la structure de données AMAT par le module ASMAGC.
- Le second membre $\{b_c^n\}$ est assemblé de même, et stocké dans une structure de données B par le module ASBMC.

4.3 Traitement de $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$

4.3.1 Décomposition de $[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$ en vue de l'assemblage

$[A_r^n]$ et $\{b_r^n\}$ sont des termes non standard dont le traitement n'est pas réalisable à l'aide de MODULEF. Les éléments v_h de V_h se décomposent dans la base $\{\Phi_i\}_{i\in\mathcal{N}}$

$$v_h = \sum_{i\in\mathcal{N}} v_h(N_i) = \sum_{i\in\mathcal{N}} v_i\,\Phi_i$$

Les éléments w_h de $W_h(\Gamma^c_{ray})$ se décomposent dans la base $\{X_k\}_{k\in\mathcal{F}^c_{ray}}$

On a :

$$[A_r^n]_{ij} = \int_{\Gamma^c_{ray}} \sigma\,\mathcal{G}_h\,[4\,p_h(T_h^n)^3\,p_h(\Phi_j)]\,\Phi_i\,d\Gamma$$

$$\{b_r^n\} = \int_{\Gamma^c_{ray}} \sigma\,\mathcal{G}_h\,[3\,p_h(T_h^n)^3\,p_h(T_h^n)]\,\Phi_i\,d\Gamma - \int_{\Gamma^c_{ray}} \sigma\,\mathcal{G}_h^c\,[(T_h^f)^4]\,\Phi_i\,d\Gamma$$

Notons $e_1(k)$ et $e_2(k)$ les numéros des noeuds à l'extrémité de la facette de numéro k, et

$$\delta_{p,q} = \begin{cases} 1 & \text{si } p = q \\ 0 & \text{si } p \neq q \end{cases}$$

on a :

$$p_h(\Phi_j) = \sum_{\substack{k\in\mathcal{F}^c_{ray} \\ m=1,2}} \frac{1}{2}\,\delta_{e_m(k),j}\,X_k$$

$$[p_h(T_h^n)]^3 = \sum_{k\in\mathcal{F}^c_{ray}} \left(\frac{T^n_{e_1(k)} + T^n_{e_2(k)}}{2}\right)^3 X_k$$

$$\mathcal{G}_h^c\,[w_h] = \sum_{k,l\in\mathcal{F}^c_{ray}} G_{lk}\,w_k\,X_l$$

Alors :

$$[A_r^n]_{ij} = \sum_{\substack{k,l \in \mathcal{F}_{ray}^c \\ m=1,2}} \left(\int_{\Gamma_{ray}^c} \Phi_i X_l \right) G_{lk}\, 4 \left(\frac{T_{e_1(k)}^n + T_{e_2(k)}^n}{2} \right)^3 \frac{1}{2} (\delta_{e_m(k),j})$$

soit

$$[A_r^n]_{ij} = \sum_{\substack{k,l \in \mathcal{F}_{ray}^c \\ q,m=1,2}} \delta_{i,e_q(l)} \left(\int_{S_l} \Phi_{e_q(l)} X_l \right) G_{lk} \left(\frac{T_{e_1(k)}^n + T_{e_2(k)}^n}{2} \right)^3 \frac{1}{2} (\delta_{e_m(k),j})$$

assemblage — tableaux pleins — assemblage

Notons :

$$\{b_r^o\}_i = \int_{\Gamma_{ray}^c} \Phi_i \, \sigma \, \mathcal{G}_h^f \, [\, (T_h^f)^4 \,] \, d\Gamma$$

alors :

$$\{b_r^o\}_i = \sum_{\substack{k \in \mathcal{F}_{ray}^f \\ l \in \mathcal{F}_{ray}^c \\ m=1,2}} \delta_{i,e_m(l)} \left(\int_{S_l} \Phi_{e_m(l)} X_l \right) G_{lk} \, [\, (T_k^f)^4 \,]$$

et

$$\{b_r^n\} = \frac{3}{4} [A_r^n] \{T_h^n\} - \{b_r^o\}$$

4.3.2 L'assemblage de la matrice $[A_r^n]$

Pour assembler la matrice $[A_r^n]$ nous construisons d'abord lors de **la phase de preparation** des itérations les tableaux suivants:

i) tableau de correspondance noeuds → facettes

Le tableaux des facettes nous donne la correspondance facettes → noeuds.Pour l'assemblage ,il nous faut aussi la relation inverse : noeuds → facettes.
Nous dressons donc le tableau COR(NOE ,2 ,2) suivant

COR (I,1,1) = $n_1(I) \in \{1, \ldots, ND\}$, numéro de la premiere facette de Γ^c_{ray} ayant pour extémité le noeud I
COR (I,1,2) = $p_1(I) \in \{1, 2\}$position sur la premiere facette
COR (I,2,1) = $n_2(I) \in \in \{1, \ldots, ND\}$numéro de la deuxieme facette de Γ^c_{ray} ayant pour extémité le noeud I
COR (I,2,2) = $p_2(I) \in \{1, 2\}$ position sur la deuxieme facette

Les coefficients ci dessus sont nuls lorsque la facette correspondante de Γ^c_{ray} n'existe pas.

ii) tableau plein

On construit le tableau plein RAD(ND, 2, ND) :

$$RAD(i,m,j) = \frac{1}{2}\left(\int_{S_i} \Phi_{e_m(i)} X_i\right) G_{i,j}$$

avec : $i,j \in \{1, \ldots, ND\}$,numéro de facette de Γ^c_{ray}
$m \in \{1, 2\}$,position du noeud de numéro i

Les facettes étant toutes orientées de telle manière que $r_{e_1(i)} \leq r_{e_2(i)}$ on obtient :

$$\left(\int_S \Phi_{e_1(i)} X \, d\Gamma\right) = 2\pi \frac{1}{d}\left(\frac{1}{3} r_{e_1} + \frac{1}{6} r_{e_2}\right)$$

$$\left(\int_S \Phi_{e_2(i)} X \, d\Gamma\right) = 2\pi \frac{1}{d}\left(\frac{1}{6} r_{e_1} + \frac{1}{3} r_{e_2}\right)$$

avec $d = \sqrt{\left(r_{e_2} - r_e\right)^2 + \left(z_{e_2} - z_e\right)^2}$

Puis **lors des itérations** on calcul successivement

i) Le tableau D^n (ND) ,diagonale

$$D^n(j) = \left(\frac{u^n_{e_1(j)} + u^n_{e_2(j)}}{2}\right)$$

avec : $j \in \{1, \ldots, ND\}$,numéro de facette de Γ^c_{ray}

ii)la matrice $[A_r^n]$

Pour chaque coeffficient $[A_r^n]_{ij}$ on a la boucle de calcul:

$[A_r^n]_{ij} = 0$
de k = 1 à 2 faire :
  si $n_k(i) \neq 0$ faire:
    de q = 1 à 2 faire :
      si $n_q(j) \neq 0$ faire:
        $[A_r^n]_{ij} = [A_r^n]_{ij} + RAD(n_k(i),p_k(i),n_q(j)) * D^n(n_q(j))$
      fin du si
    fin sur q
  fin du si
fin sur k

4.3.3. Stockage "économique" de la matrice $[A_r^n]$

Quel que soit le rang d'itération n, le profil de la matrice $[A_r^n]$ reste le même. Seuls les coefficients $[A_r^n]_{i,j}$, tels que N_i, $N_j \in \Gamma_{ray}$ sont a priori non nuls.Prenons un exemple :

	1	2	3	4	5	6
1						
2		A_{22}			A_{25}	A_{26}
3						
4						
5		A_{52}			A_{55}	A_{56}
6		A_{62}			A_{65}	A_{66}

Ici, NOE = 6, seuls les noeuds N_2, N_5, N_6 appartiennent à Γ_{ray}

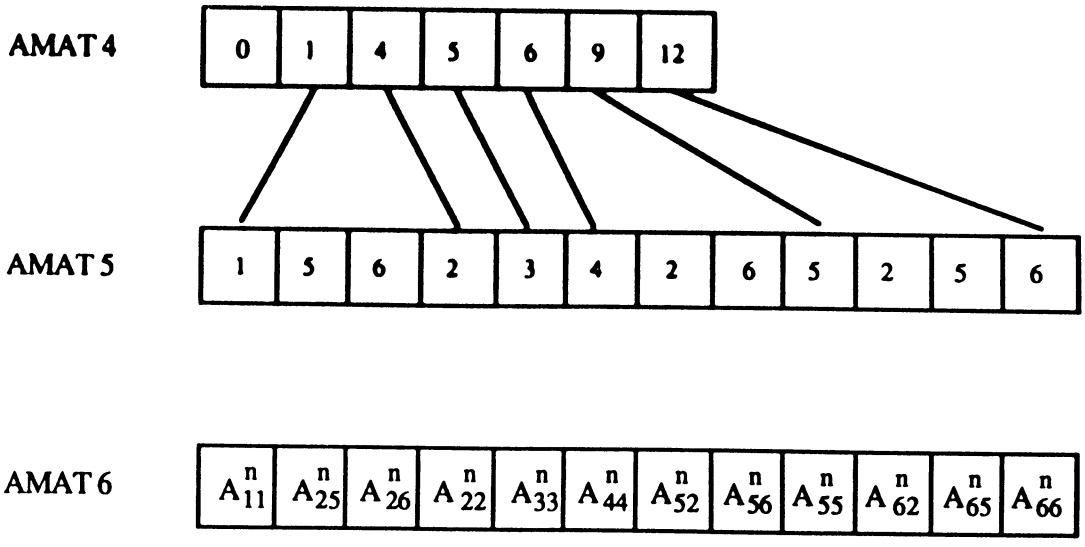
La matrice $[A_r^n]$ est creuse, mais les termes nons nuls ne sont pas regroupés autour de la diagonale. Le profil de la matrice est symétrique, mais les valeurs des coefficients ne le sont pas.

Le stockage de la matrice $[A_r^n]$ sous la forme morse, mise en oeuvre dans MODULEF par la structure de donnée AMAT convient parfaitement.

Les coefficients non nuls ou diagonaux de la matrice sont rangés séquentiellement et ligne par ligne dans un tableau monodimensionnel AMAT6 (pour chaque ligne le coefficient diagonal est placé en dernier), tandis que les numéros de colonnes correspondants sont rangés parallèlement dans le tableau AMAT5.

Le pointeur AMAT4 donne enfin pour chaque ligne l'adresse dans AMAT5 et AMAT6 du couple i, A_{ii}.

1	2	3	4	5	6
1					
	4			2	3
		5			
			6		
	7			9	8
	10			11	12



4.3.4. Assemblage rapide de $\left[A_r^n\right]$ à chaque itération

A chaque itération les coefficients $[A_r^n]_{i,j}$ du tableau AMAT6 sont recalculés. Il est alors nécessaire de connaître les numéros de facettes et positions associés aux noeuds. Afin que ceux-ci soient immédiatement disponibles, on les stocke dans un tableau AD1 lors de la création de AMAT4 et AMAT5.

tableau AMAT6

A_{i_1,j_1}		$A_{i,j}$		A_{i_N,j_N}

$n_1(i_1)$		$n_1(i)$		$n_1(i_N)$
$p_1(i_1)$		$p_1(i)$		$p_1(i_N)$
$n_2(i_1)$		$n_2(i)$		$n_2(i_N)$
$p_2(i_1)$		$p_2(i)$		$p_2(i_N)$
$n_1(j_1)$		$n_1(j)$		$n_1(j_N)$
$n_2(j_1)$		$n_2(j)$		$n_2(j_N)$

tableau de numéros associé AD1

4.3.5 Calcul et assemblage du second membre $\{b_r^n\}$

$$\{b_r^n\} = 3\,[A_r^n]\,\{u_h^n\} - \{b_r^f\}$$

La contribution du four $\{b_r^f\}$

La contribution du four $\{b_r^f\}$ intervient au second membre du système linéaire à résoudre à chaque itération . Elle est constante et calculée avec les itérations :

$$b_i = \sum_{\substack{h\in\{1,\dots,ND\}\\ k\in\{1,\dots,NF+1\}\\ m\in\{1,2\}}} (\delta_{i,e_m(h)} \left(\int_{S_h} \Phi_{e_m(h)} X_h\right) G_{h,k+ND}\ T_k^4$$

pour $i \in \{1, \dots, NOE\} = \mathcal{N}$

Assemblage de $\{b_r^f\}$

L'assemblage de $\{b_r^f\}$ est similaire à celui de $[A_r^n]$. On construit d'abord le tableau RF(ND, NF+1) :

$$RADF(i,m_j) = \frac{1}{2}\left(\int_{S_i} \Phi_{c_m(i)} X_i\right) G_{ij+ND}$$

avec : $i \in \{1, \ldots, ND\}$,numéro de facette de Γ_{ray}^c

$j \in \{1, \ldots, NF+1\}$,numéro de facette de Γ_{ray}^f

$m \in \{1, 2\}$,position du noeud de numéro i

De même pour chaque coeffficient $\{b_r^f\}_i$ on a la boucle de calcul:

```
{b_r^f}_i = 0
de k = 1 à 2 faire :
    | si n_k(i)≠ 0 faire:
    |     | de j = 1 à NF+1 faire :
    |     |     |
    |     |     |     {b_r^f}_i = {b_r^f}_i + RADF(n_k(i),p_k(i),j) * T_j^4
    |     | fin sur j
    | fin du si
fin sur k
```

$\{b_r^f\}$ est alors stocké dans une structure de données B à l'aide de COSDB.

Calcul de $\{b_r^n\}$

$$\{b_r^n\} = \frac{3}{4}[A_r^n]\{T_h^n\} - \{b_r^o\}$$

Le produit de la matrice $[A_r^n]$ (stockée dans une SD AMAT) par le vecteur $\{T_h^n\}$ (SD.B) est calculé et stocké dans une SD.B. La SD.B contenant $\{b_r^n\}$ est obtenue par combinaison linéaire de 2 SD.B par le module SDB2MC.

4.4 Traitement de $[A^n]$ et $[b^n]$

A chaque itération il faut calculer la somme:

$$[A^n] = [A_c^n] + [A_r^n]$$

Les matrices $[A_c^n]$ et $[A_r^n]$ sont toutes deux préalablement stockées dans des structures de données AMAT, l'une de type symétrique et l'autre de type non symétrique.

Le code MODULEF ne permettant de réaliser que des combinaisons linéaires de structures AMAT de même type, nous avons dû programmer cette opération.

4.4.1. Construction des pointeurs de la matrice-somme avant les itérations

Bien évidemment la matrice $[A^n]$ doit être stockée dans une structure de données AMAT. Les profils des matrices $[A_c^n]$ et $[A_r^n]$ ne varient pas au cours des itérations, il en est de même du profil de $[A^n]$. Les pointeurs AMAT4 et AMAT5 de $[A^n]$ sont donc construits avant les itérations.

Nous noterons :

$$A_S = [A_c^n] \quad , \quad A_{NS} = [A_r^n] \quad , \quad A = [A^n]$$

Avant-tout, il faut savoir retrouver les coefficients A_S (I, J) et A_{NS} (I, J) dans les structures de données $AMAT_S$ et $AMAT_{NS}$.

