REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEINEMMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE BATNA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

MÉMOIRE

Pour l'obtention du diplôme

MAGISTÈRE EN PHYSIQUE

Option : Physique de rayonnements

Présenté par

AZOUI HANANE

Titre :

Etude des propriétés de la zone liquide lors de la croissance cristalline par la technique micro-pulling down

Soutenue devant le jury composé de :

Dr :	**S. DJOUIMAA.**	**M.C.A.**	**Université de Batna.**	**Présidente.**
Pr :	**D. BAHLOUL.**	**Prof.**	**Université de Batna.**	**Rapporteur.**
Dr :	**A. SID.**	**M.C.A.**	**Université de Batna.**	**Examinateur.**
Dr :	**A. BRIMA.**	**M.C.A.**	**Université de Biskra.**	**Examinateur.**

2012-2013

Remerciements

Je commence par remercier ALLAH notre Seigneur pour m'avoir donné la santé, la volonté et la patience durant toutes mes études, afin d'accomplir ce modeste travail.

Je tiens à adresser mes très sincères remerciements :

Au Professeur ***D. BAHLOUL,*** *du département des sciences de la matière, de l'Université de Batna pour l'encadrement, l'aide, et ses précieux conseils, mais également pour sa confiance, et ses encouragements jusqu'au terme de la réalisation de ce présent mémoire.*

Au Dr ***S .DJOUIMAA,*** *Maître de Conférences A, du département des sciences de la matière, de l'Université de Batna, pour son aide, ses conseils, et la présidence du jury de ma soutenance.*

Au Dr ***A. BRIMA,*** *Maître de conférences A, du département de mécanique de l'Université de Biskra, pour sa participation à l'appréciation du travail réalisé et la peine qu'il a pris pour assister à ma soutenance.*

Au Dr ***A. SID****, Maître de conférences A, du département des sciences de la matière de l'Université de Batna, pour son acceptation d'être examinateur de ce mémoire.*

Au Dr ***A. LAIDOUNE*** *Maître de conférences B, du département des sciences de la matière, de l'Université de Batna, pour l'aide, le courage, et surtout sa précieuse contribution à la fourniture de la documentation.*

Au Dr ***D. HADDAD*** *Maître de conférences B, du département de mécanique de l'Université de Batna, pour l'aide à la réalisation du programme numérique.*

J'adresse aussi ma profonde reconnaissance à :

Mon mari, pour son perpétuel soutien jusqu'à la dernière minute de la réalisation de mon mémoire, mes parents pour leur patience et leur soutien moral, mes frères et mes sœurs.

Enfin, mes remerciements vont aussi à mes collègues et amis pour leurs encouragements, aux Enseignants, et doctorants de département des sciences de la matière en citant les professeurs ***S.BOUGOUL et A.SOUDANI****, pour leur soutien et leur accueil chaleureux.*

AZOUI Hanane

SOMMAIRE

Nomenclature

Introduction générale 1

CHAPITRE 1:

Généralités et recherche bibliographique

1-1 Introduction sur les fibres 3

1-1-1 Développement de systèmes laser à fibres cristallines.....3

1-1-2 Fibres cristallines comme milieu laser 3

1-1-3 Avantages du laser à fibre cristalline 4

1-2 Laser.....4

1-2-1 Applications du laser……5

1-2-2 Lasers à solides……5

1-2-3 Inversion de population……..5

1-2-4 Différents processus du laser……..6

1-2-4-1 L'émission stimulée……6

1-2-4-2 L'émission spontanée……6

1-2-4-3 L'absorption……...7

1-2-5 Lasers trois et quatre niveaux……7

1-2-5-1 Les lasers à trois niveaux……7

1-2-5-2 Les lasers à quatre niveaux……8

1-3 Le Saphir……...8

1-3-1 Fibres de saphir……..9

1-3-2 Le laser Titane Saphir……..9

1-3-3 Diagramme du niveau du Titane……9

1-3-4 La croissance cristalline du saphir……..10

1-3-5 Contact de trois phases……11

1-3-6 Cas où l'une des phases est solide……12

1-3-7 Le mouillage……..12

1-3-7-1 Mouillage total……12

1-3-7-2 Mouillage partiel……13

1-3-8 Tube capillaire - loi de Jurin……14

1-4 Différents modes de transferts de la chaleur……..14

1-4-1 Conduction……14

1-4-2 Convection……15

1-4-2-1 Convection libre……15

1-4-2-2 Convection forcée……15

1-4-3 Rayonnement……16

1-4-4 Types d'écoulements……16

1-4-4-1 Ecoulement incompressible……16

1-4-4-2 Ecoulement laminaire……16

1-4-4-3 Ecoulement stationnaire……16

1-5 La solidification……17

1-5-1 Définition……17

1-5-2 Propriétés des deux phases de solidification……18

1-5-3 La Structure cristalline……18

1-5-4 Température de solidification……19

1-5-5 Chaleur latente……19

1-6 Etapes de la solidification……20

1-6-1 La germination……21

1-6-1-1 Importance de germination……21

1-6-1-2 Types de germination……21

1-7 La croissance……22

1-7-1 Les méthodes à croissance rapide……22

1-7-2 La méthode de Verneuil……22

1-7-2-1 Avantages de cette méthode……22

1-7-2-2 L'appareillage et le principe de la méthode Verneuil……22

1-7-2-3 Désavantages de cette méthode……23

1-7-2-4 Découverte du premier cristal laser par la croissance Verneuil……23

1-7-3 Technique de Bridgman-Stockbarger……24

1-7-3-1 Utilisation de La méthode Bridgman-Stockbarger……25

1-7-4 La technique LHPG……26

1-7-5 La technique d'épitaxie……27

1-7-6 La méthode de Czochralski……28

1-7-6-1 Utilisation de cette méthode……29

1-8 Technique micro-pulling down µ-PD.....32
1-8-1 Principe de la méthode de micro-pulling down µ-PD.....32
1-8-2 Dispositif expérimentale de la technique µ-PD.....33
1-8-3 -Opération de tirage du saphir par la technique de micro-pulling down.....34
1-8-4 Type du creuset.....35
1-8-5 Les principaux avantages de la technique µ-PD.....35
1-8-6 Conservation de masse et de chaleur et la stabilité de la zone fondue.....35
1-8-6-1 Conservation de la masse.....36
1-8-6-2 Conservation de l'énergie.....36
1-8-6-3 Types de Convection dans la zone fondue.....36
1-8-7 Equilibre de la forme de ménisque.....37
1-8-8 Forme de l'interface de croissance.....38
1-9 Les travaux théoriques et expérimentaux qui ont été réalisés par la µ-PD.....38

CHAPITRE 2:

Dérivation du modèle théorique

2-1 La modélisation.....44
2-2 Les équations fondamentales.....45
2-2-1 Les hypothèses simplificatrices.....45
2-3 Simplification des équations fondamentales.....46
2-3-1 Equation de la continuité.....46
2-3-2 Equation de quantité du mouvement.....47
2-3-2-1 Approximation de Boussinesq.....50
2-3-3 Equation de l'énergie.....51
2-3-4 Equation de la concentration.....53
2-4 Le modèle obtenu en coordonnées cylindrique.....54
2-5 Normalisation des équations.....55
2-5-1 Adimensionnalisation de l'équation de quantité du mouvement.....56
2-5-2 Adimensionnalisation de l'équation de Poisson.....57
2-5-3 Adimensionnalisation de l'équation de l'énergie.....57
2-5-4 Equation de conservation de la concentration.....58
2-6 Le modèle adimensionnel.....59
2-7 Approche de la fonction vorticité-ligne du courant.....60

CHAPITRE 3:

Etude numérique

3-1 Méthode de résolution des problèmes de mécanique des fluides 62

3-2 Les conditions aux limites..... 62

3-3 Le modèle physique..... 63

3-4 Choix de la méthode de résolution 65

3-4-1 Principe de la méthode des volumes finis 65

3-4-2 Avantages de MVF……..66

3-4-3 Etapes de la méthode des volumes finis 66

3-5 Equation de transport..... 68

3-5-1 Discrétisation de l'équation de transport..... 69

3-5-2 Choix du schéma de discrétisation..... 74

3-5-3 Schéma de différentiation centré 74

3-5-4 Schéma de différentiation Upwind 75

3-5-5 Schéma de différentiation hybride 78

3-6 Equation de la pression..... 79

3-6-1 Résolution de l'équation de Poisson 82

3-6-2 Méthode de Gauss Seidel 82

3-7 Résolution du système d'équations algébriques 83

3-7-1 Méthode ADI..... 83

3-8 Les conditions aux limites..... 84

3-8-1 La forme générale des conditions aux limites..... 86

3-8-2 Discrétisation des conditions aux limites..... 88

3-9 Méthode de Gauss 88

3-10 L'organigramme..... 90

CHAPITRE 4:

Résultats et discussions (Première partie)

4(A)-1 Le maillage 95

4(A)-2 Effet de vitesse du tirage..... 96

4(A)-2-1 La distribution radiale du Ti3+..... 96

4(A)-2-2 La distribution axiale du Ti3+ 98

4(A)-3 Le champ thermique 99

4(A)-4 Le champ dynamique..... 100

4(A)-4-1 La vitesse axiale 100

4(A)-4-2 La vitesse radiale 101

4(A)-4-3 La distribution radiale de la vitesse axiale..... 102

4(A)-4-4 La hauteur du ménisque……..103

4(A)-5 Effet du nombre de Marangoni 104

4(A)-5 -1 Pour les grandes valeurs du nombre de Marangoni..... 104

4(A)-5 -2 Pour les petites valeurs du nombre de Marangoni 105

4(A)-6 Etude de la forme de l'interface liquide-solide 106

4(A)-7 Effet des nombres adimensionnels..... 106

4(A)-7-1 Effet du nombre de Biot 106

4(A)-7-1-1 Pour les petites valeurs du nombre de Biot 107

4(A)-7-1-2 Pour les grandes valeurs du nombre de Biot..... 107

4(A)-7-2 Effet du nombre de Prandtl..... 108

4(A)-7-2-1 Pour les petites valeurs du nombre de Prandtl..... 108

4(A)-7-2-2 Pour les grandes valeurs du nombre de Prandtl..... 108

CHAPITRE 4:

Résultats et discussions (Deuxième partie)

4(B)-1 Présentation du Fluent……..109

4(B)-1-1 Gambit……..109

4(B)-2 Les conditions aux limites……109

4(B)-3 Le maillage……110

4(B)-4 Le champ thermique……...111

4(B)-5 Présentation du liquide et du solide dans le domaine d'étude……...112

4(B)-6 La densité……...113

4(B)-7 Etude de l'effet de la gravité sur l'interface liquide/solide……114

4(B)-8 Les lignes du courant……..115

Conclusion générale……...116

Références……..117

Résumé.