Pour I = J

Dans la structure de données AMAT les coefficients diagonaux sont tous stockés et retrouvés directement grâce au tableau AMAT4

$$A_{NS}(I, I) = AMAT6_{NS}\left(AMAT4_{NS}(I+1)\right)$$
$$A_S(I, I) = AMAT6_S\left(AMAT4_S(I+1)\right)$$

Pour I ≠ J

Retrouver un coefficient non diagonal dans une structure de données AMAT est moins immédiat.

Dans le cas non symétrique, par exemple, les indices des tableaux AMAT5 et AMAT6 concernant le stockage de la ligne I varient entre :

I_1 = AMAT4(I) + 1
I_2 = AMAT4 (I+1)

Le coefficient A (I, J) est stocké si et seulement si

AMAT 5(L) = J pour $I_1 \leq L \leq I_2$
alors AMAT 6 (L) = A (I, J)

Dans le cas symétrique, il faut d'abord permuter I et J pour avoir I < J.

Nous avons donc écrit un sous-programme de recherche des coefficients non-diagonaux pour chaque cas:

LIRESY ($AMAT4_S$, $AMAT\ 5_S$, I, J, AD_S)
LIREAS ($AMAT4_{NS}$, $AMAT\ 5_{NS}$, I, J, AD_{NS})

Le paramètre de sortie AD_S valant :

* zero lorsque le coefficient A_{NS}(I, J) n'est pas stocké dans le tableau $AMAT6_{NS}$
*l'adresse du coefficient A_{NS}(I, J) dans le tableau $AMAT6_{NS}$ lorsque celui-ci est stocké.

(idem dans le cas non symétrique)

Le coefficient A(I, J) n'est stocké que si l'un des coefficients A_S (I, J) ou A_{NS}(I, J) l'est. Dans ce cas les adresses A_S (I, J) dans $AMAT6_S$ et de A_{NS}(I, J) dans $AMAT6_{NS}$ obtenues lors de leur recherche doivent être conservées en vue du calcul effectif de A(I,J).

On construit donc deux tableaux d'adresse ADRSY et ADRNS parallèlement au tableau AMAT5.

La construction des pointeurs AMAT4 et AMAT5 se programme donc formellement :

```
N = 0
AMAT4(1) = 0

pour  i = 1, 2, ..., NOE  faire
|
|     pour   j = 1, 2, ..., i-1, i+1, ..., NOE  faire
|     |
|     |      appel de LIRESY (AMAT4S, AMAT5S, I, J, ADS)
|     |      appel de LIRESAS (AMAT4NS, AMAT5NS, I, J, ADNS)
|     |
|     |      si (ADS ≠ 0 ou ADNS ≠ 0)  faire
|     |      |
|     |      |      N = N+1
|     |      |      AMAT5(N) = J, ADRS(N) = ADS, ADRNS(N) = ADNS
|     |
|     |      fin du si
|
|     fin pour j
|
|     N = N+1
|     AMAT4(I) = N,          AMAT5(N) = I
|     ADRS(N) = AMAT4S(I),  ADRNS(N) = AMAT4NS(I)

fin pour i
```

4.4.2 Assemblage rapide de $[A^n]$ à chaque itération

Les tableaux $AMAT6^n_S$ et $AMAT6^n_{NS}$ ayant été remplis les N coefficients du tableau $AMAT6^n$ sont obtenus simplement :

$$
\begin{aligned}
AMAT6(I) \quad &= 0 \\
&+ AMAT\,6^n_S(ADRSY(I)) \qquad (\text{si } ADR_S(I) \neq 0) \\
&+ 4AMAT\,6^n_{NS}(ADRNS(I)) \qquad (\text{si } ADR_{NS}(I) \neq 0)
\end{aligned}
$$

pour $1 \leq I \leq N$.

CHAPITRE V

CALCUL DES CONTRAINTES THERMOÉLASTIQUES

INTRODUCTION 117

1. LES ÉQUATIONS DE LA THERMOÉLASTICITE 118

2. FORMULATION VARIATIONNELLE EN DÉPLACEMENTS 119

3. EVALUATION DES CONTRAINTES 124

3.1. Rappel : contraintes normales et tangentielles 124

3.2. Formation de dislocations sous l'action de contraintes. 124

3.3. Calcul du cisaillement maximum (critère de Tresca) 125

3.4. Calcul des facteurs de Schmid 126

4. RÉSOLUTION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS 127

4.1. Maillage 3D du cristal 127

4.2. Choix des éléments finis 128

4.3. Espace d'approximation et problème variationnel approché 128

4.4. Résolution du système linéaire 129

5. MISE EN OEUVRE INFORMATIQUE 130

5.1. Présentation du logiciel 130

5.2. Génération d'un maillage 3D par rotation d'un maillage 2D 131

5.2.1. La structure de données NOPO 131

5.2.2. Génération du maillage 3D 132

INTRODUCTION

En cours de tirage, la température du cristal n'est pas uniforme. Égale à la température de fusion à l'interface de solidification, elle est minimum au sommet du cristal, et varie dans un rapport important.

Ce fort gradient thermique, provoque des contractions non uniformes, c'est la source de contraintes thermoélastiques. Il en résulte la création de défauts du réseau cristallin qui doit accommoder ces contraintes : les dislocations. Un gradient thermique trop important peut même provoquer la rupture du cristal.

Au refroidissement, les différences de dilatations disparaissent mais les dislocations subsistent. Ceci explique la présence de contraintes résiduelles dans le cristal à température basse et uniforme après tirage.

Ces contraintes résiduelles posent des problèmes de qualité. Les cristaux tirés sous fort gradient thermique peuvent être très fragiles à la découpe. En outre, et c'est un inconvénient majeur, la formation des dislocations altère les qualités optroniques du matériau (cf[21]).

Un des objectifs de la modélisation présentée dans ce travail est donc de visualiser ces contraintes thermoélastiques et de mettre en évidence leur corrélation avec la thermique du four.

1. LES ÉQUATIONS DE LA THERMOÉLASTICITE

Le cristal a un comportement élastique homogène, mais non isotrope. Dans ce cas, bien que la forme du cristal et la répartition de température soient axisymétriques, les équations doivent être posées dans R^3.

Le poids du cristal et la pression à la surface de celui-ci, minimes en comparaison des contraintes thermo-élastiques, sont négligés.

Considérons le cristal occupant un domaine $\Omega < R^3$ à température uniforme de référence T_0. T_0 est prise égale à la température de fusion et nous supposerons qu'à cette température le cristal est non contraint. Cette hypothèse sera justifiée ultérieurement.

Au cours du tirage, le cristal est refroidi à une température $T \leq T_0$, ce qui entraîne une contraction par rapport à l'état de référence.

Notons le déplacement en chaque point $x \in \Omega$:

$$\vec{u}(x) = \begin{vmatrix} u_1(x) \\ u_2(x) \\ u_3(x) \end{vmatrix} \quad x = (x_1, x_2, x_3)$$

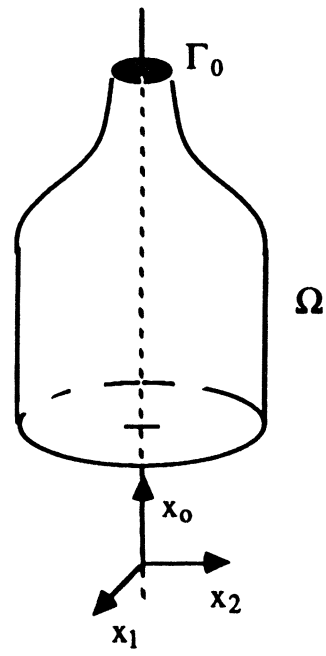


Figure 5.1

Le tenseur symétrique des déformations est (cf [22]):

$$\varepsilon_{ij}(u) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j\right) \qquad i, j = 1,2,3 \qquad (1)$$

le tenseur sphérique des dilatations :

$$\overset{T}{\varepsilon}_{ij} = \alpha\,(T - To)\,\delta_{ij} \qquad i, j = 1,2,3 \qquad (2)$$

avec

$$\delta_{ij} = \begin{vmatrix} 1 \text{ si} & i = j \\ 0 \text{ si} & i \neq j \end{vmatrix} \qquad i, j = 1,2,3$$

Le tenseur symétrique des contraintes s'obtient linéairement en fonction de la différence de ces deux tenseurs (cf [22]):

$$\sigma_{ij}(\vec{u}) = \sum_{k,h=1}^{3} E_{ijkh}\left(\varepsilon_{kh}(\vec{u}) - \varepsilon_{kh}^{T}\right) \quad i, j = 1,2,3 \qquad (3)$$

où E_{ijkh} est le tenseur de l'élasticité vérifiant

$$E_{ijkh} = E_{jikh} = E_{ijhk} \qquad 1 \leq i, j, k\ h \leq 3$$

Le déplacement $\vec{u}$ est imposé sur le germe

$$\vec{u} = \vec{u}_0 \qquad \text{sur } \Gamma_0 \qquad (4)$$

et vérifie les équations d'équilibre

$$\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\vec{u}) = 0 \qquad i = 1,2,3 \text{ dans } \Omega \qquad (5)$$

$$\sum_{j=1}^{3} \sigma_{ij}(\vec{u})\, n_j = 0 \qquad i = 1,2,3 \text{ sur } \Gamma_1 = \partial\Omega - \Gamma_0 \qquad (6)$$

$\vec{n}$ est la normale unitaire dirigée vers l'extérieurde Ω, de composantes n_j , $j = 1,2,3$.

les équations (1) - (6) définissent donc notre problème de thermo-élasticité.

2. FORMULATION VARIATIONNELLE EN DÉPLACEMENTS.

On calcule le déplacement $\vec{u}$. Les contraintes sont obtenues ensuite avec (3).

Notons :

$$V = \left\{\vec{u} = (u_1, u_2, u_3) \ / \ u_i \in H^1(\Omega) \quad i = 1,2,3\right\}$$
$$V_0 = \left\{\vec{v} \in V \ / \ v_i = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \quad i = 1,2,3\right\}$$

On munit V et V_0 de la norme $\quad \|\vec{v}\|_V = \left(\sum_{i=1}^{3} \|v_i\|^2_{H^1(\Omega)}\right)^{1/2}$

Si $\vec{u}$ est solution classique de (1) - (6) on a :

$$\sum_{i=1}^{3} \int_{\Omega} \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\vec{u})\, v_i \, d\Omega = 0 \quad \forall \vec{v} \in V_o \tag{7}$$

En utilisant la formule de Green et la condition aux limites (6), nous avons

$$\sum_{i,j=1}^{3} \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\vec{u}) \frac{\partial}{\partial x_j} v_i \, d\Omega = 0 \qquad \forall \vec{v} \in V_o \tag{8}$$

et avec la propriété de symétrie de σ, nous obtenons

$$\sum_{i,j=1}^{3} \int_{\Omega} \sigma_{ij}(\vec{u})\ \varepsilon_{ij}(\vec{v}) = 0 \tag{9}$$

En utilisant (2) et (3) on obtient la formulation variationnelle du problème de thermo-élasticité

(P)

trouver $\vec{u} \in V$ tel que $\vec{u} = \vec{u}_o$ sur Γ_o,

$$\sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_{\Omega} E_{ijkh}\, \varepsilon_{kh}(\vec{u})\ \varepsilon_{ij}(\vec{v})\ d\Omega =$$

$$\sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_{\Omega} E_{ijkh}\, \alpha\, \delta_{kh}\, (T-T_o)\, \varepsilon_{ij}(\vec{v})\ d\Omega \qquad \forall \vec{v} \in V_o$$

2.1 Proposition (cf [23])

Ω est un ouvert borné de R^3 de frontière assez régulière et mes $(\Gamma_0) > 0$. Alors pour tout $\vec{u}_0 \in H^{1/2}(\Gamma_0)$ et $T \in L^2(\Omega)$, le problème (P) possède une solution unique dans V.

Démonstration

posons

$$a(\vec{u},\vec{v}) = \sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_{\Omega} E_{ijkh}\, \varepsilon_{kh}(\vec{u})\ \varepsilon_{ij}(\vec{v})\ d\Omega$$

$$l(\vec{v}) = \sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_{\Omega} E_{ijkh}\, \alpha\, \delta_{kh}\, (T-T_0)\ \varepsilon_{ij}(\vec{v})\ d\Omega$$

L'existence et l'unicité d'une solution pour (P) résultent du théorème de Lax Milgram.
On montre facilement que la forme bilinéaire symétrique a et la forme linéaire l sont continues.
Il reste à établir la coercitivité de a. Elle se déduit des inégalités suivantes : (cf [23]).

1) Ellipticité de E

$\exists\, c_0 > 0$, tel que :

$$\forall \{e_{ij}\} \in R^6,\ \sum_{kh=1}^{3} E_{ijkh}\, e_{ij}\, e_{kh} \geq c_0 \sum_{i,j=1}^{3} e_{ij}^2 \qquad (10)$$

mes $(\Gamma_0) > 0$ et Ω borné, il existe deux constantes $c_1 > 0$, $c_2 > 0$, telles que :

2) Inégalité de Korn

$$\sum_{i,j=1}^{3} \| \varepsilon_{ij}(\vec{v}) \|^2_{L^2(\Omega)} \geq c_1 \sum_{i,j=1}^{3} \| \frac{\partial}{\partial x_j} v_i \|_{L^2(\Omega)} \quad \forall\, \vec{v} \in V_0 \qquad (11)$$

3) Inégalité de Poincaré

$$\sum_{i,j=1}^{3} \| \frac{\partial}{\partial x_j} v_i \|^2_{L^2(\Omega)} \geq c_2 \sum_{i=1}^{3} \| v_i \|^2_{H^1(\Omega)} \quad \forall\, \vec{v} \in V_0 \qquad (12)$$

Nous allons maintenant donner les conditions nécessaires et suffisantes sur le déplacement imposé $\vec{u}_o$ et la répartition de température T pour avoir l'annulation des contraintes.Pour cela nous utiliserons le théorème suivant:

Théorème

Soit ε_{ij} un tenseur symétrique d'ordre 2 défini sur un domaine Ω simplement connexe.
ε_{ij} est un tenseur de déformation d'un déplacement $\vec{u}$, si et seulement si, ε_{ij} vérifie les équations de comptabilités :

$$\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_e} \varepsilon_{ik} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} \varepsilon_{ej} + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_e} \varepsilon_{kj} + \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_k} \varepsilon_{ie} = 0 \qquad \text{sur } \Omega \qquad i,j,k,e = 1,2,3$$

Le déplacement u est alors défini à un déplacement rigide près.

Pour la démonstration de ce théorème, on peut consulter [22].

2.2 Proposition

Les contraintes sont nulles sur Ω si et seulement si

1)T est une fonction affine de $x = (x_1, x_2, x_3)$
2)Le déplacement imposé $\vec{u}_o$, permet la libre contraction du cristal.

Démonstration

1) Etablissons les conditions nécessaires.