Nomenclature

$\boldsymbol{V}$ *: Vecteur de la vitesse.*

u *: Vitesse radiale (m/s).*

v *: Vitesse axiale (m/s).*

w *: Vitesse azimutale (rad/s).*

r, θ, z *: Coordonnées cylindriques.*

V *: Volume de contrôlé.*

S *: Terme source.*

Γ *: Coefficient de diffusion.*

T *: Température (k).*

T_a *: Température ambiante (k).*

C *: Concentration (atome %).*

C_0 *: Concentration initiale (atome %).*

ν *: Viscosité cinématique (m^2/s).*

α_m *: Diffusivité thermique du liquide (m^2/s).*

α_c *: Diffusivité thermique du solide (m^2/s).*

D *: Diffusivité massique (m^2/s).*

f **:** *Force par unité de masse. ($N.kg^{-1}$).*

g_0 *: Constante de gravité (m/s^2).*

g *: Vecteur de la gravité.*

β_T *: Coefficient de dilatation thermique (1/k).*

T_m *: Température de fusion (k).*

β_C *: Coefficient de dilatation de la concentration (atome %).*

ρ_m *: Masse volumique du liquide (kg/m^3).*

ρ_c *: Masse volumique du solide (kg/m^3).*

Cp_m : *Chaleur spécifique du liquide ($J/Kg\ K$).*

Cp_c : *Chaleur spécifique du solide ($J/Kg\ K$).*

k_m : *Conductivité thermique du liquide (w/m k).*

k_c : *Conductivité thermique du solide (w/m k).*

μ_m : *Viscosité dynamique du liquide ($Kg/m\ s$).*

k : *Coefficient de ségrégation.*

δ_{ij} : *Fonction delta Kronecker.*

Π_{ij} : *Tenseur des contraintes (Pas).*

τ_{ij} : *Tenseur des Contraintes visqueuses (Pas).*

p : *Pression (Pas).*

t : *Temps (s).*

ψ : *Débit volumique (m^3/s).*

ω : *Vorticité (s^{-1}).*

$*$: *Ce signe indique que les variables sont adimentionnels.*

Les nombres adimensionnels

P_r : *Nombre de Prandtl.* $P_r = \frac{\nu}{\alpha_m}$

Sc : *Nombre de Schmidt.* $Sc = \frac{\nu_m}{D}$

Ra: *Nombre de Rayleigh.* $Ra = Gr\ Pr$

Ra_T : *Nombre de Rayleigh thermique.* $Ra_T = \frac{g_0 \beta_T \nabla T_{max} R_c^3}{\alpha_m \nu}$

Ra_S : *Nombre de Rayleigh de concentration.* $Ra_S = \frac{g_0 \beta_C C_0 R_c^3}{D\ \nu}$

Gr : *Nombre de Grashof.* $Gr = \frac{g_0 \beta_C C_0 R_c^3}{\nu^2}$

Pe_m: *Nombre de Peclect pour le liquide.* $Pe_m = \frac{U_m R_d}{\alpha_m}$

Pe_c : *Nombre de Peclect pour le solide.* $Pe_c = \frac{U_c R_d}{\alpha_m}$

Bi : *Nombre de Biot.* $Bi = h\, R_d / k_m$

Introduction générale

Introduction

L'optoélectronique et la communication modernes sont basées sur de divers dispositifs dans la micro-échelle, la fiabilité de ces dispositifs est fortement affectée par les substrats des matériaux. L'ingénierie moderne nécessite des cristaux de structures et de formats bien déterminés, avec une homogénéité des propriétés chimiques, optiques et électriques ; l'homogénéité de ces propriétés est exigée pour la fabrication des systèmes optoélectroniques et de communication ***[1,58]****. Le domaine des cristaux et des fibres est un domaine prometteur* ***[2]****, il forme une des grandes bases, pour la recherche de nouvelles techniques d'élaboration et de développement pour l'optoélectronique et les applications dans les fabrications des sources de lasers et les composants de systèmes précités* ***[3]****. Du fait de leurs caractéristiques remarquables, les fibres cristallines sont considérées comme des dispositifs spécifiques d'une grande importance, en particulier les fibres monocristallines qui sont des systèmes ou bien des matériaux spécifiques de haute technicité ; elles présentent des caractéristiques thermomécaniques et optiques notables* ***[58]****. Les fibres monocristallines occupent un grand champ d'application dans divers domaines, nous citons surtout le domaine de l'optoélectronique et de la micro optique également en chirurgie et en télécommunications.*

Pour réaliser la croissance cristalline efficacement, la compréhension de la dynamique du processus présidant à cette croissance est nécessaire ***[4]****. La qualité des cristaux et des fibres monocristallines est gouvernée par beaucoup de facteurs à prendre en considération, tels que la dynamique de tirage, l'état stochiométrique, la hauteur de la zone fondue, la géométrie de l'interface etc. Pendant ces dernières années peux d'études théoriques ont été rapportées pour la réalisation de la croissance de divers monocristaux* ***[5,6]****. Certaines de ces études sont limitées aux modèles unidimensionnels de diffusion* ***[7,8]*** *dans lesquels le transfert thermique est négligé. Dans ce mémoire on réalise un travail de simulation basé sur un modèle bidimensionnel d'un couplage conduction-convection en coordonnées cylindriques pour la réalisation de la croissance cristalline de la fibre Titane Saphir par le procédé de la micro pulling-Down, ce mémoire basé sur quatre chapitres on parle de ces derniers dans l'objectif ci-dessous.*

Objectif du présent mémoire

En raison de ses avantages, les fibres monocristallines apparaissent ainsi comme éléments laser, ou amplificateurs de haute puissance. Dans notre recherche scientifique nous essayons de faire ou bien de présenter un travail dans le cadre de développer de plus

en plus les propriétés et la qualité de ces fibres. L'étude de la fibre du Titane Saphir fait l'objet du présent mémoire, en se concentrant sur l'étude des propriétés physiques de la zone fondue ainsi que sur la distribution radiale du titane dans la fibre cristalline du Saphir qui est très intéressante dans les performances de fibre considéré comme milieu actif ou milieu amplificateur et qui est un élément essentiel dans la fabrication des lasers. Les fibres monocristallines ont été élaborées par tirage à partir de plusieurs techniques (procédés cristallogenèse) ; dans cette étude nous avons choisi une nouvelle technique qu'est la technique de micro-pulling down (μ-PD). Cette dernière présente plusieurs avantages que autres méthodes, elle permet la croissance des fibres monocristallines avec des formats de très bonne qualité laser et une bonne homogénéité chimique ***[9]****. Dans cette étude on présente un travail avec un modèle bidimensionnel en coordonnées cylindriques, dans la configuration axisymétrique. Le mouvement du liquide visqueux incompressible dans la zone fondue, est conduit par les gradients de température. Ce mouvement a été considéré en résolvant les équations de Navier-Stokes, d'énergie, et de la concentration en introduisant l'approximation de Boussinesq.*

Ce manuscrit contient quatre chapitres :

Dans le premier chapitre on donne des définitions sur les fibres, le matériau utilisé Saphir dopé Titane, le laser Titane Saphir, et on présente quelque méthodes de croissance les plus utilisées. On parlera aussi de la convection dans cette zone, parce qu'il est bien connu que la convection dans la zone fondue pendant la croissance affecte la qualité cristalline de manière significative. En conséquence, le transfert de chaleur, de masse, et le flux du fluide pendant la croissance cristalline doivent être pris en compte. La forme de l'interface entre les phases joue un rôle important ***[10]*** *, elle dépend du type et du sens des phénomènes de transfert thermique et de convection, mais aussi des tensions superficielles.*

Dans le deuxième chapitre, on se concentre sur les équations fondamentales dérivées aux lois physiques de conservation en introduisant les hypothèses simplificatrices pour arriver au final à la modélisation théorique. Ensuite on réalise la normalisation des équations aux dérivées partielles qui régissent notre problème.

L'étude numérique du modèle physique, la méthode de la résolution, et le schéma choisi pour la discrétisation des équations, tous ces éléments sont décrits dans le troisième chapitre.

Nos résultats obtenus sont argumentés et interprétés dans le quatrième chapitre divisé en deux parties avec au final une conclusion de ce travail.

Chapitre 1 : Généralités et recherche bibliographique

Dans ce chapitre nous parlons brièvement sur les fibres cristallines, et le développement de systèmes laser à fibres cristallines comme milieu laser. On présente donc quelques généralités sur les lasers notamment les différents processus intervenant dans l'interaction rayonnement matière ainsi que quelques applications. Nous montrons aussi le pour et le contre entre les lasers à cristaux massifs et les lasers à fibres notamment les avantages des lasers à fibres cristallines qui ont de nombreuses applications dans le domaine de physique des lasers, et plus généralement en optique. Pour ce qui nous concerne on donnera plus de détails sur le laser Titane Saphir puisqu'il fait l'objet de notre travail.