Soit T une répartition de température et $\vec{u}_o$ un déplacement imposé sur Γ_o.
Supposons qu'il existe un déplacement $\vec{u} \in V$, tel que:

$$\left| \begin{array}{lll} \vec{u} = \vec{u}_o & \text{sur } \Gamma_o & \\ \sigma_{ij}(\vec{u}) = 0 & \text{sur } \overline{\Omega} & i,j = 1, 2, 3 \end{array} \right.$$

Le tenseur d'élasticité étant inversible, ceci est équivalent à

$$\left| \begin{array}{lll} \vec{u} = \vec{u}_0 & \text{sur } \Gamma_0 & \\ \varepsilon_{ij}(\vec{u}) = \varepsilon_{ij}^T & \text{sur } \overline{\Omega} & i,j = 1, 2, 3 \end{array} \right.$$

c'est-à-dire : le tenseur de déformation de $\vec{u}$ est égale au tenseur de dilatation de T.

En vertu du théorème ci-après, ceci est possible si et seulement si :

i) ε_{ij}^T vérifie les équations de compatibilité, ce qui se traduit par :

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} T = 0 \qquad \text{sur } \Omega \qquad i,j = 1,2,3$$

et donc T est affine sur Ω.

ii) $\vec{u}_0$ est compatible avec ε_{ij}^T : $\vec{u}_0$ se déduit de ε_{ij}^T à un déplacement rigide près (*).

2) Réciproquement si $(T, \vec{u}_0)$ satisfont les conditions i) et ii), il existe $\vec{u}$,tel que :

$$\left| \begin{array}{lll} \vec{u} = \vec{u}_0 & \text{sur } \Gamma_0 & \\ \varepsilon_{ij}(\vec{u}) = \varepsilon_{ij}^T & \text{sur } \overline{\Omega} & i,j = 1, 2, 3 \end{array} \right.$$

Alors ceci implique que :

i) $\vec{u}$ est solution de (P)

ii) $\sigma_{ij}(\vec{u}) = 0 \qquad \text{sur } \overline{\Omega} \qquad i,j = 1, 2, 3$

Remarques

Le profil de température idéal en cours de tirage à l'intérieur du cristal est donc un profil affine décroissant linéairement, en fonction de x_3. Ceci impose que l'interface de solidification qui est aussi l'isotherme de fusion soit plan.

(*) Il n'est pas possible de définir à priori un déplacement imposé compatible avec les contractions ou dilatations thermoélastiques, car cela voudrait dire qu'elles sont connues par avance

Dans le cas du cristal, nous devons choisir un déplacement imposé, contrariant le moins possible la contraction afin qu'il ne soit pas la source de contraintes. Nous avons choisit sur Γ_0 le déplacement imposé suivant :

- au point central de Γ_0, nous imposons un déplacement nul : $u_1 = u_2 = u_3 = 0$
- ailleurs sur Γ_0, nous interdisons seulement le déplacement vertical : $u_3 = 0$

Les résultats de simulation montrent que ce choix est satisfaisant.

3. EVALUATION DES CONTRAINTES

3.1 Rappel : contraintes normales et tangentielles

Soit dV un élément de volume du domaine Ω et dS l'une de ces faces centrée en x.

Dans une base orthonormée $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ les efforts intérieurs à Ω portés sur dS s'écrivent :

$$\vec{T}(x, \vec{n}) \cdot dS = \sum_{i,j=1}^{3} \vec{e}_i \, \sigma_{ij} \, n_j \, dS$$

où $\vec{n}$ est la normale unitaire à dV de composantes n_1, n_2, n_3 (cf [22]).

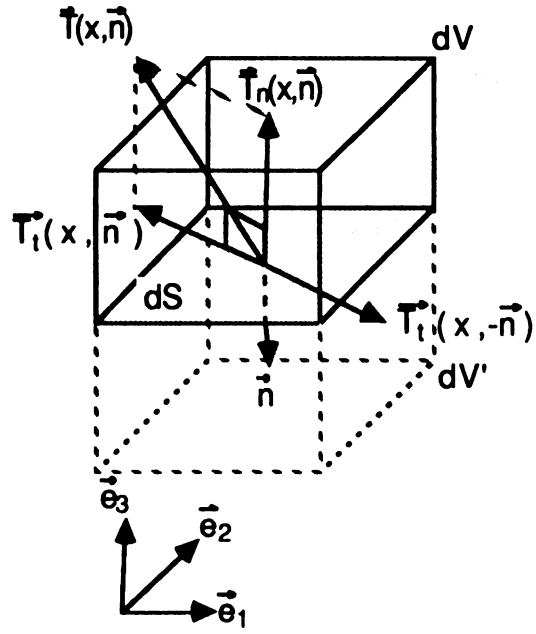


Figure 5.2

La contrainte $\vec{T}(x, \vec{n})$ peut se décomposer en $\vec{T}_n(x, \vec{n})$ et $\vec{T}_t(x, \vec{n})$ contraintes normale et tangentielle à dS.

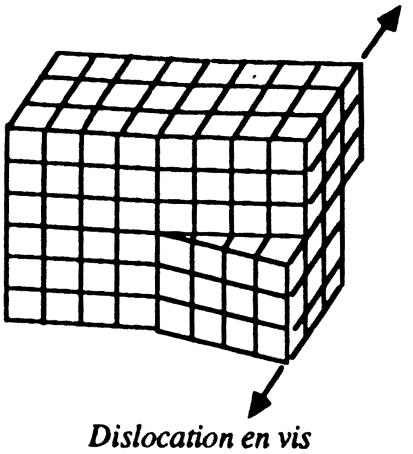
$\vec{T}_n(x, \vec{n})$ est appelée contrainte de compression ou de traction suivant son sens.

$T_t(x, \vec{n})$ est appelée contrainte de cisaillement. En effet, la contrainte tangentielle en x porté sur dV' symétrique de dV par rapport à dS est $\vec{T}_t(x, -\vec{n}) = -\vec{T}_t(x, \vec{n})$.

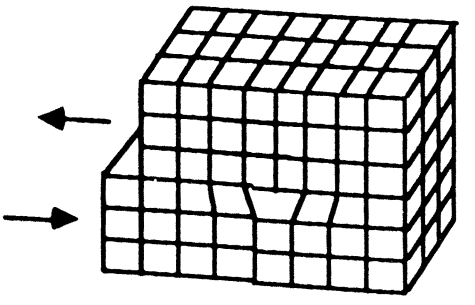
$T_t(x, \vec{n})$ et $T_t(x, -\vec{n})$ tendent donc à faire glisser dV sur dV' dans des directions opposées.

3.2 Formation de dislocations sous l'action de contraintes

Le cristal est un empilement régulier d'atomes. Mais, sous l'action de fortes contraintes, on observe le glissement d'atomes de part et d'autres de plans, dit plans de glissements.La régularité de la structure cristalline est perturbée : c'est la formation des dislocations (cf [9] et [24]).



Dislocation en vis
Figure 5.3



Dislocation en coin
Figure 5.4

Ce sont donc les efforts de cisaillement plutôt que ceux de traction ou de compression qui produisent les dislocations.

Il est donc utile de calculer le **module de cisaillement maximum** en chaque point, afin de localiser le risque de formation de dislocation.

D'autre part, dans tout cristal, les glissements ne sont possibles que suivant des plans et des directions déterminés par la structure cristalline. En particulier, les plans de glissement d'un cristal d'AsGa sont parallèles à l'une des faces du tétraèdre ci-contre.
Les directions de glissement permises sont définies par les arêtes de la face correspondante.

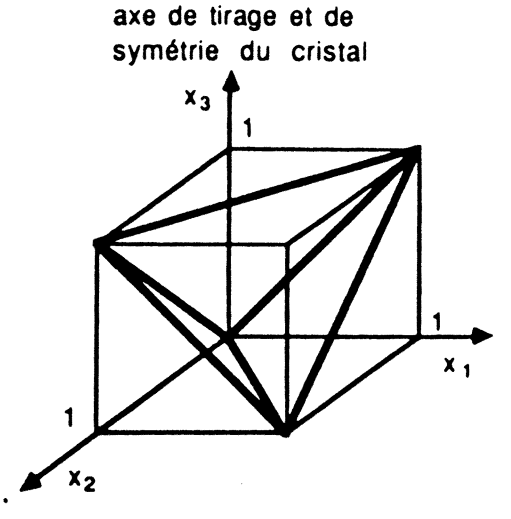


Figure 5.5

C'est le calcul des **facteurs de Schmid,** qui permet alors de déterminer, en tout point du cristal, quels sont le plan et la direction de glissement les plus probables (On pourra consulter [24] pour plus de détails).

3.3 Calcul du cisaillement maximum (critère de Tresca)

Le module de cisaillement en un point $x \in \Omega$ est par définition

$$\tau = \sup_{\|\vec{n}\| = 1} \|\vec{T}_t(x, \vec{n})\|$$

où $\| \ \|$ est la norme euclidienne.

On démontre (dans [22]) que τ est fonction des valeurs propres σ_1, σ_2, σ_3 du tenseur des contraintes σ_{ij} en x :

$$\tau = \frac{1}{2} \max_{i,j \in \{1,2,3\}} |\sigma_i - \sigma_j|$$

σ_1, σ_2, σ_3 sont aussi appelées contraintes normales principales.

Un tracé d'isovaleurs de τ sur des coupes du cristal permet de visualiser les zones de fort cisaillement.

3.4. Calcul des facteurs de Schmid

Notons pour chacune des quatres ($1 \leq i \leq 4$) faces du tétrahèdre , :

$\vec{n}_i$, la normale unitaire à la face i.

$\vec{d}_{ij}$, les trois vecteurs unitaires ($1 \leq j \leq 3$) orientés suivant les arêtes de la face i

en tout $x \in \Omega$, les 12 facteurs de Schmid sont :

$$C_{ij} = \frac{1}{\max\{|\sigma_1|,|\sigma_2|,|\sigma_3|\}} \vec{d}_{ij} \cdot \vec{T}(x, \vec{n}_i) \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq 4 \\ 1 \leq j \leq 4 \end{array}$$

On remarquera que les facteurs de Schmid sont normés par la contrainte maximale

max { σ_1, σ_2, σ_3 }.Ils varient donc entre - 1 et + 1, en effet :.

$$|C_{ij}| \leq \|\vec{d}_{ij}\| \frac{\|\vec{T}(x, \vec{n})\|}{\max\{|\sigma_1|,|\sigma_2|,|\sigma_3|\}} \leq 1$$

Une comparaison de tracés d'isovaleurs des douze facteurs de Schmid permet de déterminer les plans et les directions de glissement les plus probables.

remarque

Pour obtenir le cisaillement maximum et les facteurs de Schmid, il faut calculer dans l'ordre :

i) le tenseur des contraintes σ_{ij} ,

ii) les valeurs propre σ_1, σ_2, σ_3,

iii) le critère de Tresca τ,

iv) les douze facteurs de Schmid.

4. RÉSOLUTION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

Le calcul des contraintes thermoélastiques est standard. Nous présentons brièvement sa résolution par la méthode des éléments finis.

Pour chaque étape de cette résolution, le logiciel fait appel aux modules de la bibliothèque MODULEF, à l'exception du maillage.

Nous rappelons que le cristal est **anisotrope**. Le calcul est fait en trois dimensions. Un maillage 3D du cristal est obtenu par rotation du maillage 2D. Les températures aux noeuds du maillage 3D s'obtiennent alors naturellement par rotation des températures aux noeuds du maillage 2D.

Nous avons écrit le module effectuant la rotation du maillage car cette possibilité n'était pas offerte par la bibliothèque MODULEF.

Le fonctionnement de ce module ainsi que les tableaux de correspondance entre numéros des noeuds des maillages 2D et 3D permettent la rotation de températures sont décrits au paragraphe 5.2.

4.1 Maillage 3D du cristal

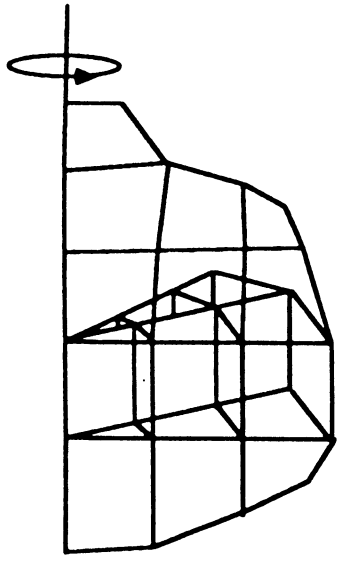


figure 5.7

Le maillage 3D du cristal est obtenu par rotation du maillage 2D en quadrangle de son profil. Les quadrangles ayant un côté sur l'axe engendrant des pentaèdres, les autres des hexaèdres.

Nous noterons :

$T \in \mathcal{T}_2$ les éléments du maillage

$\mathcal{N}_i$, $i \in \mathcal{N}$ les noeuds du maillage.

4.2 Choix des éléments finis

Les deux éléments thermoélastiques 3D de la bibliothèque MODULEF sont utilisés. Ce sont des éléments isoparamétriques de Lagrange (cf [18]), caractérisés par les transformations :

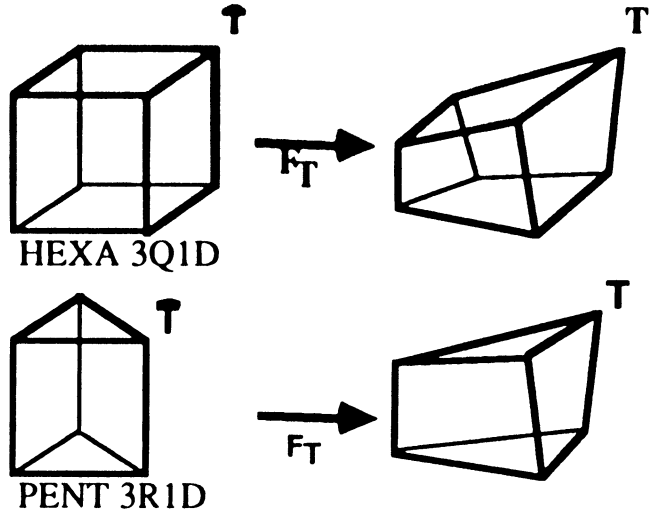


figure 5.8

Sur chacun de ces deux éléments on a une interpolation (Q_1 et R_1) de Lagrange :

- des déplacements u_1, u_2, u_3,
- de la différence de température $(\theta - \theta_0)$.

Les degrés de liberté de ces deux éléments sont donc les valeurs des trois composantes des déplacement aux sommets. La température doit être donnée en chacun des sommets.
Les contraintes sont calculées au barycentre de l'élément, en fonction des valeurs des déplacements aux sommets de celui-ci, après résolution du problème en déplacements.