Par ailleurs, les fibres monocristallines de saphir passent lors de leurs procédés de fabrication par le phénomène de la solidification, qui est une transition de phase au cours de laquelle ces fibres passent de l'état liquide à l'état solide, cette transformation, liquide → solide se fait en deux étapes qui sont, la germination et la croissance . La croissance se réalise à l'aide de différentes méthodes dont nous allons citer les plus importantes. En se concentre particulièrement sur les méthodes à croissance rapides, les plus utilisées comme Verneuil, Bridgman, LHPG, Czochralski, ainsi que la méthode micro-Pulling Down qui fait l'objet de notre étude. Cette dernière technique permet la croissance des fibres monocristallines et des formats de très bonne qualité laser et optique et présente plusieurs avantages que nous exposerons plus tard.

1-1 Introduction sur les fibres:

Une fibre possède généralement une forme cylindrique avec un diamètre inférieur ou égale à quelques mm **[58]**. La fibre cristalline est un milieu cristallin, long, et fin **[49]**, elle peut être amorphe comme les fibres de silice, elle peut être cristalline ou monocristalline comme les fibres grenat (par exemple le *YAG*) et les fibres de saphir. La fibre intervient dans beaucoup d'applications tels que celles d'optique, d'optoélectronique, et de manière générale en photonique, on l'utilise aussi dans les applications laser, télécommunication, et mécaniques.

1-1-1 Développement de systèmes laser à fibres cristallines

Les fibres cristallines sont longues et fines, elles combinent les avantages des cristaux et des fibres. Dans les années futures, les fibres cristallines vont s'imposer comme un nouveau milieu laser intégré dans des systèmes répondant à de multiples applications. On peut citer l'usinage de cellules solaires, l'inspection et la réparation de circuits électroniques, l'inspection par laser de processus industriels, la télémétrie… Toutes ces applications ont comme point en commun le besoin en sources de fortes puissances crête et moyenne dans le domaine des impulsions brèves (inférieures à quelques nanosecondes). Ce besoin est difficilement couvert aujourd'hui par les cristaux laser massifs **[49]**.

1-1-2 Fibres cristallines comme milieu laser

Les fibres cristallines sont un intermédiaire entre les cristaux laser classiques et les fibres de silice dopée. Ce milieu cristallin pouvant être utilisé comme guide de lumière et comme amplificateur laser. Quelques caractérisations orientées vers les applications lasers, en régime continu et en régime déclenché, aussi la caractérisation thermique des fibres cristallines sous un pompage intense pour en déduire tout le potentiel de ce nouveau milieu laser; sont bien montrées dans la référence **[51].**

Les lasers à fibre en saphir dopée titane est un bon exemple, parmi les structures lasers développées ces dernières années ; ce afin de dépasser les limites thermiques des cristaux. Ils ont largement montrés leur grand potentiel. Pour ces fibres dopées aux ions Ti^{3+}, une puissance laser de plusieurs kilowatts en régime continu a été obtenue avec d'excellentes efficacités **[23,51]**.

1-1-3 Les avantages du laser à fibre cristalline [55] :

Les fibres cristallines en particulier les monocristallines ont de nombreuses applications dans le domaine de la physique des lasers, et plus généralement en optique, qui ne sont accessibles, ni aux fibres de verres, ni aux formes monocristallines massives. Parmi leurs avantages, nous citons :

- Leur structure est ordonnée par rapport aux verres et aux amorphes.
- Les monocristaux ont une direction bien déterminés (un angle et un axe de croissance bien déterminés).
- Une Bonne conductivité thermique et section efficace d'émission.
- Milieu long et fin, donc une bonne gestion thermique.
- Guidage de la pompe.
- Mode transverse défini par la cavité.

1-2 Laser

Un laser est un appareil émettant de la lumière (rayonnement lumineux) amplifiée par émission stimulée. Donc le laser basé sur l'amplification de la lumière par émission stimulée du rayonnement. Il est descendant du maser, et dérivé de l'abréviation anglaise : « light amplification by stimulated émissions of radiation » **[40]**. La lumière qui est produite par le laser est spatialement et temporellement cohérente. Les lasers couvrent aujourd'hui toute la gamme des rayonnements électromagnétiques, des rayons X et ultraviolets aux ondes infrarouges et micrométriques. Ils sont principalement constitués de trois éléments essentiels **[59]** :

- Un système de pompage.
- Une cavité résonante.
- Un milieu amplificateur de lumière.

Le laser se distingue par trois caractéristiques principales :

- La longueur d'onde, qui peut être fixe ou accordable,
- Le régime : continu, pulsé, déclenché,
- La puissance émise, des μW aux TW.

1-2-1 Applications du laser

Le laser est un outil précieux dans l'industrie, la géodésie, la recherche scientifique, la physique de l'ultra basse température, les télécommunications, la médecine, la technologie militaire et les arts, sont les différentes applications du laser **[58]**.

1-2-2 Lasers à solides

Les lasers à solide utilisent des cristaux ou des verres dopés avec différents atomes ou ions comme milieu amplificateur de lumière (le plus ancien des lasers à solide est le laser à rubis) **[40]**. Le milieu actif se présente souvent sous forme d'une tige dont les extrémités sont parfaitement parallèles et placé à l'intérieur d'une cavité optique. Celle-ci peut être réalisée par deux miroirs ou par un dépôt de couches réfléchissant sur les extrémités de la tige (barreau laser). De tous les lasers, ce sont ceux qui fournissent le plus grand rendement de conversion de puissance. Ce type de lasers peut générer des impulsions lumineuses extrêmement brèves (de l'ordre de 10-15 (s)) en mode pulsé **[58]**. Les lasers à solide fonctionnent généralement grâce à un pompage optique, que ce soit par la lumière émise par une lampe à décharge, soit par des diodes laser ou par tout autre type de lasers. Les lasers à solide couvrent une grande partie du spectre électromagnétique, de l'infrarouge à l'ultraviolet. Ils sont capables d'émettre aussi bien dans le visible que dans l'ultraviolet (multiplication de la fréquence lumineuse dans les cristaux de phosphate de potassium par exemple) ou les rayons X (interaction des photons avec une cible en yttrium). Les lasers les plus utilisées actuellement sont les lasers *Nd:YAG* ; Titane saphir. Ces dernières années, un grand intérêt a été réservé aussi au développement d'oscillateurs à base de fibres optiques dopées terres rares, cependant leurs performances restent en dessous de celles des lasers à solide tels que le Titane-Saphir. Aujourd'hui, l'énergie maximale extraite d'un oscillateur à fibre femto seconde est de 10 nJ alors que les lasers à solide qui peuvent générer des impulsions femto secondes de plusieurs centaines de nano joules sont disponibles dans le commerce.

1-2-3 L'inversion de population

Pour que l'amplification de la lumière puisse exister, il est nécessaire que, dans le matériau, l'émission stimulée soit prépondérante et soit plus forte que l'absorption. Cela est possible, si le nombre des électrons présents dans le niveau supérieur est plus grand à celui du niveau inférieur. On dit que l'on réalise une « inversion de population ». Donc pour obtenir l'effet d'émission laser, il faut créer une inversion de population de façon à obtenir la condition $N2 > N1$ (*N1* : la population du niveau 1, et *N2* : la population du niveau 2), ceci s'obtient par les mécanismes de pompage à travers des états métastables. Le pompage consiste à excité les atomes en faisant transiter les électrons du niveau fondamental vers le niveau métastable en passant par un niveau instable.

1-2-4 Les différents processus du laser :

L'effet laser fait intervenir trois processus d'interaction rayonnement matière: l'émission stimulée, l'émission spontanée, et l'absorption. Le rayonnement cohérent dans un laser est accordé au phénomène d'émission stimulée. La condition nécessaire est la possibilité d'effectuer un passage ou une transition entre deux niveaux atomiques. On parlera ci-dessous brièvement sur ces trois processus.

1-2-4-1 L'émission stimulée :

La désexcitation de l'atome est stimulée par l'arrivée du photon incident. Le photon émis vient s'ajouter au champ incident, dans ce cas on dit il y a une amplification.

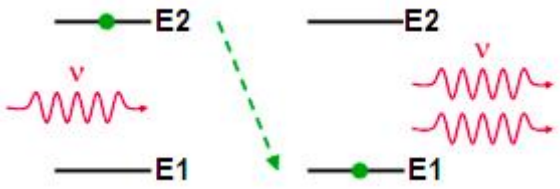


Figure1.1 : Phénomène d'émission stimulée.

1-2-4-2 L'émission spontanée :

Ce processus est le symétrique du précédent. En l'absence du rayonnement un atome dans un état excité, peut se désexciter vers un autre état ; ce avec émission d'un photon, c'est ce qu'on appelle l'émission spontanée

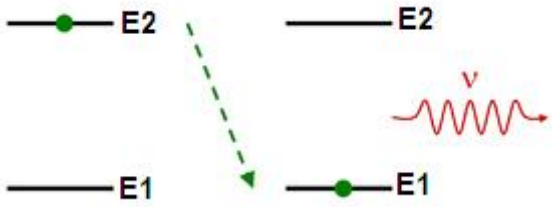


Figure1.2 : Phénomène d'émission spontanée.

1-2-4-3 L'absorption :

L'absorption d'un photon par un atome permet de produire une transition du niveau d'énergie inférieure vers un niveau supérieur.

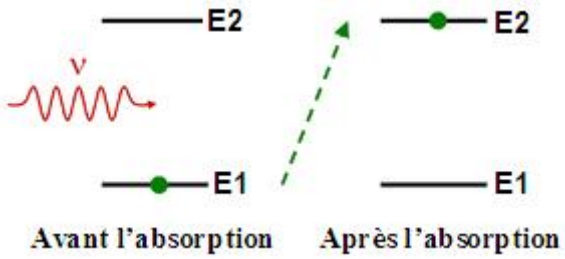


Figure1.3 : Phénomène d'absorption.