4.3 Espace d'approximation et problème variationnel approché

On construit de façon classique l'espace d'approximation, en utilisant les fonctions de base sur l'élément de référence :

$$V_h = \left\{ v_h \in \mathcal{C}^0(\overline{\Omega}) \ / \ v_h / T \circ F_T \in Q_1, \ \forall \ T \in \mathcal{T}_h \right\} < H^1(\Omega)$$

étant donné :

- $\vec{u}_h^o$ trace d'un élément de $(V_h)^3$ sur Γ_o
- $\theta_h - \theta_o \in V_h$

Le problème variation approché est :

trouver $\vec{u}_h \in (V_h)^3$ tel que :

$\vec{u}_h = \vec{u}_h^o$ sur Γ_o

$$\sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_S E_{ijkl}\, \varepsilon_{kh}(\vec{u}_h)\, \varepsilon_{ij}(\vec{v}_h)\, d\Omega$$

$$= \sum_{i,j,k,h=1}^{3} \int_S E_{ijkl}\ \alpha\ \delta_{kh}(\theta_h - \theta_o)\ \varepsilon_{ij}(v_h)\, d\Omega$$

$\forall\ \vec{v}_h \in (V_h)^3$ avec $\vec{v}_h = \vec{0}$ sur Γ_o

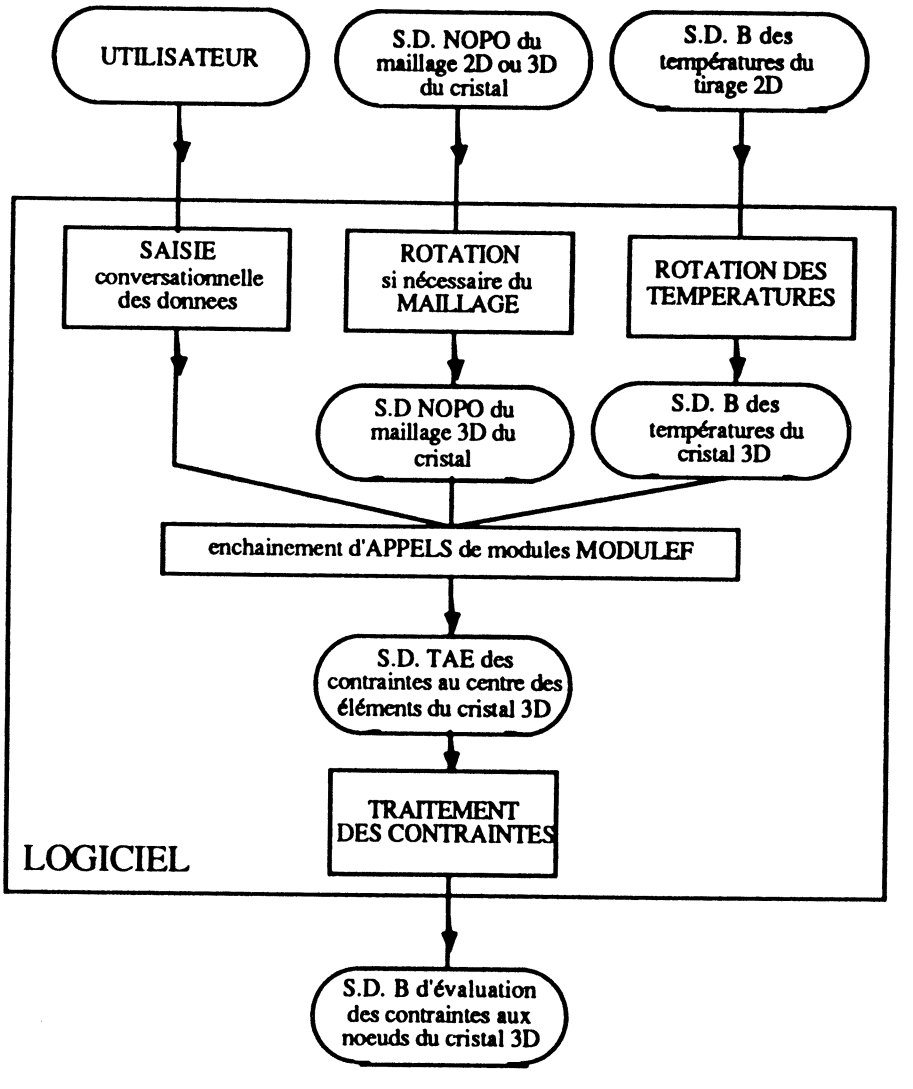
4.4 Résolution du système linéaire

Les valeurs des déplacements aux noeuds du maillage sont la solution d'un système linéaire à matrice symétrique et la résolution se fait par gradient conjugué.

5. MISE EN OEUVRE INFORMATIQUE.

5.1 Présentation du logiciel.

Ce problème de thermoélasticité pour l'AsGa est un problème classique qui peut être traité entièrement par enchaînement de modules de la bibliothèque MODULEF à l'exception du traitement des structures de données d'entrée et de sortie spécifique à notre application.
Le logiciel de calcul des contraintes est organisé suivant le schéma suivant :



en particulier nous avons réalisé 3 modules pour :

- la génération du maillage 3D du cristal par rotation de son maillage 2D,
- la construction de températures aux noeuds du maillage 3D du cristal,
- le traitement et la redistribution des contraintes aux noeuds(afin de pouvoir utiliser le tracer d'isovaleurs MODULEF).

5.2 Génération d'un maillage 3D par rotation d'un maillage 2D

Il existe un module de la bibliothèque MODULEF générant un maillage 3D par rotation d'un maillage 2D.

Cependant, son domaine d'utilisation est restreint. Le maillage 2D doit être du type rectangulaire et ne posséder aucun point commun avec l'axe de rotation.

Ce n'est évidemment pas le cas du maillage 2D du cristal. Nous avons donc décrit un module réalisant cette opération dans le cadre de notre application. Il utilise en entrée et en sortie la structure de données MODULEF de stockage d'un maillage.

Nous présentons d'abord l'organisation de cette structure de données puis le fonctionnement du module.

5.2.1 La structure de données NOPO

Un structure de données MODULEF est un ensemble de tableaux. Ces tableaux sont monodimensionnels pour permettre la simulation de gestion dynamique de la mémoire pratiquée dans MODULEF.

La structure de données NOPO est spécialisée pour le stockage d'un maillage. Elle comprend essentiellement deux tableaux :

- le tableau NOP4 des coordonnées des noeuds du maillage : les coordonnées sont rangées noeud par noeud, dans l'ordre de la numérotation des noeuds (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, etc...),

- le tableau NOP5 des éléments. Il contient l'un après l'autre les descriptifs des éléments du maillage. Soit pour chacun d'eux :

- le code de la géométrie de l'élément,
  ex : 4 : quadrilatère, 6 : pentaèdre, 7 : hexaèdre,
- le numéro de sous-domaine,
- la liste des numéros des sommets,
- la liste des numéros de références comprenant :

  * le numéro de référence de l'élément indiquant le domaine auquel il appartient ,
  * puis les numéros de référence des faces, des arêtes et des sommets indiquant les conditions aux limites.

L'ordre de rangement des noeuds de chaque type d'élément est fixé comme l'indique la figure 5.8. Le 1er sommet est quelconque:

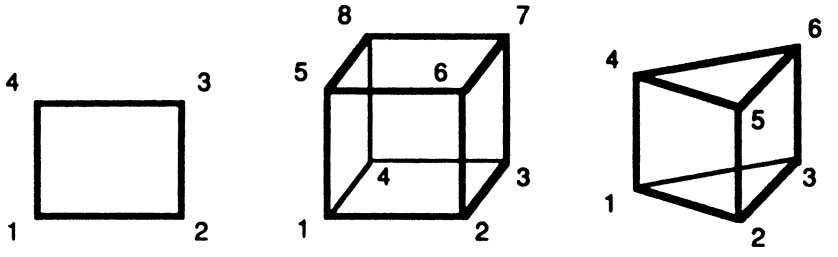


Figure 5.8

5.2.2 Génération du maillage 3D

i) Génération et numérotation des noeuds

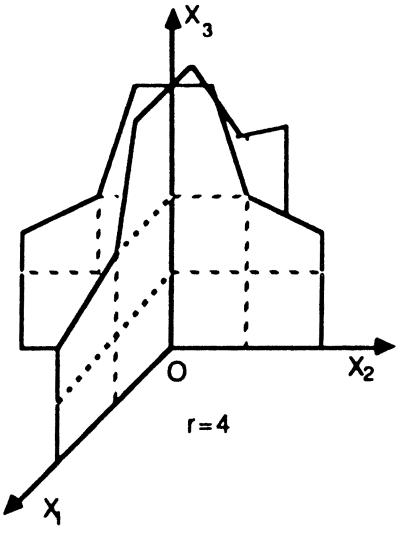


Figure 5.9

Choisissons un nombre entier $r \geq 3$.
Les noeuds du maillage 3D sont engendrés par r-1 rotations successives d'angle $\frac{2\pi}{r}$ et d'axe Ox_3, les noeuds du maillage 2D, situé dans le plan Ox_1x_3.
Notons :
n : le nombre de noeuds du maillage 2D
p : le nombre de noeuds sur l'axe de rotation.

Les noeuds situés dans le plan Ox_1x_3, identifiés avec les noeuds du maillage 2D en conservent la numérotation.
Parmi ceux-ci :

- un noeud situé sur l'axe n'engendre pas de nouveau noeud
- un noeud de rang i dans la liste ordonnée par numéro croissant des noeuds ne se trouvant pas sur l'axe, entendre les noeuds de numéro :
  $n+i,\ n + (n-p) + i\ ,\ n+2\ (n-p) + i,\ \ldots\ ,\ n+(r-2)\ (n-p) + i.$

Au total le maillage 3D compte $m = n + (r-1)\ (n-p)$ noeuds.

Donc, dans une première étape, nous construisons donc :

- le tableau des coordonnées du maillage 3D,
- un tableau R(1:m) de rotation des numéros.

R(i) est le numéro du noeud engendré par rotation d'angle $\frac{2\pi}{r}$ du noeud de numéro i.

ii) Génération et numérotation des éléments

Numérotation

Notons e le nombre d'éléments du maillage 2D. Le maillage 3D comptera donc $l = e \cdot r$ éléments.
Le quadrangle de numéro $1 \leq i \leq m$, engendre par rotations successives les éléments 3D de numéros :

$$i, e+i, 2e+i, \ldots, (r-1)e+i$$

Génération de la 1ère couche d'éléments 3D

Chaque quadrangle engendre un premier élément 3D dont les sommets sont ceux du quadrangle et leurs images par rotation d'angle $\frac{2\pi}{r}$. On procède à sa construction en 3 étapes :

1. Détermination du type de l'élément 3D

Si le quadrangle possède des noeuds sur l'axe, l'élément 3D est un pentaèdre.
Il faudra éventuellement effectuer une permutation circulaire des numéros des noeuds du quadrangle i_1, i_2, i_3,i_4 et leurs numéros de référence r_1, r_2, r_2, r_4, afin que i_1 et i_4 soient les numéros des noeuds sur l'axe.
Sinon, l'élément 3D engendré est un tétraèdre, pas de permutation dans ce cas.

2. Génération de la liste des numéros des sommets de l'élément 3D que nous noterons j_1, j_2,

pour un hexaèdre

$j_1 = i_1$ $\quad j_5 = i_4$
$j_2 = i_2$ $\quad j_6 = i_3$
$j_3 = R(i_2)$ $\quad j_7 = R(i_5)$
$j_4 = R(i_1)$ $\quad j_8 = R(i_4)$

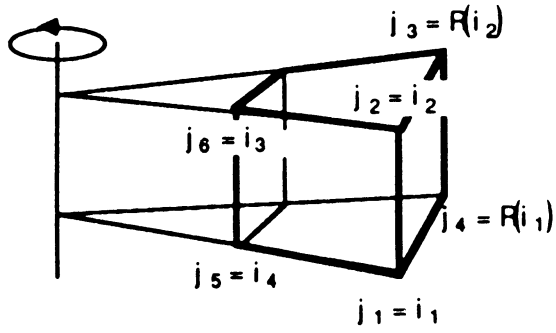


figure 5.10

pour un pentaèdre

$j_1 = i_1$ $\quad j_4 = i_4$
$j_2 = i_2$ $\quad j_5 = i_3$
$j_3 = R(i_2)$ $\quad j_6 = R(i_3)$

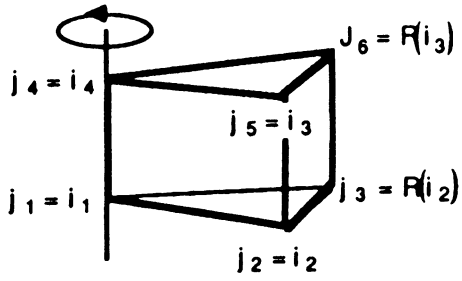


Figure 5.11

3. Génération éventuelle de la liste des numéros de références des sommets (effectuée dans le cas où ceux des sommets du quadrangle sont non tous nuls).
Les sommets du quadrangle conservent leurs numéros de références et les transmettent aux sommets obtenus par rotation. Les numéros de sous-domaine de l'élément 3D est celui du quadrangle.Le descriptif des éléments de la 1ère couche sont rangés l'un après l'autre dans le tableau des éléments.

Génération des (r-1) couches d'éléments suivantes

Tout élément de la deuxième couche est engendré par la rotation d'un élément de la première couche.Leurs descriptifs sont semblables, à l'exception des numéros des sommets qui ont effectué une rotation.On complète donc le tableau des éléments, par recopie et en effectuant la rotation des numéros des sommets à l'aide du tableau R.(cf 5.2.i)
Ainsi, la description des éléments d'une couche se déduit de la description des éléments de la couche précédente.

iii) Génération de la structure de données des températures aux noeuds du maillage 3D

La température aux noeuds du maillage 3D du cristal, doit être déduite par rotation des températures aux noeuds du maillage 2D du tirage.Afin d'établir la correspondance entre les numéros des noeuds de ces deux maillages, nous utilisons :

- un tableau T_1 de correspondance entre les noeuds des noeuds des maillages 2D du cristal et du tirage,
- un tableau T_2 contenant la liste des numéros des noeuds du maillage 2D du cristal ne se trouvant pas sur l'axe.