1-2-5 Lasers trois et quatre niveaux :

Les lasers sont classifiés en tant que systèmes à trois nivaux ou quatre niveaux **[73]** :

1-2-5-1 Les lasers à trois niveaux:

L'excitation des ions du niveau fondamental (1) se fait par le pompage optique vers le niveau (2) (niveau d'excitation instable). Ce dernier niveau étant instable, il désexcite rapidement vers le niveau (3) à partir duquel, les ions se désexcitent radiativement vers le niveau (1), c'est la transition laser. Dans la figure ci-dessous, on schématise un système lasers à trois niveaux :

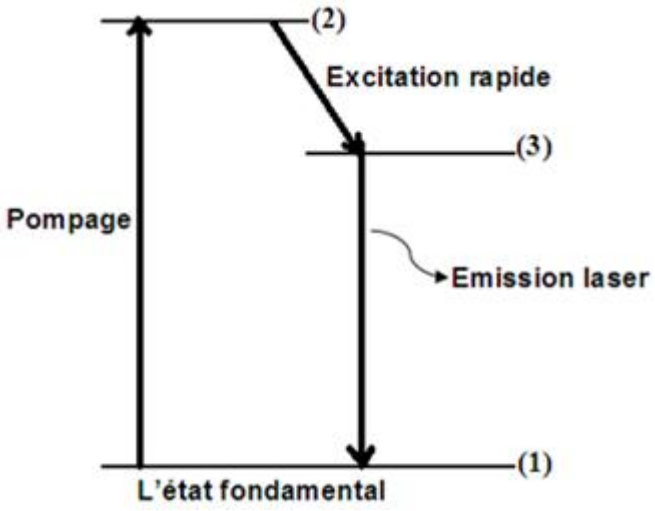


Figure1.4 : Laser à trois niveaux.

Le niveau inferieur de l'émission laser est le niveau fondamental, il est donc fortement peuplé Une puissance de pompage optique plus importante sera nécessaire pour obtenir une inversion de population. Pour éviter ceci on utilise les systèmes lasers à 4 niveaux.

1-2-5-2 Les lasers à quatre niveaux :

Nous considérerons les lasers à quatre niveaux, dans ce cas les ions luminescents se désexcitent radiativement à partir du niveau (3) émetteur vers le quatrième niveau (niveau

4). En général, le niveau (4) se situe à des énergies suffisamment élevées pour ne pas être significativement peuplé à température ambiante.

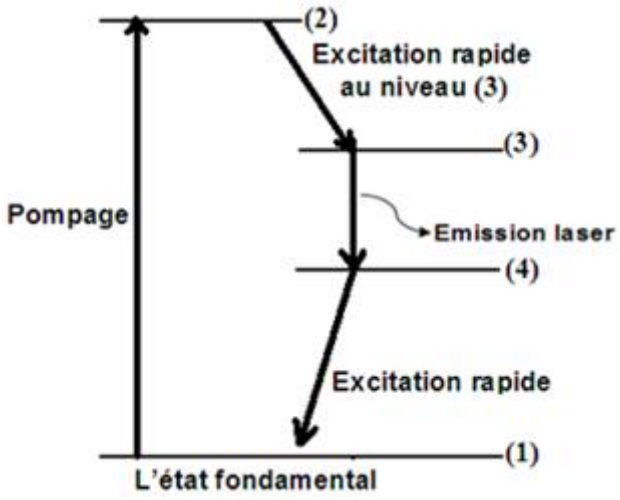


Figure1.5 : Laser à quatre niveaux.

Il est donc très facile d'obtenir une inversion de population avec des lasers à quatre niveaux en comparaison avec les lasers à trois niveaux, c'est la différence principale entre les deux ; car le niveau le plus bas de laser à trois niveaux est l'état fondamental, qui a initialement une population très grande. Il est donc beaucoup plus facile d'obtenir l'inversion de population dans les lasers à quatre niveaux.

1-3 Le Saphir

Le saphir est un cristal simple - oxyde d'aluminium (Al_2O_3), également connu sous le nom de $\alpha - Al_2O_3$, il fait partie de la grande classe des cristaux d'AlO_3. Le saphir est le matériau préféré pour des conceptions de systèmes et de composants à haut rendement, pour différentes applications. Lorsqu'il est dopé avec le titane ou le chrome, ce milieu est souvent utilisé pour des lasers infrarouges à forte capacité d'ajustage, et dans des systèmes d'amplification de lasers pour la production d'impulsions ultracourtes d'intensité très élevée. Le saphir est le meilleur choix en comparaison avec d'autres cristaux simples synthétiques ayant plusieurs champs d'applications tels que les domaines scientifiques (spectroscopique). Enfin, le saphir est présent en bijouterie car il est possible d'obtenir de nombreuses couleurs pour les pierres synthétiques.

1-3-1 Les fibres de saphir

Le saphir a des propriétés physicochimiques exceptionnels (optiques, thermiques, mécaniques et diélectriques). Pour cette raison le saphir est plus demandé dans de nombreuses applications scientifiques, industrielles, militaires et médicales. Dans les applications médicales, les fibres du saphir présentent des avantages particuliers en comparaison avec d'autres. Elles ont une grande importance, car elles ne sont pas rejetées par l'organisme. Les fibres de saphir ont des diamètres qui peuvent attendre 200 μm, sont bien flexibles et maniables et peuvent avoir un large domaine d'application en chirurgie **[74]**.

1-3-2 Le laser Titane Saphir *(Ti^{3+}, Al_2O_3)*:

Le laser Titane Saphir, est relativement récent puisqu'il a été découvert en 1986 (pour le fonctionnement en continu). Il est très pratique pour générer des impulsions ultracourtes (pour quelques femto secondes, *P~1015 W*) **[72]**. De par ses propriétés typiques, ce laser est considéré parmi ceux les plus efficaces.

1-3-3 Diagramme du niveau du Titane:

Le laser Al_2O_3 dopé titane Ti^{3+} est un laser dans lequel l'ion Ti^{3+} est inséré dans un cristal d'oxyde d'aluminium. Le laser (Ti^{3+}, Al_2O_3) est l'un des lasers les plus utilisés en raison des propriétés spécifiques de l'ion titane, caractérisé par, un seul niveau excité (^2E) comme il est illustré dans la figure ci dessous, avec notamment une bande d'absorption recouvrant presque tout le visible **[72] :**

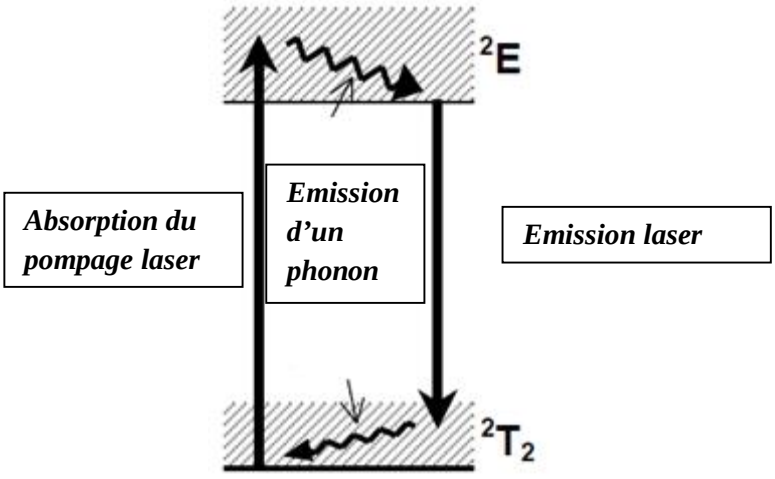


Figure 1.6 : Diagramme du niveau du l'ion Ti^{3+}.

Les électrons passants dans le milieu de la bande ^2E, se désexcitent rapidement avec l'émission de phonons au fond de la bande. L'émission du rayonnement laser se fait grâce à

l'émission stimulée lors de la transition des électrons du fond de la bande ^2E vers n'importe quel niveau se trouvant dans la bande ^2T. Les électrons transitent finalement vers le fond de la bande ^2T avec l'émission rapide de phonons.

Le laser titane saphir connaît actuellement le plus de succès avec des systèmes très compacts pompés optiquement par d'autres sources laser du commerce (par exemple *YAG:* Nd^{3+} *(à 532 nm)* doublé en fréquence, ou par un laser d'ion d'argon alternativement doublé en fréquence *(488 nm-514 nm*)). Le titane a une bande d'émission suffisamment large pour générer des impulsions ultra-courtes (de l'ordre de 6 femto secondes **[23]**).

1-3-4 La croissance cristalline du saphir :

L'amplification des impulsions ultracourtes (génération en quelques femto secondes) demande un milieu amplificateur très efficace, le saphir dopé titane est le plus pratique, et le plus utilisé pour ces applications **[75]** ; ces lasers (lasers saphir dopé titane) permettent d'obtenir des puissances de l'ordre du *kW* en continu et du *GW* en pulsé **[23]**. Le saphir a été développé en utilisant une grande variété de techniques de cristallisation. La géométrie, les grandeurs, le format et la qualité du cristal ; tous ces facteurs jouent un rôle prépondérant dans le choix de la méthode de croissance **[9]**. Plusieurs méthodes sont utilisées pour réaliser la croissance de ce matériau, on cite Verneuil, Czochralski, Bridgman. Dans cette étude on a choisi la technique de micro-pulling down pour le tirage du saphir pour ses avantages par rapport aux autres, on abordera ce point dans les parties à venir. Dans le tableau ci-dessous, nous citons quelques propriétés physiques du saphir.