Soient alors :

n_{3d}	le nombre de noeuds du maillage 3D du cristal
n_{2d}	le nombre de noeuds du maillage 2D du cristal
q	le nombre de noeuds du maillage 2D du cristal non sur l'axe,

soit $1 \leq i \leq n_{3d}$ le numéro d'un noeud du cristal 3D et j(i) le numéro du noeud correspondant du maillage 2D du tirage, on a :

si $1 \leq i \leq n_{2d}$ $\quad j(i) = T_1(i)$

si $n_{2d} \leq i \leq n_{3d}$

alors si $i \bmod q = 0$ $\quad j(i) = T_1(i)$

si $i \bmod q = r \neq 0$ $\quad j(i) = T_1(T_2(r))$

CHAPITRE VI

RESULTATS NUMERIQUES

INTRODUCTION 137

1. THERMIQUE DU TIRAGE 139

1.1. Thermique du bain et de l'encapsulant 139

1.2. Cartes de températures obtenues par le code CRISTAL 139

2. CONTRAINTES THERMOELASTIQUES DANS LE CRISTAL 140

2.1. Notations 140

2.2. Formation et évolution des dislocations sous l'action des contraintes thermoélastiques 140

2.3. Localisation des dislocations dans un cristal tiré suivant la méthode Czochralski ... 141

2.4. Confrontation de la répartition des contraintes calculées et de la répartition des dislocations 142

2.5. Comparaison des facteurs de Schmid calculés et des bandes de glissements observées 143

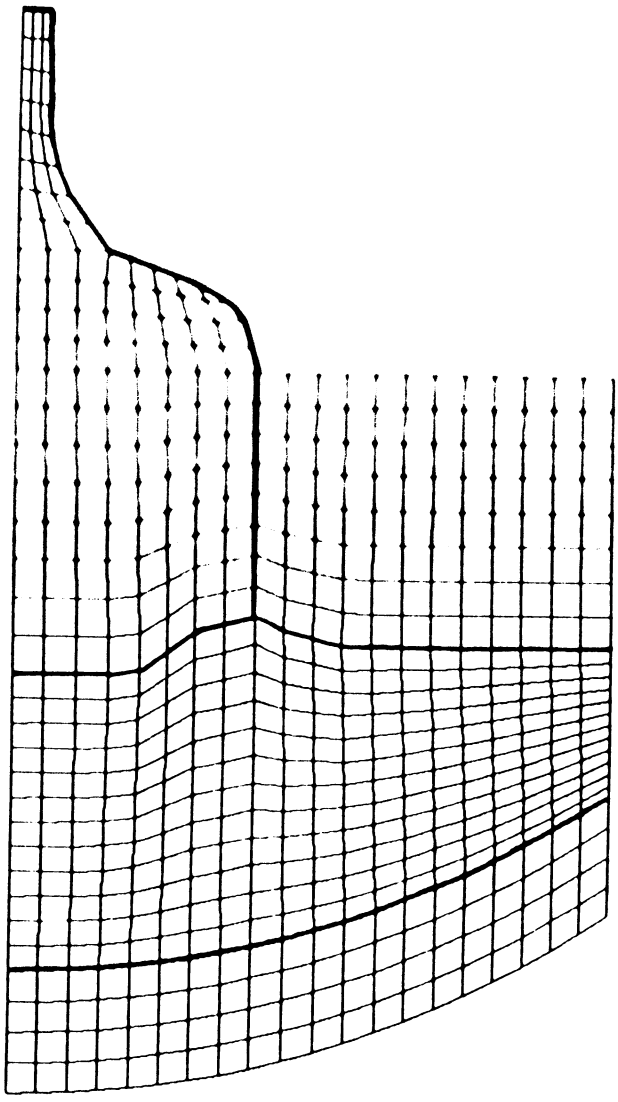
3.EXEMPLE D'UTILISATION DU CODE: MISE EN EVIDENCE DU ROLE DE L'ENCAPSULANT DANS LA GÉNÉRATION DES CONTRAINTES 144

INTRODUCTION

Les calculs présentés ici ont été effectués sur VAX 780. La taille des maillages utilisés , tels que ceux présentés page suivante sont de l'ordre de 600 noeuds pour le maillage 2D du tirage et de 2000 noeuds pour le maillage 3D du cristal.
C'est une finesse suffisante, au delà de laquelle on ne constate plus d'amélioration sensible des résultats.

Pour un utilisateur du logiciel , qui travaille en interactif, le temps de simulation de la thermique est de quelques minutes. L'algorithme de Newton est très efficace car il converge toujours en moins de cinq itérations pour obtenir une précision inférieure au degrè.

La simulation des contraintes est beaucoup plus longue car le nombre de noeuds est plus important et l'on a trois inconnus par noeuds (les trois composantes du déplacement).Le calcul des contraintes est dans ce cas de l'ordre de vingt minutes .

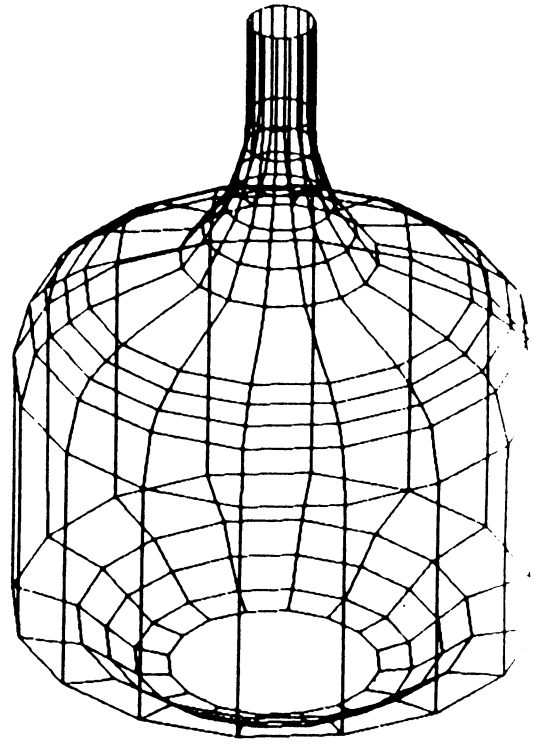


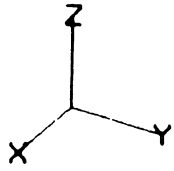
maillage 2D du tirage

593 noeuds
536 quadrangles

maillage 3D du cristal

2069 noeuds
320 pentaèdres
1600 hexaèdres





1. THERMIQUE DU TIRAGE.

1.1.Thermique du bain et de l'encapsulant.

Lors de la modélisation nous avons supposé que le transport de chaleur par convection dans le bain et l'encapsulant pouvait être négligé, en première approximation.
Par comparaison des résultats d'une simulation et de résultats expérimentaux, nous vérifions maintenant la validité de cette simplification.

Des mesures thermiques dans le bain et l'encapsulant ont été effectuées, en l'absence de cristal. Elles permettent de reconstituer le profil de température dans ces deux milieux.(voir planche 6.1)
Nous avons ensuite effectué une simulation dans la même configuration.
Sur la paroi verticale du creuset nous avons reproduit le profil de température obtenu par la mesure, de même que la température au point central au fond du creuset est celle indiquée par le thermocouple du support.
Partout ailleurs sur le creuset, la température a été ajustée au mieux pour retrouver par la simulation le profil expérimental de température.

La comparaison de ces deux cartes montre que le code permet de simuler de manière satisfaisante la thermique de l'encapsulant et de la moitié supérieure du bain,en prenant comme conditions au limites le profil de température sur le creuset obtenu par la mesure.(voir planche 6.1)

Au fond du creuset il semble par contre que les mouvements de convection joue un rôle important dans le transport de la chaleur. On suppose l'existence d'un rouleau qui homogénéiserait la température dans cette zone.(cf[5])

1.2.Cartes de températures obtenues par le code.

A titre d'illustration (planche 6.2), nous présentons des résultats de simulation dans différentes configurations:

- bain et cristal avec ou sans encapsulant,
- bain seul avec ou sans encapsulant.

Ces simulations ont été effectuées avec les mêmes profils de températures sur le creuset et des températures de gaz et de couvercles identiques.

2. CONTRAINTES THERMOELASTIQUES DANS LE CRISTAL.

2.1.Notations.

Les plans et les directions de glissement autorisés par la structure cristalline de l'AsGa sont donnés par les faces et les arètes du tétrahèdre ci-dessous.

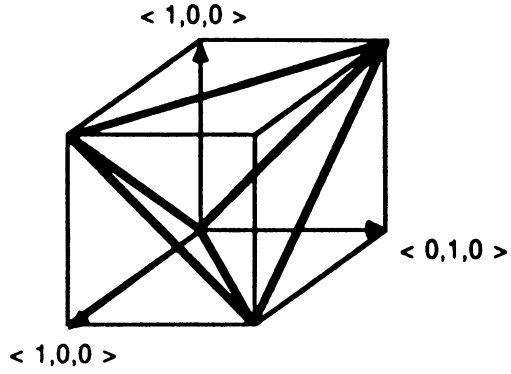


figure 6.1

Les critallographes utilisent les conventions suivantes:

les plans de glissement sont désignés par la diagonale du cube unité qui leur est orthogonale.Les quatre familles de plans de glissement sont donc notées:

$(1, 1, 1), (\bar{1}, \bar{1}, 1), (1, \bar{1}, 1), (\bar{1}, 1, 1)$ avec $\bar{1} = -1$

les directions de glissement parallèles aux arètes du tétrahèdre sont notées:

$< 1, \bar{1}, 0 >, < 1, 0, \bar{1} >, < 0, 1, \bar{1} >$ etc ...

2.2. Formation et évolution des dislocations sous l'action des contraintes thermoélastiques.

Les propriétés mécaniques du cristal varient en fonction de la température Il faut en tenir compte pour appréhender le processus de formation des dislocations au cours du tirage. Nous distinguons donc deux situations:

à haute température:

C'est aux températures proches de la température de fusion que les forces de cohésion entre les atomes du cristal sont les plus faibles. Sous l'action du cisaillement dû aux dilatations thermiques les dislocations se créent , puis évoluent et se multiplient suivant deux schémas:

*une dislocation en engendre d'autres dans le même plan de glissement .C'est le ***glissement*** des dislocations.

*une dislocation en engendre d'autres dans d'autres plans de glissement .C'est la ***montée*** des dislocations .Ce phénomène est dû à la combinaison de la dislocation avec un défaut ponctuel,tel qu'une impureté ou l'absence d'un atome dans la structure cristalline. Les dislocations parviennent alors à isoler de petites régions du cristal appelées cellules.

à basse température:

Le seuil de contraintes pour la création des dislocations est beaucoup plus élevé qu 'aux hautes températures. Les dislocations sont générées principalement par glissement de celles préexistantes .Par contre la montée des dislocations ne se produit plus.

2.3.Localisation des dislocations dans un cristal tiré suivant la méthode Czochralski

Il existe différents procédés pour révéler les dislocations.En, particulier,une simple attaque chimique (KOH) permet de rendre visible les dislocations à la surface d'un échantillon.

La planche 6.3 montre une coupe horizontale d'un cristal ou "wafer", ayant subi ce traitement.Ce sont sur de tels wafer que sont implantés les composants électroniques et qu'est étudiée la répartition des dislocations (cf[25]).

On observe:

i) les bandes de glissements

Elles sont réparties de manière ordonnée à la périphérie du disque.Elles sont regroupées suivant huit lobes (on remarquera les symétries dûes à la structure cristalline).A l'intérieur d'un quelconques de ces lobes elles ont toutes la même direction.
Cette direction correspond à l'intersection d'un plan de glissement avec la coupe, comme l'illustre la figure 6.2)

ii) les cellules:

Elles sont réparties au centre et à la périphérie du wafer. On observe une zone intermédiaire peu disloquée.

Signalons d'autre part que la répartition des dislocations est identique quelque soit la hauteur de la coupe dans le cristal, tout du moins dans sa partie cylindrique.

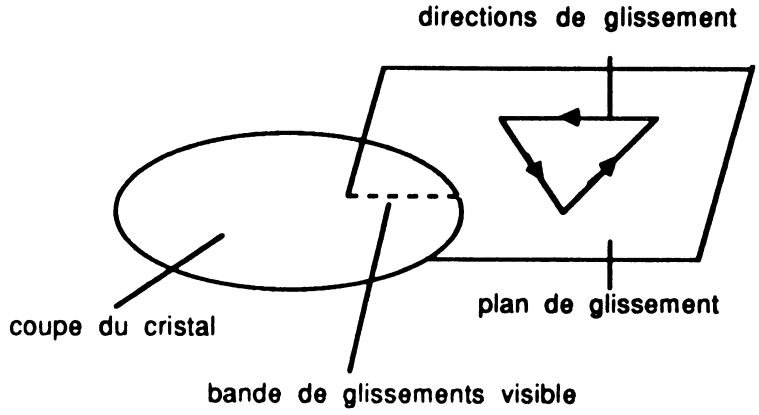


figure 6.2

2.4.Confrontation de la répartition des contraintes calculées et de la répartition des dislocations.

Nous allons maintenant confronter les cartes de contraintes obtenues à l'aide du code et la répartition des dislocations telle qu'elle est décrite précédemment .

Nous présentons planche 6.4 des cartes d'isocontraintes (cisaillement maximum) et d'isothermes calculées par le code pour un cristal tiré avec encapsulant.
Nous rappelons que le champ thermique est axisymétrique ,tandis que les isocontraintes sont invariantes seulement par rotations d'angles $\pi / 2$ en raison de l'anisotropie du cristal.

Pour confronter valablement les résultats obtenus par le code et la répartition des dislocations telle qu'on la connait,on ne peut s'en tenir a une seule cartographie des contraintes correspondant a un seul instant du tirage.Il faut tenir compte de l'histoire du tirage.

En effet les dislocations que l'on peut voir sur un wafer peuvent se produire tout au long du tirage. Le wafer est crée à l'interface de cristallisation, puis s'en éloigne. Il passe donc par différents états de contraintes et de température.

Nous allons donc analyser les résultats de trois simulations correspondant à trois étapes successives d'un même tirage.
Sur la planche 6.5 figurent les tracés des isovaleurs de Tresca suivant une même coupe verticale du cristal , de chacune de ces trois simulations, I, II et III.

Nous nous intéressons au profil radial de contrainte sur un même wafer qui occupe successivement les positions A, B, C au cours du tirage.On a:

étape I:

à l'interface de cristallisation les contraintes sont relativement faibles.Mais le matériau proche de l'état pâteux est fragile.
Le profil radial de contrainte présente la forme d'un W. Cela concorde bien avec la répartition des cellules qui ne peuvent se créer qu'à haute température (cf [26]) Le minimum de contrainte coincident avec la zone médiane peu disloquée des wafers.Pour un wafer situé à la hauteur A , on a encore le profil en w, mais atténué.

étape II et III:

sur le wafer se trouvant alors en B puis C,la température est plus beaucoup plus basse mais les contraintes sont très fortes On suppose que dans ces conditions les dislocations se multiplient par glissement. Le profil en U coincide bien avec la localisation des glissements en périphérie.

2.5.Comparaison des facteurs de Schmid calculés et des bandes de glissements observées

La planche 6.6 montre des cartes facteurs de Schmid (en valeur absolue) sur une coupe perpendiculaire à la direction de tirage < 0, 0, 1>
Les six facteurs de Schmid représentés correspondent aux plans de glissement (1, 1, 1), ($\bar{1}$, $\bar{1}$, 1) dont l'intersection avec le plan de coupe est la direction < 1, 1, 0 >.

Les six autres facteurs de Schmid,non représentés correspondent aux plans de glissement ($\bar{1}$, 1, 1) ($\bar{1}$, 1, 1) dont l'intersection avec le plan de coupe est la direction < 1, $\bar{1}$, 0 >

Les isovaleurs dans le plan de coupe de ces derniers se déduisent par symétrie par rapport à la droite < 0,1,0 > des isovaleurs des six premiers facteurs de Schmid cités.

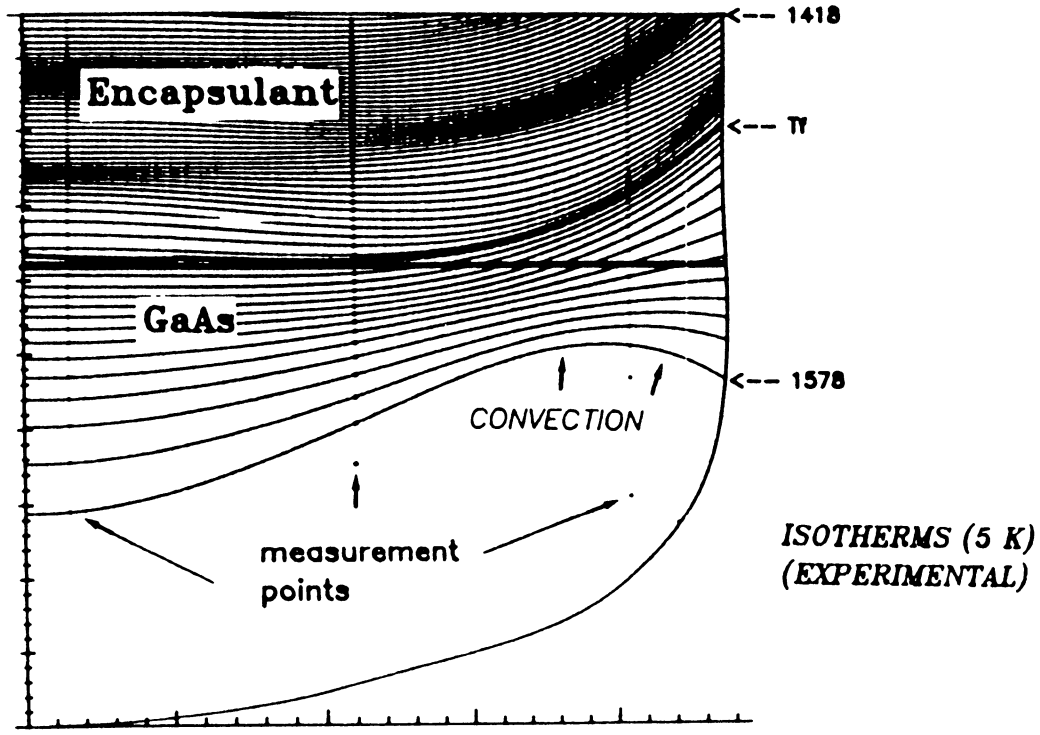
Comparons maintenant les facteurs de Schmid de la planche 6.6 avec la figure de la planche 6.3 représentant les bandes de glissement observables suivant le même plan de coupe.On remarque que:

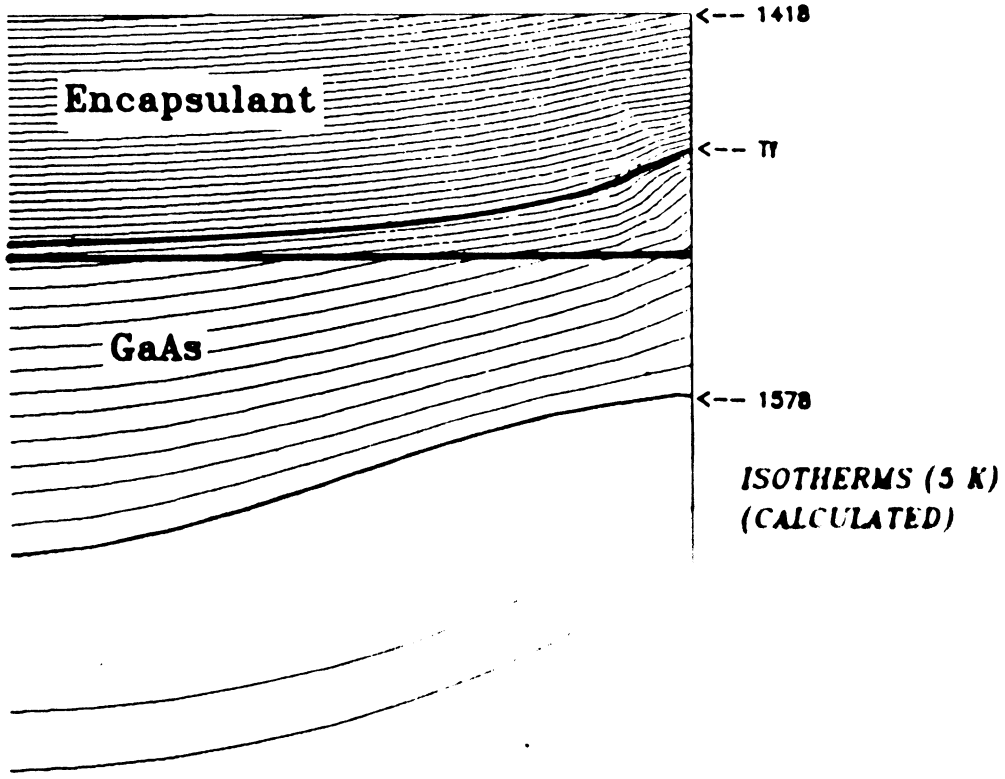
1) Le positionnement de chaque lobe coïncide avec celui d'au moins un extremum d'un facteurs de Schmid.

2)Les extréma des facteurs de Schmid correspondant à la direction parallèle au plan de coupe < 1, $\bar{1}$, 0 > ,ne coïncide avec aucun lobe.Cela peut s'expliquer par une faible probabilité d'intercepter un glissement par un plan de coupe qui lui est parallèle.

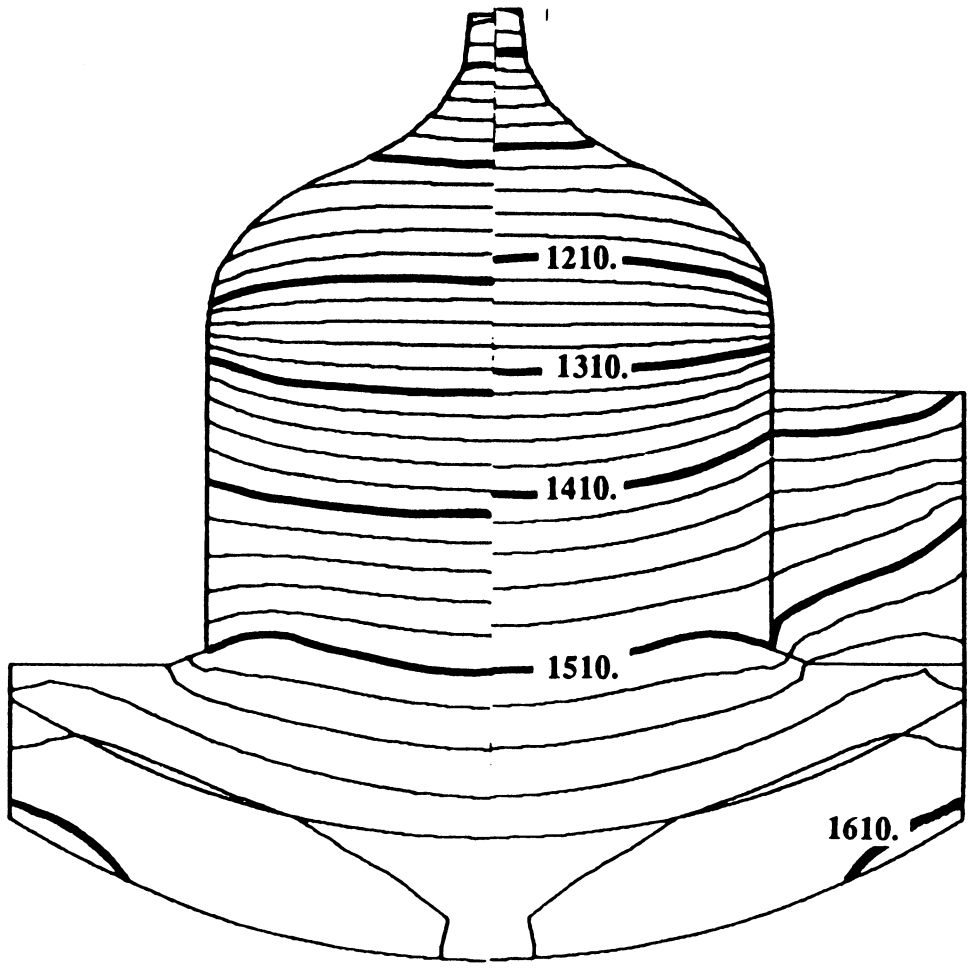
3. EXEMPLE D'UTILISATION DU CODE: MISE EN ÉVIDENCE DU ROLE DE L'ENCAPSULANT DANS LA GÉNÉRATION DES CONTRAINTES.

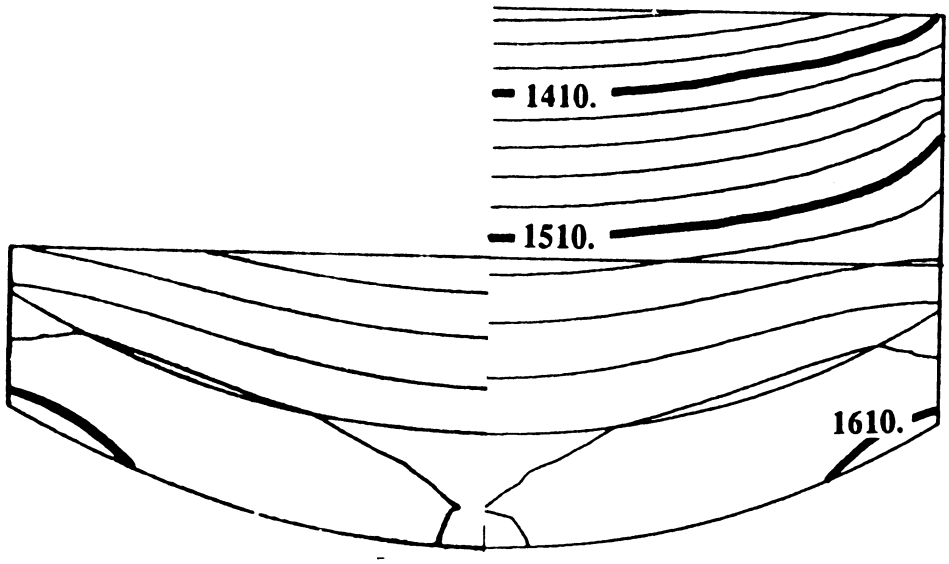
La planche 6.7 montre des résultats de simulations dans des configurations semblables à l'exception de la hauteur d'encapsulant.
On constate que la non-uniformité du gradient thermique dans le cristal est accentué par le contact avec l'encapsulant
L'intensité des contraintes croit par conséquence avec la hauteur d'encapsulant.