Tableau1.1 : Les propriétés physiques du Saphir **[23,76] :**

Masse volumique de liquide ρ_m	3500 Kg/m^3
Masse volumique de solide ρ_c	3960 Kg/m^3
Chaleur spécifique du liquide Cp_m	765 $J/Kg\,K$
Chaleur spécifique du solide Cp_c	1300 $J/Kg\,K$
Conductivité thermique du liquide k_m	3.5 $W/m\,K$
Conductivité thermique du solide k_c	17.5 $W/m\,K$
Coefficient de dilatation thermique β_T	1.8×10^{-5} K^{-1}
Viscosité dynamique μ_m	0.0475 $Kg/m\,s$
Coefficient de ségrégation k	1

Chaleur de la fusion ΔH	$1.1 \times 10^6\ J/Kg$
Température de fusion T_m	$2323\ \ K$
Diffusivité thermique α_m	$6.4 \times 10^{-7}\ \ m^2/s$
Viscosité cinématique ν	$1.36 \times 10^{-5}\ \ m^2/s$
Le coefficient température-tension-surface $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$	$(-3.5) \times 10^{-5}\ \ Nm^{-1}K^{-1}$
Le coefficient de la tension superficielle γ	$0.3\ \ N/m$
Angle de croissance (°)	17°

Les paramètres inclus **[64, 23]** :

$R_h = 0.0275\ cm$

$R_d = 0.057cm$

$L_h = 0.33\ cm$

$L = 3cm$

$U_c = 0.3\sim1mm/\min$ (Vitesse du tirage).

$C_0 = 0.1\%$ (Concentration du dopant).

1-3-5 Contact de trois phases

Dans cette partie on s'intéresse au contact entre différentes phases et le mouillage gouverné par les tensions superficielles. A partir de ces derniers on distingue deux types du mouillage, le total et le partiel. Considérons trois phases en contact, deux sont condensées entre elles, comme dans notre cas, le liquide et le solide et la troisième phase c'est l'air ou un gaz sous atmosphère contrôlée. La résultante étant une ligne appelée ligne de contact triphasique ou ligne triple. A l'équilibre, la somme des forces s'exerçant au niveau de cette ligne s'annule, et les caractéristiques géométriques autour de la ligne triple sont déterminées (comme les angles par exemple). La loi de Neumann s'écrit comme suit :

$$\overrightarrow{\gamma_{ij}} + \overrightarrow{\gamma_{jk}} + \overrightarrow{\gamma_{ki}} = \vec{0} \qquad (1.1)$$

$\overrightarrow{\gamma_{ij}}$: La tension de surface entre la phase i et j.

1-3-6 Cas où l'une des phases est solide

Si on Considère un solide « *S* », en contact avec un Liquide « *L* » et un gaz « *V* » (*V* peut être une vapeur ou un autre liquide) ; comme il est illustré dans la figure ci-dessous :

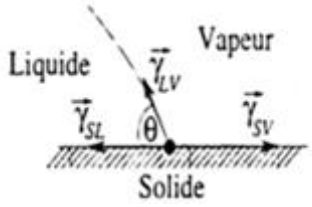


Figure 1.7 : Contact entre trois phases différentes.

Dans ce cas La loi de Neumann devient :

$$\overrightarrow{\gamma_{SL}} + \overrightarrow{\gamma_{LV}} + \overrightarrow{\gamma_{SV}} = \vec{0} \qquad (1.2)$$

Puisque la somme des forces appliquées sur la ligne triple à l'équilibre est nulle, donc quand on réalise la projection sur ligne triple ou bien le plan de la surface du solide on trouve :

$$\gamma_{SL} + \gamma_{LV}\cos\theta = \gamma_{SV} \text{ (loi d'Young)} \qquad (1.3)$$

Où : θ est l'angle du mouillage.

1-3-7 Le mouillage

1-3-7-1 Mouillage total

Si on revient au cas des trois phases fluides. La loi de Neumann ne peut être satisfaite que si l'on a:

$$\gamma_{ij} \leq \gamma_{jk} + \gamma_{ki} \qquad (1.4)$$

Si l'une des tensions de surface est plus grande ($\gamma_{ij} > \gamma_{jk} + \gamma_{ki}$) alors l'énergie de l'interface i/j est plus grande que celle de l'interface i/k d'une interface k/j. Donc à l'équilibre, on n'obtient pas une ligne de contact triphasique, mais une couche de la phase k entre les phases i et j. Dans ce cas, on dit que l'interface i/j est mouillée par la phase k c.-à-d. Il y a mouillage total.

1-3-7-2 Mouillage partiel

Dans le cas de deux phases fluides et une troisième solide, la relation (1.4) impose:

$$\gamma_{SL} - \gamma_{LV} \leq \gamma_{SV} \leq \gamma_{SL} + \gamma_{LV} \qquad (1.5)$$

Dans le cas où :

$\gamma_{SL} > \gamma_{SL} + \gamma_{LV}$ le liquide mouille le solide :

Si θ = 0. On dit que le liquide est parfaitement mouillant, le cas où la vapeur mouille le solide est beaucoup plus rare mais similaire.

Si $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ on dit que le solide est mouillé partiellement par le liquide. Sinon, quand $\theta > \frac{\pi}{2}$, dans ce cas le liquide est non mouillant.

Comme résultat on constate que la nature du liquide nous détermine les propriétés de mouillage de l'interface, ces propriétés dépendent aussi surtout de la nature de la surface solide. En général les liquides mouillent les surfaces de haute énergie qui ont des énergies de cohésion importantes, lorsque elles sont propres (métaux, céramiques, oxydes). D'un autre coté, les surfaces de basse énergie, comme les solides organiques, sont moins mouillées, car elles ont de moindres énergies de cohésion dues aux forces de Van der Waals.

Lorsque l'on dépose du liquide sur une surface solide, le comportement dépend du type de mouillage.

Si l'on a un mouillage total (θ = 0), ou un mouillage partiel ($\theta < \frac{\pi}{2}$), le liquide augmente au maximum sa surface de contact avec le solide ; par contre l'interface solide/gaz est moins favorable que l'interface solide/liquide.

Si le contact entre solide et gaz est plus favorable que le contact solide/liquide, le liquide est non mouillant sur la surface solide, alors ce dernier possède un comportement très différent : sous forme de gouttes ou de flaques ; il roule quasiment sur la surface, et ne laisse pas de traces.

1-3-8 Tube capillaire - loi de Jurin

On considère un tube capillaire, qui est un tube de petit diamètre intérieur **[60]**. Lorsqu'on plonge un tube capillaire, ouvert aux deux extrémités, dans un liquide, celui-ci "monte" (si θ < 90 °), ou "descend" (si θ > 90 °) dans le tube d'une hauteur $h(m)$ telle que :

$$h = \frac{2\gamma \cos\theta}{r\rho g} \quad (1.6)$$

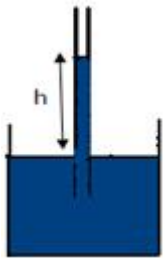


Figure 1.8 : Tube capillaire plongé dans un liquide.

Où :

r : Rayon intérieur du tube.

ρ : Masse volumique du liquide.

g : Intensité de la pesanteur.

γ : Tension superficielle du liquide (N/m).

θ : Angle de raccordement liquide/solide.

1-4 Les différents modes de transferts de la chaleur :

Les particules d'un milieu fluide pourront échanger la totalité ou une partie de leur énergie thermique, cela se fait par l'interaction directe avec les particules voisines ; ce qui correspond à une conduction, ou par l'émission ou l'absorption d'un rayonnement électromagnétique et ceci correspond au rayonnement. A l'échelle macroscopique, et dans le cas d'un liquide ou d'un gaz, les échanges résultants du mélange des diverses parties d'un fluide à différentes températures, ce mode du transfert de chaleur est appelé convection. On peut distinguer trois modes de transferts thermiques **[19]** :

- Transfert de la chaleur par conduction.
- Transfert de la chaleur par convection.
- Transfert de la chaleur par rayonnement.

1-4-1 Conduction

Dans ce mode de transfert thermique il y a une distribution homogène de l'énergie cinétique moyenne (thermique) des diverses particules par diffusion d'un gradient de température des zones où la température est élevée vers les zones où elle est plus faible. Ce processus de diffusion de la chaleur est décrit par une relation dite loi de Fourier **[20]** :

$$q'' = -K\nabla \mathrm{T} \quad (1.7)$$

q'' : Flux de chaleur dans un point considéré, q'' est une fonction linéaire du gradient de température dans ce point, il possède comme dimension celle d'une énergie par unité de surface et de temps.

K : Conductivité thermique du milieu au point considéré (tenseur symétrique du second ordre), pour un milieu isotrope, cette conductivité se réduit à un scalaire.

∇T **:** Représente le gradient de la température.

1-4-2 Convection

La convection est un mode de transfert de chaleur qui se produit uniquement au sein des milieux fluides quel que soit son état. Les transferts thermiques interviennent évidement, la convection apparait donc lorsqu'un fluide, liquide ou gaz est en mouvement. Suivant le type de mouvement des particules fluides on distingue deux formes de convection :

1-4-2-1 Convection libre :

C'est une convection naturelle dans laquelle, le mouvement du fluide est dû aux différences de températures qui existent dans le milieu et à une différence de densité entre les parties chaudes et froides du fluide (champ de force massique). Le coefficient de transfert thermique pour ce régime peut être lié à la flottabilité et aux propriétés thermiques du fluide par le nombre du Rayleigh Ra, qui est le produit du nombre de Grashof et de Prandtl **[28]**:

$$Ra_T = \frac{g_0 \beta_T T_m R_d^3}{\alpha_m \nu} = Gr.Pr \quad \text{Avec} \quad Gr = \frac{g_0 \beta_T T_m R_d^3}{\nu^2} \quad \text{Et} \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha_m}$$

Les paramètres $g_0, \beta_T, T_m, R_d^3, \alpha_m, \nu,$ sont définis dans le deuxième chapitre.