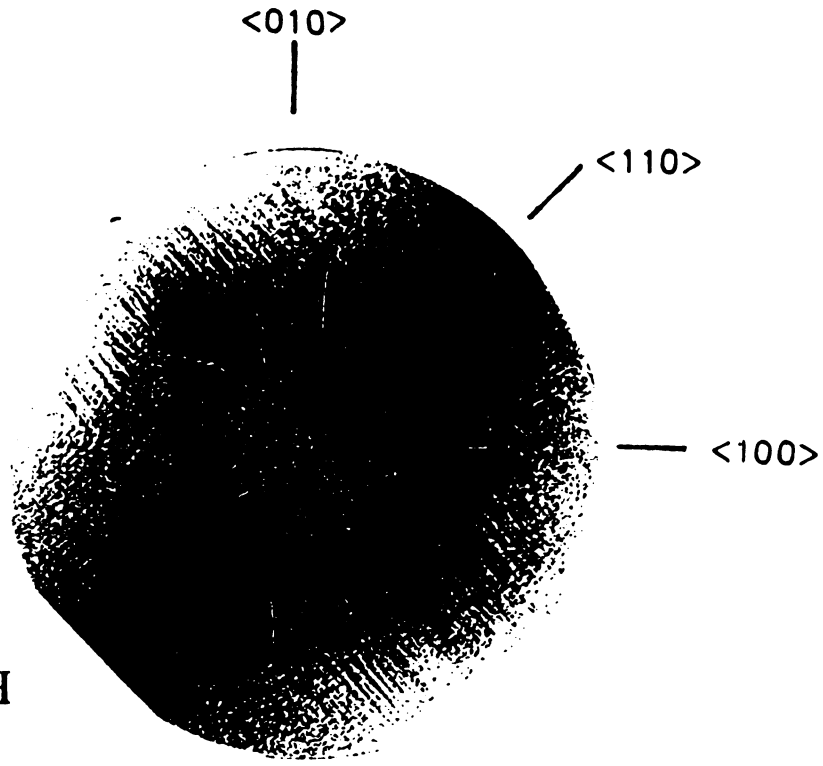
THERMIQUE DU BAIN ET DE L'ENCAPSULANT



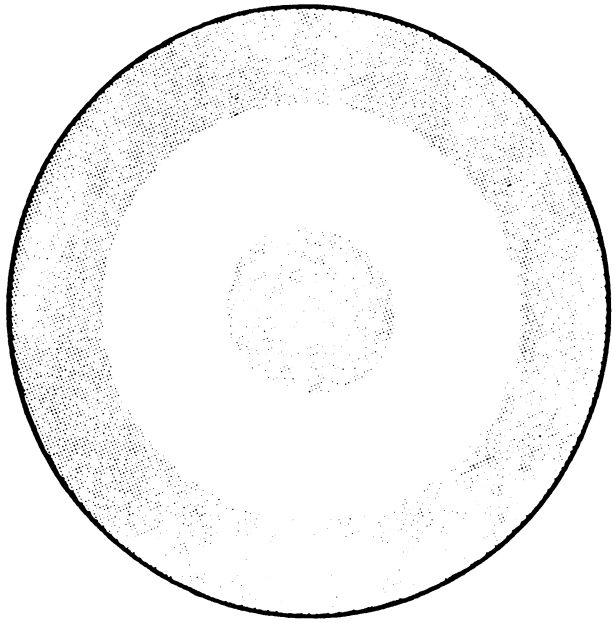


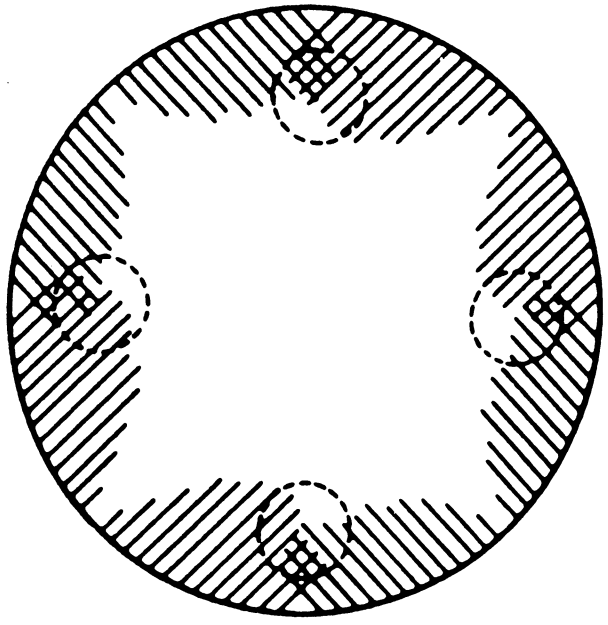
ISOTHERMES

PLANCHE (



révélation KOH



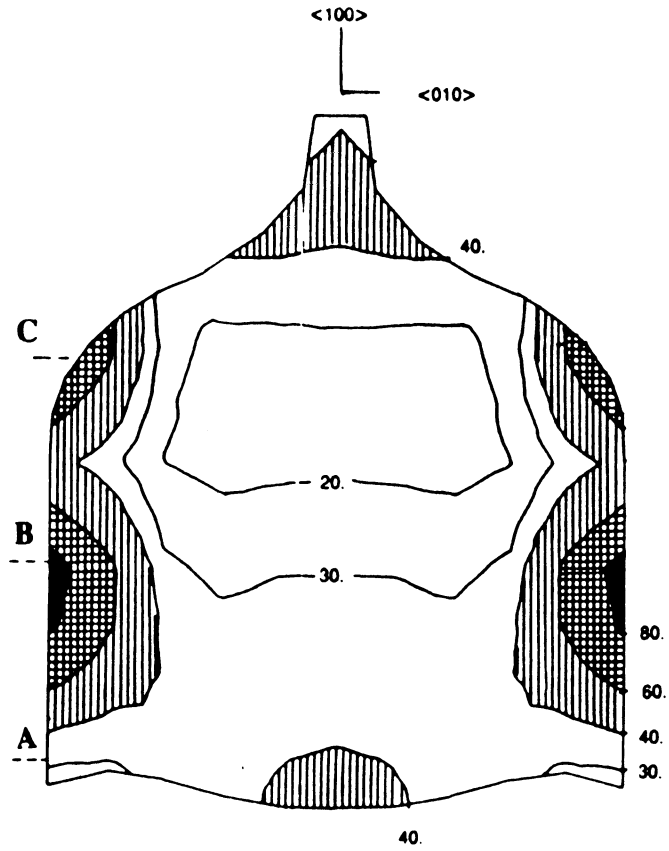


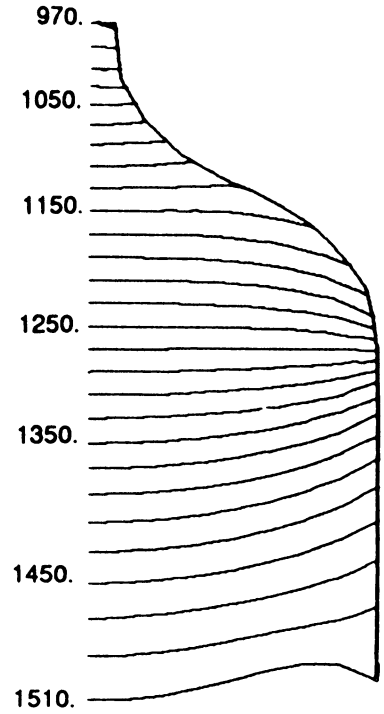
cellules

glissements

REPARTITION DES DISLOCATIONS

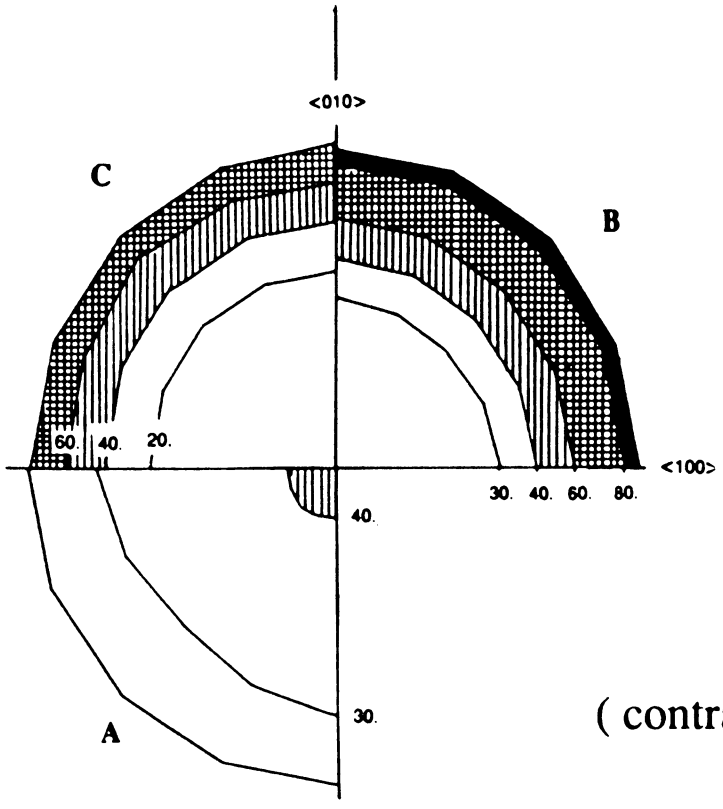
PLANCHE 6.3





TEMPERATURES

en °K



CRITERE DE TRESCA

(contrainte de cisaillement maximun

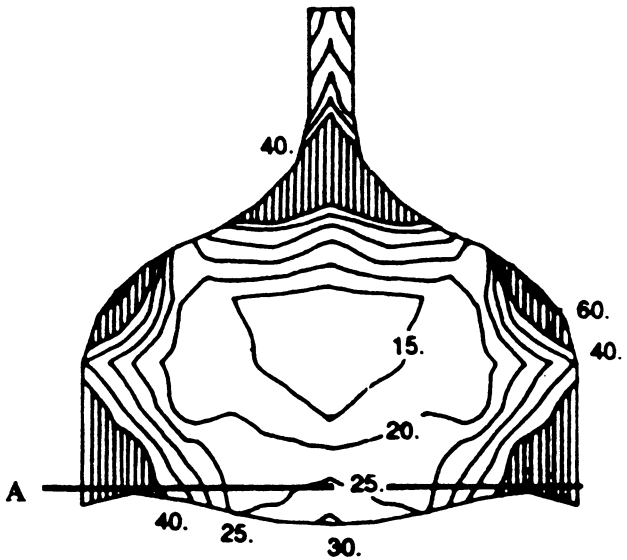
en kg / cm^2

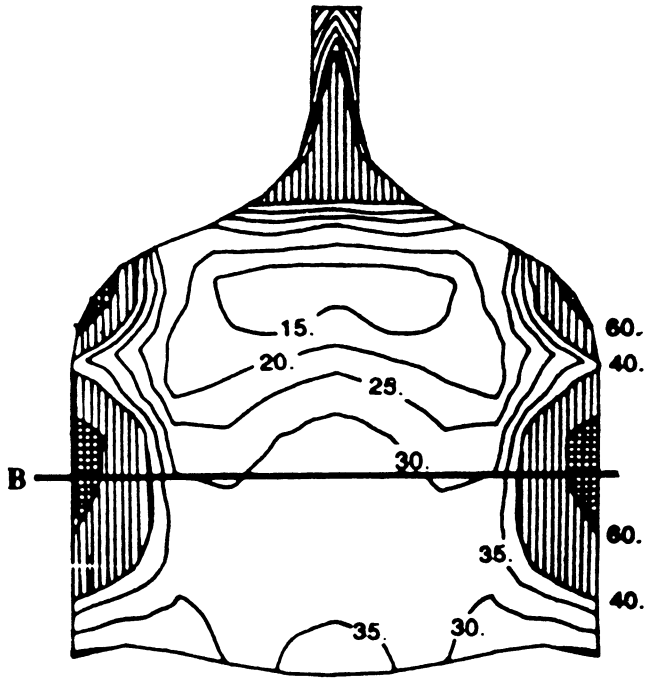
PLANCHE (

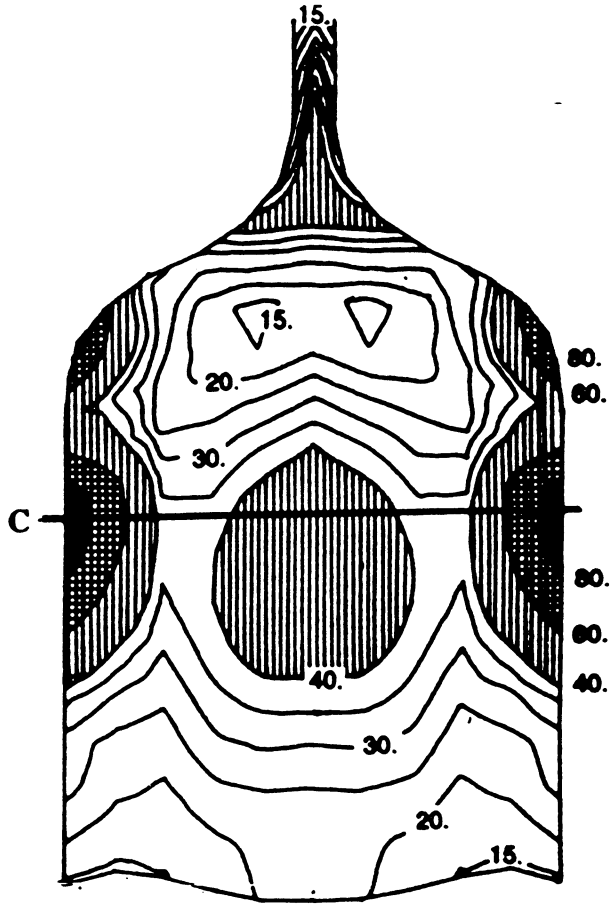
CRITERE DE TRESCA

(contrainte de cisaillement maximum)

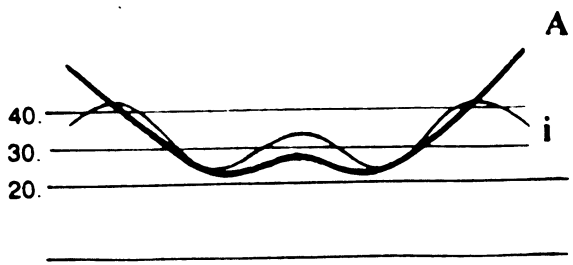
en kg / cm2



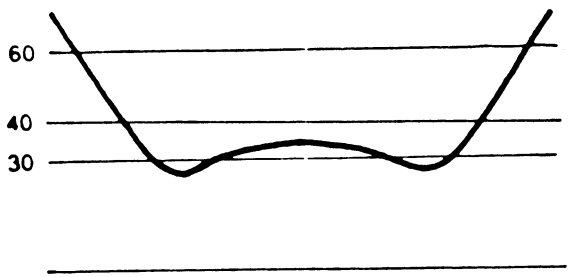




profils coupe A et interface



profil coupe B



profil coupe C

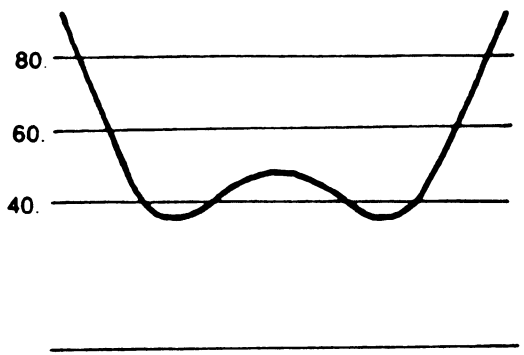
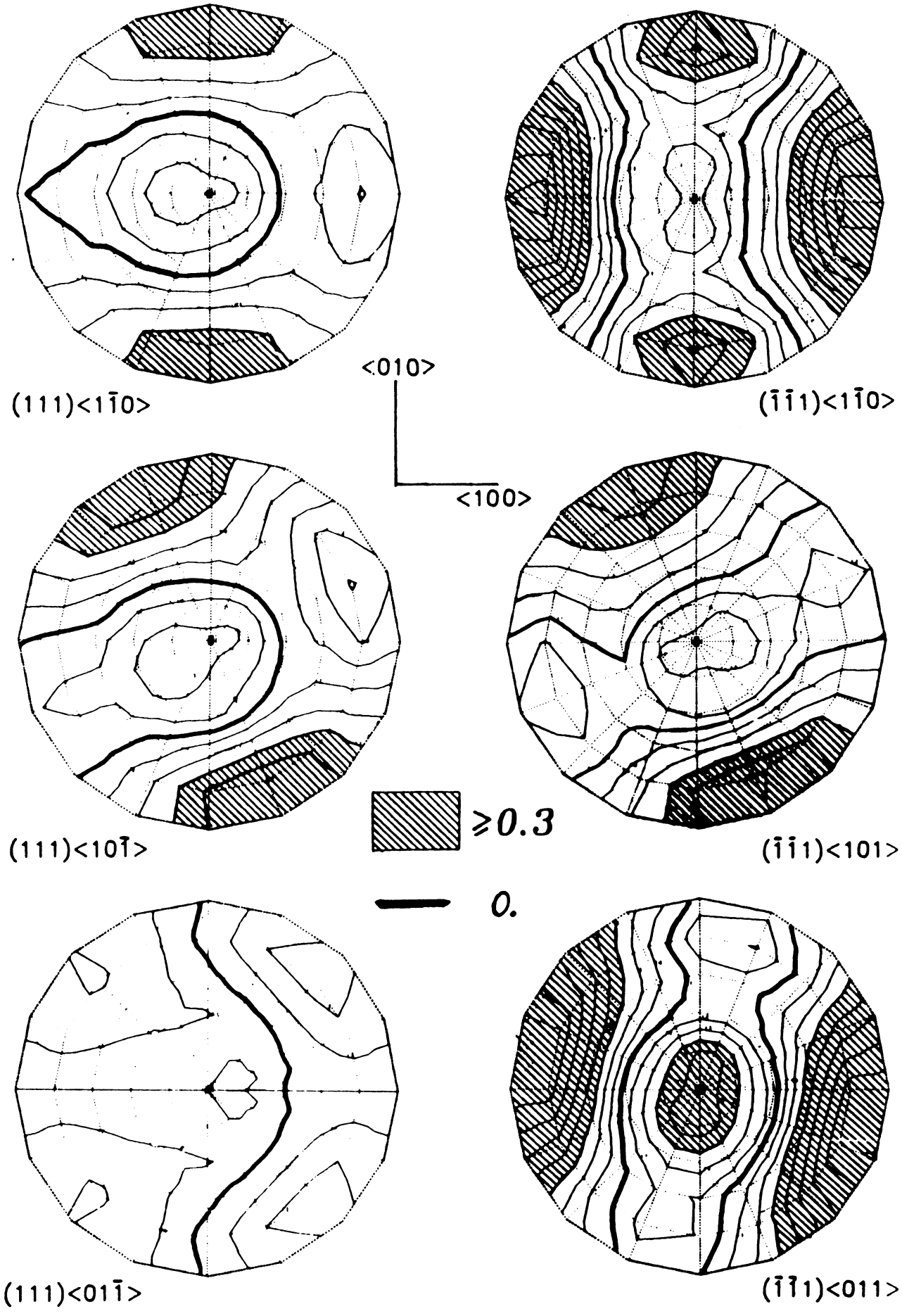