1-4-2-2 Convection forcée :

Lorsque le fluide est mis en mouvement par une force ou bien une action extérieure (simultanée et provoquée par des moyens mécaniques tels qu'une pompe ou un ventilateur…), dans ce cas le mouvement est gouverné par une convection forcée.

1-4-3 Rayonnement

Les particules (les atomes, les molécules, les électrons) des corps peuvent perdre une partie de leur énergie cinétique par émission d'un rayonnement électromagnétique. Selon la

relation de *STEFAN-BOLTZMAN*, la puissance du rayonnement thermique émis par unité de surface d'un corps noir (corps absorbant la totalité des radiations thermiques qu'il reçoit) est proportionnelle à la puissance quatrième de sa température absolue. Le rayonnement thermique, n'exige pas du support matériel pour se propager.

1-4-4 Types d'écoulements

Dans cette présentation nous allons donner une définition ou bien décrire des types d'écoulements qui correspondent à notre cas. Dans cette étude nous considérons le cas d'un écoulement d'un fluide en réalisant les hypothèses suivantes:

- Le fluide est considéré incompressible.
- L'écoulement est supposé laminaire.
- On considère le cas du régime stationnaire.

1-4-4-1 Ecoulement incompressible :

Si la masse volumique d'un fluide varie faiblement avec la température ou la pression, on dit que ce fluide est incompressible **[20]**. On peut dire aussi que la densité de ce fluide est constante (très faibles variations de densité produites par un gradient de température ou de pression).

1-4-4-2 Ecoulement laminaire :

On dit qu'un écoulement est laminaire lorsque la vitesse du fluide est faible ou que le déplacement des particules fluides se fait de façon régulière et ordonnée (Lorsque la vitesse est faible l'écoulement est régulier et laminaire) c.-à-d les lignes de courant ont un aspect régulier.

1-4-4-3 Ecoulement stationnaire :

Si les variables décrivant le mouvement d'un fluide (la vitesse, la température, la densité…) sont indépendantes du temps ce type d'écoulement est dit stationnaire. On dit qu'un écoulement turbulent (écoulement irrégulier et désorganisé) est stationnaire **s**i les variables moyennes sont indépendantes du temps **[20]**.

1-5 La solidification

La solidification se trouve au carrefour d'un grand nombre de domaines des disciplines scientifiques, tel que la science des matériaux, la mécanique des fluides et des transferts, la mécanique du solide, la physico-chimie **[12]**. Il y a de très nombreuses applications

industrielles de la solidification : coulée continue d'acier, croissance des fibres pour l'électronique et l'optoélectronique,… etc.

Dans les fluides à faible nombre de Prandtl (métaux liquides) **[13]**, l'étude et la compréhension des phénomènes du transfert de chaleur avec un changement de phase, reste crucial dans de nombreux domaines, tels que la métallurgie et l'élaboration des métaux, la géologie, la volcanologie (refroidissement du magma), l'océanographie, la croissance cristalline ou encore la sécurité des réacteurs nucléaires **[13]**.

1-5-1 Définition

La solidification est l'opération au cours de laquelle un liquide passe à l'état solide (Le passage d'une phase liquide à une autre solide). Cela peut se faire par refroidissement (cas le plus courant), ou par augmentation de la pression, ou bien par une combinaison des deux. A pression constante, la solidification des corps purs se fait à température constante, la chaleur libérée par la solidification **[2]** compense la chaleur perdue par le refroidissement. Dans le cas d'un mélange de corps purs, la température baisse en général au cours de la solidification (sauf dans le cas des eutectiques). Dans la figure qui suit, on représente une courbe de solidification :

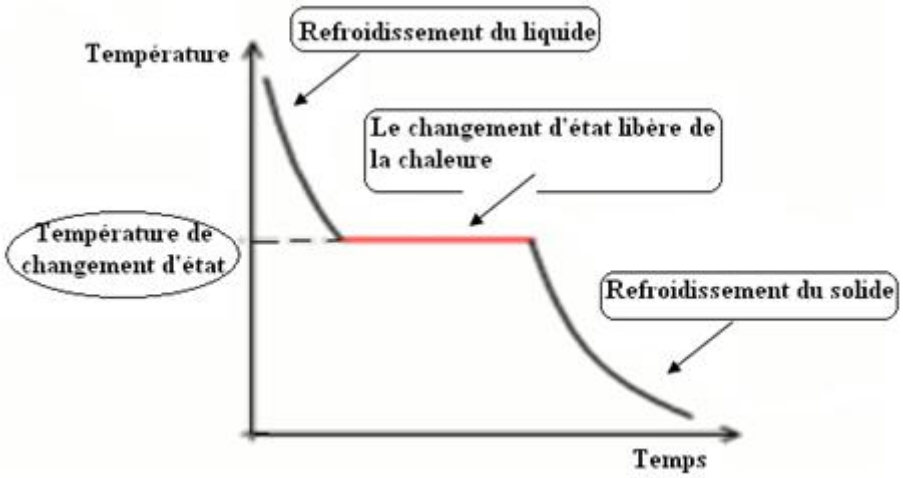


Figure 1.9 : Courbe de la solidification.

D'après cette courbe on dit que la solidification est définie comme étant le changement d'une phase liquide à une autre phase solide **[2]** ; ce changement libère une chaleur qu'on appelle la température de changement d'état, il y a donc un refroidissement

des particules liquides qui se transforment en particules on peut dire solides ; aussi un autre refroidissement du solide pour compléter cette solidification.

Dans le cas de certains matériaux, ce changement de phase produit des modifications importantes sur les propriétés mécaniques, physiques et chimiques **[14]**. L'étude de ces transformations de phase dans les matériaux se poursuit depuis plusieurs décennies afin d'améliorer la compréhension des principes de solidification.

1-5-2 Propriétés des deux phases de solidification (liquide et solide)

Les principales différences entre les deux états sont les variations de la fluidité, de la diffusivité et aussi de la densité. La fluidité c'est la faculté qu'a un matériau de prendre la forme de son récipient et on l'évalue par le taux de déformation d'un corps sous l'effet d'une force statique de cisaillement. La diffusivité est la mesure de la vitesse avec laquelle les atomes peuvent se déplacer de place en place dans un matériau liquide. La fluidité et la diffusivité varient énormément à la fusion (le liquide) car un arrangement désordonné d'atomes sans disposition régulière. **[15]** Le solide au contraire est un arrangement d'atomes suivant 3 dimensions qui se répète presque parfaitement sur une certaine distance.

1-5-3 La Structure cristalline

Le solide cristallin se forme à partir d'un liquide à une symétrie (cubique, cubique à faces centrées, hexagonale, etc.) alors que le liquide isotrope est invariant par translation **[10]**. La matière condensée peut prendre deux états solides différents, suivant les conditions dans lesquelles elle s'est formée : un état dit amorphe, dans lequel la disposition des atomes est aléatoire **[15]**, ou un état cristallisé, caractérisé par un arrangement périodique des atomes **[16]**. Les solides amorphes sont généralement appelés verres et considérés comme des liquides de très haute viscosité. Les solides cristallisés peuvent former des monocristaux, si la périodicité est ininterrompue dans tout le volume, ou des poly-cristaux, s'il existe une périodicité locale et que le solide est composé d'un ensemble de grains cristallins de taille à peu prés uniforme **[17]**.

1-5-4 La température de solidification

Une des particularités intéressantes de la transformation liquide → solide est que, pour un matériau pur, elle a lieu à une température unique qui est une caractéristique importante propre à ce matériau particulier et nommée température de solidification (elle est une fonction à la fois du liquide et du solide) **[2]** ; La température de solidification d'un matériau

pur à pression constante est invariable. A cette température, le liquide est plus désordonné que le solide et possède ainsi une entropie plus élevée que celle du solide ordonné. Il y a aussi un dégagement de chaleur lorsque le matériau passe de la phase liquide à la phase solide **[18]**. Ce dégagement de chaleur est appelé chaleur latente de fusion et est noté L.

A la température d'équilibre liquide-solide, on a :

$$\Delta G_t = \Delta H_t - T\Delta S_t = 0 \quad (1.8)$$

Où : t : Pour la transformation.

T : Température en kelvin.

1-5-5 Chaleur latente

Une relation intéressante entre la chaleur latente et la température de solidification peut être établie en appliquant les principes de la thermodynamique.

La température de solidification est définie comme étant la température à laquelle les énergies libres des deux phases sont égales **[4]**. Cela implique donc qu'à la température de solidification, le solide et le liquide ont la même énergie disponible pour effectuer un travail externe. L'équilibre entre les phases solide et liquide peut être exprimé de la façon suivante :

$$G_L = G_S \quad (1.9)$$

G_L, G_S : Energies libres de Gibbs du liquide et du solide respectivement.

L'énergie libre de Gibbs se définit par :

$$G = E - TS + PV \quad (1.10)$$

Où :

E : Energie interne de la phase.

P : Pression.

V : Volume.

On introduit la définition de l'enthalpie, l'expression d'énergie libre de Gibbs devient :

$$H = E + PV \quad (1.11)$$

$$G = H - TS \quad (1.12)$$

Où :

S : Entropie.

T : Température absolue.

En substituant l'équation (1.12) Dans l'équation (1.9), on obtient à la température de l'équilibre :

$$H_L - T_E S_L = H_S - T_E S_S \quad (1.13)$$

Où :

H_L, H_S : Enthalpie du liquide et du solide respectivement.

S_L, S_S : Entropie du liquide et du solide respectivement.

T_E : Température d'équilibre. A cette température, la valeur de la chaleur latente est :

$$H_L - H_S = L \tag{1.14}$$

Alors :

$$L = T_E \Delta S \tag{1.15}$$

Cette relation montre la variation du terme entropie qui donne naissance à une relation intéressante établie ci-dessous :

$$\Delta S = L/T_E \tag{1.16}$$

Par conséquent, on peut dire que la mesure du changement dans la température lorsqu'un liquide se transforme en solide peut-être obtenue par le rapport de la chaleur latente sur la température de solidification.