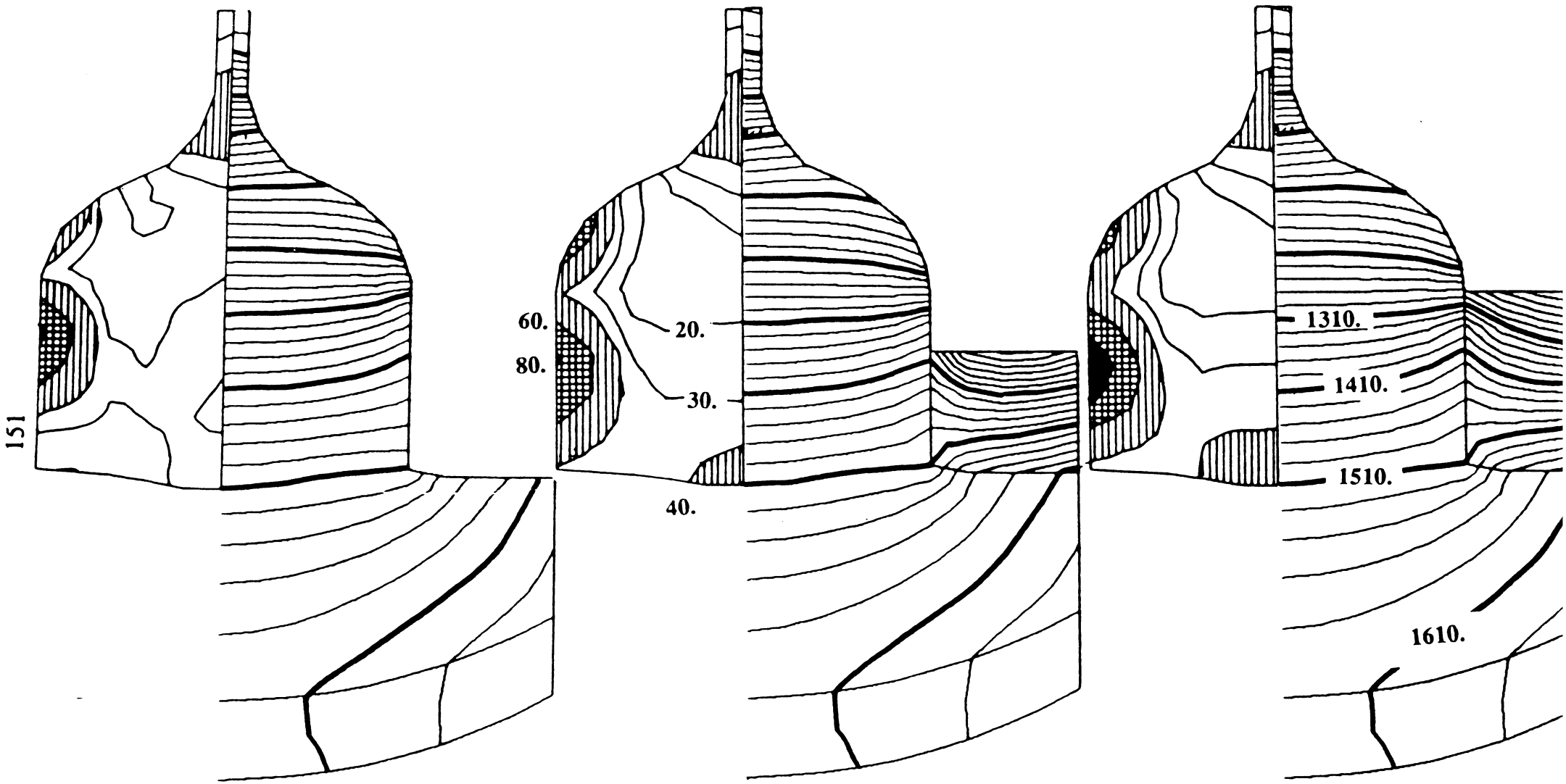
PLANCHE 6.5



FACTEURS DE SCHMID

PLANCHE 6

cisaillement maximun en kg / cm2 température en °K



INFLUENCE DE L'ENCASULANT
SUR LES CONTRAINTES

BIBLIOGRAPHIE

[1] **M.Duseau.**
Temperature profile and thermal stress calculations in GaAs crystals growing from the melt
Journal of cristal growth 61, p 576-590, (1983).

[2] **J.Derby, R.Brown, F.T.Geyling, A.s.Jordan, G.A.Nikolakopoulou.**
Finite element analysis of a thermal capilary model for a liquid encapsulated Czochralski growth.
Journal Electrochem. soc, vol 132, n°2, p 470-481, (feb 1985).

[3] **R.K.Srivastava, P.A.Ramachandran and M.P.Duducovic.**
Interface shape in Czochralski grown cristals : effects of conduction and radiation.
Journal of cristal growth 73, p 487-504, (1985).

[4] **N.Kobayashi**
Computer simulation of heat, mass and fluid flows in melt during Czochralski crystal growth.
Comp. meth. in app. mech. eng., vol 23 , p 21-33, (1980).

[5] **F.Dupret, Y.Ryckmans, P.Wouters and M.J.Crochet.**
Numerical calculation of the global heat transfert in a Czochralski furnace.
Journal of cristal growth 79, p 84-91, (1986).

[6] **Weil.**
Eléments des échanges thermiques.
Gauthier-Villard (1965).

[7] **F.Sacadura.**
Initiation au transferts thermiques.
Centre d'actualisation scientifique et technique , INSA de Lyon.

[8] **R.Siegal , J.R.Howel.**
Thermal radiation heat transfert.
Mc Graw-Hill , New York (1972).

[9] R.A.Laudise.

The growth of single cristals .
Solid state physical eletronics series, Prentice-Hall-Inc (1970).

[10] P.Witomski.

The steady state heat equation with mixed nonlinear boundary conditions.An example in cristallography.
Comp. meth. in app. mech. eng., vol 35 , p 47-66,(1982).

[11] H.Brezis.

Analyse fonctionnelle.Théorie et application.
Masson (1983).

[12] M.H.Protter, H.F.Weinberger.

Maximum principle in differential equations.
Springer-verlag , New York Inc (1984).

[13] P.J.Ciarlet.

The finite element method for elliptic problems.
North Holland. Amsterdam.(1978).

[14] P.Joly.

Résolution de systèmes linéaires non symétriques par des méthodes de gradient conjugué.
Publication du laboratoire d'analyse numérique.Paris 6.(1982).

[15] P.L.Georges et al.

Guide d'utilisation et normes de programmation.
Documentation MODULEF n° 1 .INRIA.

[16] P.L.Georges.

Le module APNOPO, mailleur bidimensionnel du club MODULEF.
Documentation MODULEF n° 104 .INRIA.

[17] Perronet.

Description des strutures de données du club MODULEF.
Documentation MODULEF n° 2.INRIA.

[18] Fiches techniques élément finis , bibliothèque d'élasticité.
Documentation MODULEF n° 2.INRIA.

[19] **R.K.Srivastava et al.**
Radiation view factors in Czochralski growth apparatus for short cristals.
Journal of cristal growth 76, p 281-291,.(1986).

[20] **J.R.Howell.**
A catalog of radiation configuration factors.
Mc Graw-Hill , New York. (1982).

[21] **S.Miyazawa.**
14th int. conf. on defects in semi conductors, material science forum , vl. 10 , p 1.
trans. tech. publ. , Ed. H.J. Van Bardeleben., (1986)

[22] **J.P.Henry, F.Parsy.**
Cours d'élasticité.
Dunod (1982).

[23] **P.A.Raviart.J.M.Thomas.**
Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles.
Masson (1983).

[24] **J.P.Hirth , J.Lothe.**
Theory of dislocations.
Whiley Interscience Publication.

[25] **T.Kituno et al.**
Generation rule of slip dislocation in LEC GaAs crystal.
Proc. conf. on semi-insulating III-V materials, Hakone (1986).

[26] **A.Chabli , A.Molva , Ph Bunod , J.P.Leludec , Ch.Perret , F.Bertin.**
Generation of dislocations and their interaction with defects in LEC GaAs : effect of the thermal story and non-stoichiometry.
Proc. int. conf. on defects in semi conductors, Yokohama (1989).

ANNEXE

Nous donnons ici quelques séquences du dialogue logiciel-utilisateur pour démontrer l'aspect conversationnel du logiciel et sa facilité d'emploi.

L'appel de CRISTAL se fait en rentrant :

CRISTAL ➥ (➥ :retour charriot)

Le menu principal apparait alors:

1: REALISATION D'UN MAILLAGE
2: VISUALISATION D'UN MAILLAGE
3: CALCUL DE LA THERMIQUE
4: TRACE D'ISOTHERMES
5: CALCUL DES CONTRAINTES
6: VISUALISATION DES CONTRAINTES

CHOIX DE L'UTILISATEUR ?

Les choix 2 , 4 , 5 correspondent à des visualisations Le logiciel fait alors appel aux modules de visualisation et de tracés conversationnels de la bibliothèque MODULEF.
Les choix 1, 3, 6 mettent en oeuvre la simulation .C'est ici que l'interface utilisateur que nous avons developpé intervient pour la saisie des données.Nous prendrons pour exemple l'item numéro 3 correspondant au calcul de thermique.

Le sous menu suivant est alors affiché:

C: CREATION DES DONNEES
E: EXECUTION
F: FIN

La création du jeu de données est conversationnelle :

NOM DU FICHIER A CREER ?
MAIL.DON ➥
HAUTEUR DU CREUSET ?
10. ➥
HAUTEUR DE CREUSET SORTANT DANS LE COUVERCLE ?
2. ➥
RAYON DU COUVERCLE?
25. ➥
FORME DU COUVERCLE?
1 : HEMISPHERIQUE
2 : QUELCONQUE
1 ➥
LA TEMPERATURE SUR LE CREUSET EST ELLE CONSTANTE ?
1 : OUI
0 : NON
0 ➥
NOMBRE DE POINTS SUR LE FOND DU CREUSET OU LA TEMPERATURE EST DONNEE (≥ 2) ?
3 ➥
LES POINTS SONT ORDONNES PAR DISTANCE CROISSANTE A L'AXE DU CREUSET
POINT 1 DISTANCE ? TEMPERATURE ?
0. 1500. ➥
POINT 1 DISTANCE ? TEMPERATURE ?

et ainsi de suite, jusqu'à la saisie complète des données pour la thermique.

L'utilisateur commande ensuite l'exécution .Le logiciel saisit alors les noms des fichiers d'entrée-sortie:

NOM DU FICHIER DES DONNEES ?
TEMP.DON ➥
NOM DU FICHIER DU MAILLAGE ?
MAIL.TIR ➥
NOM DU FICHIER DES TEMPERATURES ?
TEMP.NOEUD ➥
NOM DU FICHIER DU ISOVALEURS ?
TEMP.ISO➥

puis, lorsque le calcul est terminé ,le sous menu est de nouveau affiché et il faut choisir fin pour revenir au menu principal

Pour la création du maillage le déroulement est identique.Pour le calcul des contraintes le jeux de données trés reduit est saisi en début d'execution et n'est pas sauvegardé sur fichier.

exemples de fichiers de données:

MAIL.DON

```
 2                                          $FINESSE DU MAILLAGE
 0.200000E+01                               $EPAISSEUR DU FOND DE GRAPHITE
 0.100000E+02                               $RAYON DU CREUSET
 0.180000E+02                               $RAYON DE COURBURE DU FOND DU CREUSET
 0.600000E+01                               $PROFONDEUR DU BAIN
 1                                          $PRESENCE DE L'ENCAPSULANT
 0.400000E+01                               $HAUTEUR D'ENCAPSULANT
 1                                          $PRESENCE DU CRISTAL
 0.400000E+01                               $RAYON DU CRISTAL
 0.110000E+02                               $HAUTEUR TOTALE DU CRISTAL
 0.500000E+00                               $RAYON DU GERME
 0.100000E+01                               $HAUTEUR DE CRISTAL IMMERGEE
   5                                        $NOMBRE DE POINTS ITERM. SUR EPAULE
 0.600000E+01      0.375000E+01             $HAUTEUR RAYON
 0.650000E+01      0.300000E+01             $HAUTEUR RAYON
 0.700000E+01      0.150000E+01             $HAUTEUR RAYON
 0.800000E+01      0.750000E+00             $HAUTEUR RAYON
 0.900000E+01      0.500000E+00             $HAUTEUR RAYON
   2                                        $NB PTS INTERMEDIAIRES CRISTAL-BAIN
 0.200000E+01      0.100000E+01             $RAYON PROFONDEUR
 0.300000E+01      0.250000E+00             $RAYON PROFONDEUR
   2                                        $NB PTS INTERMEDIAIRES BAIN ENCAPSULANT
 0.500000E+00                               $PROFONDEUR DU MENISQUE
 0.500000E+00      0.250000E+00             $DISTCRIST PROFONDEUR
 0.150000E+01      0.500000E+00             $DISTCRIST PROFONDEUR
MAIL.TIR                                    $NOM DU FICHIER DU MAILLAGE TIRAGE
MAIL.CRIS                                   $NOM DU FICHIER DU MAILLAGE CRISTAL
```

TEMP.DON

```
$ DIMENSIONS
 0.100000E+02                               $ HAUTEUR DU CREUSET
 0.200000E+01                               $ HAUT DE CREUS DS COUV
 0.250000E+02                               $ RAYON DU COUVERCLE
 1                                          $ 1 = COUV HEMIS, 2 = COUV QUELCONQUE
$ TEMPERATURES
 0                                          $ 1 = TEMP CREUS CONST, 0 = SINON
  2                                         $ NB POINTS FOND DU CREUSET
 0.000000E+00      0.150000E+04             $ DISTANCE TEMPERATURE
 0.100000E+02      0.148000E+04             $ DISTANCE TEMPERATURE
  2                                         $ NB POINTS PAROIE DU CREUSET
 0.600000E+01      0.140000E+04             $ HAUTEUR TEMPERATURE
 0.100000E+02      0.135000E+04             $ HAUTEUR TEMPERATURE
 0.130000E+04                               $ TEMPERATURE DE FUSION
 0.500000E+03                               $ TEMPERATURE DU GAZ AMBIANT
 0.300000E+03                               $ TEMPERATURE DU COUVERCLE
$ CONDUCTIVITES
 0.300000E+00                               $ CRISTAL
 0.130000E-01                               $ ENCASULANT
 0.640000E+00                               $ BAIN
 0.420000E-01                               $ SUPPORT CREUSET
$ EMISSIVITES
 0.610000E+00                               $ CRISTAL
 0.300000E+00                               $ BAIN
 0.590000E+00                               $ CREUSET
 0.900000E+00                               $ COUVERCLE
```

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I.
MODÈLE THERMIQUE DE LA MÉTHODE CZOCHRALSKI 7

CHAPITRE II.
MODÈLE MATHÉMATIQUE DE LA THERMIQUE DANS LA MÉTHODE CZOCHRALSKI 27

CHAPITRE III .
RÉSOLUTION NUMÉRIQUE 51

CHAPITRE IV.
LE LOGICIEL CRISTAL 71

CHAPITRE V.
CALCUL DES CONTRAINTES THERMOÉLASTIQUES 115

CHAPITRE VI.
RÉSULTATS NUMÉRIQUES 135

BIBLIOGRAPHIE 153

ANNEXE 157

AUTORISATION DE SOUTENANCE

DOCTORAT 3ème CYCLE, DOCTORAT INGENIEUR,
DOCTORAT DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1

Vu les dispositions de l'Arrêté du **16 avril 1974**,

Vu les dispositions de l'Arrêté du **5 juillet 1984**,

Vu les rapports de M ...P. WITOMSKI.....

M .....

M ....PERRET....CHRISTIAN.....est autorisé(e)
à présenter une thèse en vue de l'obtention du .Doctorat de 3e Cycle
.....

Grenoble, le 03 OCT. 1988

Le Président de l'Université
Joseph Fourier - Grenoble 1

A. NEMOZ

UNIVERSITE JOSEPH FOURIER
GRENOBLE

RESUME

La méthode Czochralski est un procédé de fabrication de monocristaux par tirage à partir d'un bain fondu.
Le travail présenté dans cette thèse porte sur la simulation numérique des échanges de chaleur au cours de ce procédé et des contraintes thermoélastiques dans le cristal.
Cette étude thermique et numérique est concrétisée par le logiciel CRISTAL basé sur la méthode des éléments finis et interfacé pour des utilisateurs physiciens.

MOTS CLES

Simulation numérique. Eléments finis. Equation de la chaleur. Problèmes non linéaires. Thermoélasticité.