1-6 Les étapes de la solidification

La solidification se fait en général par précipitation : il y a formation de germes de phase solide au sein du liquide ; ce que l'on appelle la germination, puis une croissance de ces germes avec divers méthodes de croissance. Il y a donc deux étapes pour fabriquer les fibres cristallines pendant la transition liquide-solide **[2]** :

- **La germination** : la formation des germes de la nouvelle phase (La nucléation).
- **La croissance** des germes.

La création de l'interface pour réaliser la germination et la croissance se produit par l'adjonction de particules sur l'interface entre les deux phases. La connaissance du comportement de la création et de la croissance des germes nous informe également sur les propriétés mécaniques du matériau solidifié **[10]**.

1-6-1 La germination

Pour la compréhension du phénomène de solidification, l'étude de la germination est un élément essentiel pour comprendre cette opération **[4]**. La germination peut être définie comme la formation d'une nouvelle phase dans une région distincte. Dans le cas de la

solidification, la germination imp1ique la formation d'une petite particule de solide entourée de liquide **[2]**. La nucléation c'est la première étape de la solidification ; il s'agit de l'apparition des germes solides autour desquels commence le changement d'état, on dit que la solidification se produit lorsque la goute atteint une température inférieure à la température de solidification qui correspond à la formation d'un nucleus stable.

1-6-1-1 L'importance de la germination

Puisque la structure finale du matériau solidifié dépend de la germination, elle a donc une grande importance et une influence sur la microstructure finale de fibre cristalline ou du monocristal tiré. En effet, le nombre de germes qui se forment et grossissent détermine la taille finale des grains **[4]**.

1-6-1-2 Les types de germination

Il existe deux types de germination:

- la germination homogène.
- la germination hétérogène.

Dans le cas où la germination est homogène, les germes solides se forment au sein de la phase liquide. Alors que, dans le cas de la germination hétérogène, ils se créent au contact de la paroi froide de la lingotière ou de particules étrangères baignent dans le liquide.

Si un matériau doit se solidifier à partir d'une substance étrangère, que ce soit le moule ou les impuretés insolubles, il est indispensable que la surface de cette substance, soit mouillée par le matériau liquide **[2]**. Une fois cette condition satisfaite, il faut encore que le liquide se solidifie facilement au contact de substance. Pour cette raison, l'angle de contact entre la substance et le matériau qui se solidifie est un concept théorique important en germination. Lorsque l'angle de contact est petit, l'interface entre le solide et la substance a une faible énergie de surface **[4].**

1-7 La croissance :

1-7-1 Les méthodes à croissance rapide :

Dès que la germination se produit, la croissance des cristaux commence; les structures qui se développent peuvent être reliées aux conditions de croissance**.** Dans cette partie nous décrivons quelques techniques de croissance qui dépendent de la transformation liquide-solide, on cite particulièrement les méthodes à croissance rapide, l'opération dans ces mécanismes de croissance se fait à des températures élevées avec des vitesses de l'ordre du (mm/h), la croissance se fait à partir d'un bain fondu pour tirer des gros monocristaux.

1-7-2 La méthode Verneuil :

Au début du 20ème siècle, exactement en 1904 (à l'Académie des Sciences), le professeur A. Verneuil (Le fondateur de la cristallogenèse scientifique) décrit dans un compte-rendu une technique de croissance par fusion à la flamme qui lui permet d'obtenir les premiers monocristaux de saphir et de rubis **[77]**.

Ce procédé de fusion à la flamme est resté pratiquement inchangé jusqu'à ce jour. Les cristaux de joyaux sont largement fabriqués par cette méthode.

1-7-2-1 Les avantages de cette méthode :

- L'absence de creuset.
- La possibilité d'obtenir de très hautes températures *(> 2000° C*).
- Sa simplicité qui lui a conféré un développement industriel exceptionnel.

1-7-2-2 L'appareillage et le principe de la méthode Verneuil :

Citons les composantes principales de la méthode Verneuil :

- Un réservoir de poudre du matériau à cristalliser, avec un mécanisme d'alimentation de ce dernier.
- Deux sources, l'un de l'oxygène et l'autre d'hydrogène.
- Un moufle réfractaire.
- Dispositif de déplacement du cristal.

Avant la cristallisation du matériau, il faut passer par l'étape de fusion de la poudre de ce matériau à cristalliser, cela se fait au moyen de la flamme d'un chalumeau oxhydrique, après le passage dans le chalumeau, la cristallisation de la poudre fondue se fait sur le germe qui est placé sur un support mobile.

Le rôle du moufle réfractaire cité ci-dessus c'est la protection du ce support. La figure suivante représente les composantes de cette méthode d'après la référence **[23] :**

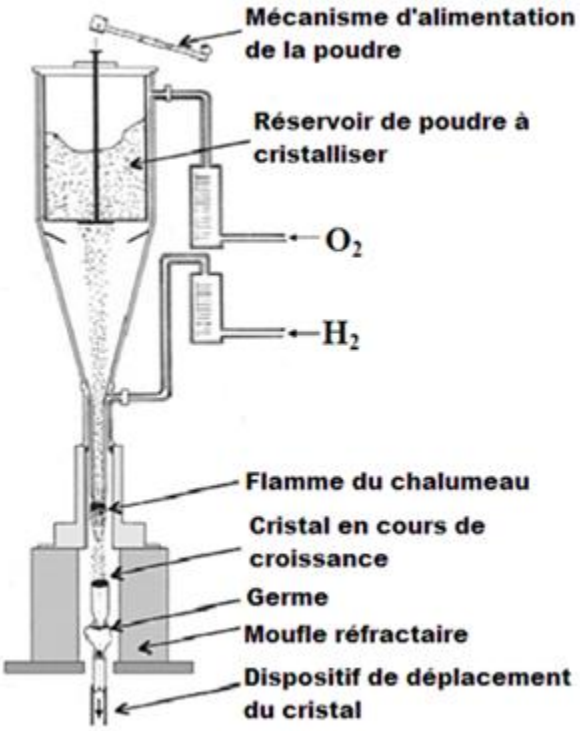


Figure 1.10 : Principe de la méthode Verneuil.

1-7-2-3 Les inconvénients de cette méthode :

- La vitesse de croissance est de l'ordre du cm/h, ce qui génère des contraintes, c.-à-d. qu'à cause de la grande vitesse il y a un entraînement important des contraintes dans le cristal, ce qui donne une qualité cristalline pas toujours excellente.
- les forts gradients thermiques générant des contraintes et les inclusions de gaz expliquent la mauvaise qualité cristalline.

1-7-2-4 La découverte du premier cristal laser par la croissance Verneuil

Le premier cristal laser a été découvert en 1960 (le rubis ou alumine dopée chrome), $Al_2O_3:Cr^{3+}$ est obtenu par la croissance Verneuil, le développement de la cristallogenèse des cristaux pour l'optique est lancé par cette dernière et c'est grâce au rubis que fut mis en évidence expérimentalement l'effet Laser **[34]**.

1-7-3 Technique de Bridgman-Stockbarger

La méthode verticale de Bridgman *(VBM)* a été premièrement développée en 1923 **[78]**. Maintenant elle est l'une des meilleures et usuelles techniques pour la croissance des cristaux de semi-conducteur **[21].** Cette méthode d'élaboration de monocristaux, est basée sur le principe du forçage de la solidification progressive à partir d'un germe unique ; elle permet d'obtenir des cristaux de très bonne qualité ; et consiste à placer un creuset dans un

four et à solidifier le matériau du bas jusqu'en haut ; cela dans le cas d'un procédé vertical. **[32]**. On peut dire qu'il y a trois possibilités pour réaliser cette technique :

- La première (Le four est fixe) : c.-à-d qu'on réalise un déplacement d'échantillon du haut vers le bas, et on fixe le four.
- La deuxième (l'échantillon est fixe) : dans ce cas il y a un déplacement du four du bas vers le haut.
- La troisième (four et échantillon sont les deux fixes) : et ça cela se fait par une modification de la température du four.

Mais pour minimiser les vibrations au niveau de l'interface de solidification (interface liquide / solide), il est préférable de déplacer le four. Les vitesses de déplacement se situent entre 1 et 30 mm/h **[33].** L'avantage de cette méthode est que la section de l'échantillon peut être carrée, rectangulaire, ou circulaire **[2]** puisqu'elle correspond à la forme du moule ou du creuset; cette technique permet d'une part de faciliter la germination des monocristaux et d'autre part d'obtenir des monocristaux d'orientation déterminée. On peut citer quelques précautions qui doivent être prises lors de l'utilisation de cette méthode **[32]** :

- Evitement de la contamination du matériau, en utilisant un creuset de matériau compatible avec le cristal élaboré.
- La densité du matériau liquide ne doit pas être très différente de celle du solide.
- Les matériaux et les conditions de croissance nécessaires doivent présider au choix du mode du chauffage ; utilisation de chauffages résistifs ou de chauffages inductifs.

L'utilisation d'un chauffage par induction permet de bien délimiter les deux zones, la zone de chauffe et la zone de refroidissement. Ceci assure un bon gradient de température et une interface solide-liquide la plus homogène possible. Le matériau à cristalliser placé dans un creuset est chauffé à une température supérieure à la température de fusion *(Tf)* ; ce à l'aide d'un inducteur couplé à un générateur Haute Fréquence comme il est montré ci-dessous **[41]**:

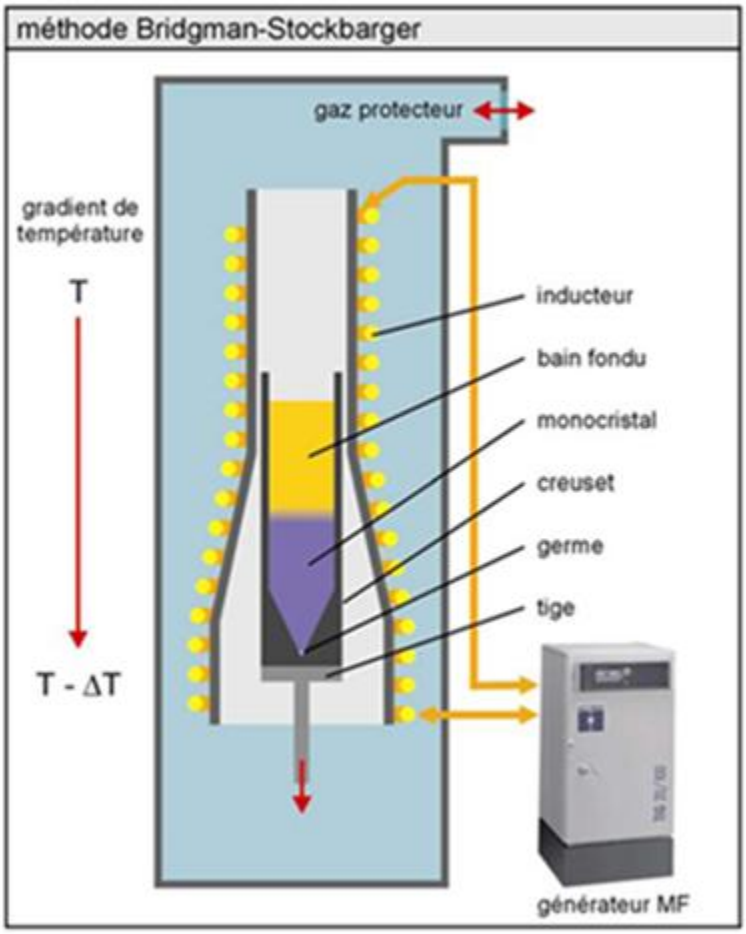


Figure 1.11 : Illustration schématique de la méthode Bridgman-Stockbarger.

1-7-3-1 L'utilisation de La méthode Bridgman-Stockbarger :

La méthode Bridgman-Stockbarger est particulièrement adaptée à une cristallisation industrielle : gros cristaux, cristaux en forme ou plusieurs cristaux simultanément. Parmi les cristaux pour l'optique, tels que les fluorures *($LiYF_4$, MgF_2, CaF_2, BaF_2,…)*, quelques monocristaux d'oxydes peuvent également être obtenus par la méthode Bridgman *($YAlO_3$, $Bi4Ge_3O_{12}$, Y2O3,…)*. La croissance de monocristaux d'oxydes se heurte néanmoins à la problématique du creuset et en particulier souvent au démoulage difficile des cristaux **[41]**.

1-7-4 La technique LHPG :

Cette méthode (*LHPG* : *technique de la zone flottante par un chauffage laser*) est conçue pour la croissance de fibres de diamètre ≤ 1mm ; en générale elle permet d'élaborer des matériaux fibrés, cristallins, ou céramiques sur lesquels il est possible de contrôler les compositions, les propriétés physico-chimique et mécanique **[22]**.

Dans cette technique, la zone fondue est créée entre un barreau source de composition proche de celle du matériau ; elle est maintenue en équilibre par les forces de tensions superficielles. Dans ce procédé on a la possibilité de travailler dans un domaine de température élevée (jusqu'à 4000^0C) **[23]**. Ces deux derniers éléments sont comptés parmi les avantages de cette méthode, on cite ici entre autres :

- La possibilité de réaliser la croissance de matériau à fusion non congruente.
- Une très faible quantité de matière à l'état liquide à un instant donné, limitant les problèmes de volatilité ou de décomposition de certains éléments.
- L'absence de contamination du cristal par un creuset éventuel.
- La limitation des problèmes de ségrégation.
- Les faibles tailles de ces matériaux élaborés et donc le faible coût en matière première.

La figure suivante est une illustration schématique de la technique *(LHPG)*.

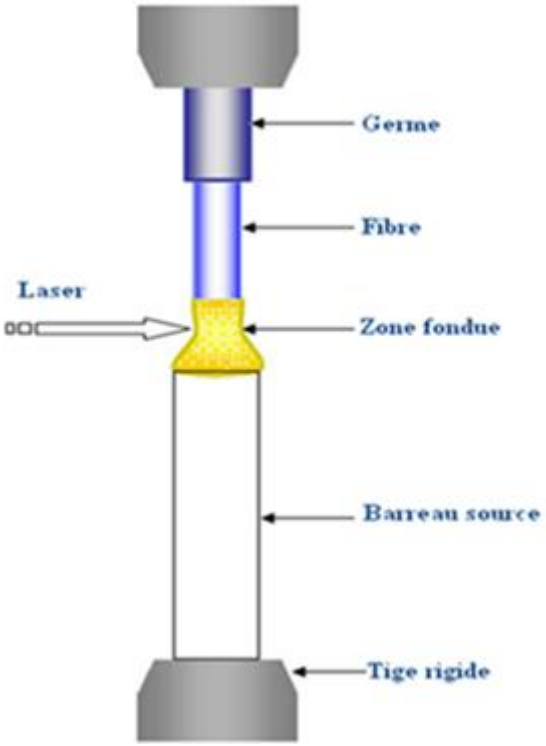


Figure 1.12 : Schéma de la technique LHPG.

Ce shéma ci-dessus nous montre que les barreaux sont montés sur des tiges rigides ; lesquelles ont trois degrés de libertés, ce qui permet un alignement horizontal des barreaux et une translation verticale très précis.

Pour obtenir une fibre on réalise une translation des deux barreaux germe et nourricier vers le haut, dans la même direction avec des vitesses de tirage comprises entre quelques mm/h et quelques mm/min. On peut suivre la croissance du cristal par caméra et microscope (binoculaire) pour contrôler latéralement et transversalement l'alignement des barreaux **[22].**

La présence de gradient thermique élevé dans la zone fondue permet donc d'accéder à des vitesses de tirage supérieures à celles couramment rencontrées en tirage Czochralski **[24]**. A cause des forts gradients thermiques dans la zone fondue, il apparaît des contraintes importantes proches de l'interface et ça qui se présente un inconvénient de cette méthode.

1-7-5 La technique d'épitaxie

L'épitaxie est une technique de croissance orientée, de deux cristaux, l'un par rapport à l'autre possédant un certain nombre d'éléments de symétrie communs dans leurs réseaux cristallins. On distingue l'homo- épitaxie, qui consiste à faire croître un cristal sur un cristal de nature chimique identique, et l'hétéro- épitaxie, dans laquelle les deux cristaux sont de natures chimiques différentes.

Cette technique est utilisée pour faire croître des couches minces (quelques nanomètres d'épaisseur). Pour cela, on utilise une surface parfaitement polie d'un monocristal, le substrat sur lequel seront déposés d'autres atomes est choisi de façon à avoir des paramètres de maille proches de ceux du cristal que l'on veut obtenir.

En phase liquide L'épitaxie utilise le principe de la méthode de Czochralski. Le substrat est mis en contact avec une phase liquide sursaturée en l'élément voulu, qui se précipite et cristallise sur le substrat. Cette technique a l'avantage d'être rapide, mais elle est moins précise que les épitaxies en phase vapeur. Les éléments à déposer, contenus dans des creusets à haute température, sont évaporés et vont se déposer par transport thermique sur la surface du substrat, plus froide mais de température quand même assez élevée pour permettre le déplacement et le réarrangement des atomes. Les applications de l'épitaxie sont multiples : jonctions semi-conductrices, la micro-électronique, etc.

1-7-6 La méthode de Czochralski :

La première expérience du tirage par cette méthode a été réalisée par Jan Czochralski en 1916 ; il a réalisé le tirage d'un fil d'étain monocristallin à partir d'un bain fondu **[31, 76]**. La méthode de Czochralski est la méthode la plus utilisable pour l'élaboration de monocristaux ; surtout le silicium monocristallin et autres semi-conducteurs **[32]**.

Dans le cas des oxydes utilisés notamment dans le cadre d'applications laser, cette méthode est l'une des seules permettant d'obtenir de gros monocristaux de qualité optique suffisante. Ce procédé consiste en une solidification dirigée à partir d'un germe monocristallin de petite taille.

Dans cette technique le tirage du germe se fait vers le haut, le matériau à élaborer est d'abord porté à la fusion dans un creuset. Le matériau utilisé, fondu à une température juste au-dessus du point de fusion du creuset, avec un gradient de température contrôlé, le liquide se solidifie et remonte par capillarité sur le germe **[41] (**formant un ménisque et créant une interface triple liquide-solide-gaz **)** en gardant la même organisation cristalline (épitaxie) en le faisant tourner à vitesse très lente (une rotation avec des vitesses de l'ordre du degré par heure **[57]**), de manière à homogénéiser le bain et à contrôler la forme de l'interface solide/liquide **[15].** Pour les matériaux non dopés les vitesses de tirage utilisées en technique Czochralski sont de l'ordre de quelques mm/heure. En cas de dopage, notamment en vue d'un effet laser (Néodyme dans *YAG* par exemple), il est nécessaire de diminuer fortement ces vitesses jusqu'à quelques dixièmes de mm par heure **[36]**. Cette réduction a pour effet d'éviter les défauts liés à des phénomènes locaux de surfusion (appelés striations) et d'obtenir une concentration en dopant la plus homogène possible dans le cristal. Le principale avantage de cette technique est que l'interface solide/liquide n'est pas en contact avec le creuset (ou bien le moule) et qu'il n'y a pas limitation à la dilatation ou à la contraction du matériau **[2]**. Comme inconvénient, on peut noter que la section de la fibre cristalline obtenue varie habituellement à moins que l'on contrôle et régule avec soin la vitesse du germe cristallin et la température du bain. L'opération se passe sous atmosphère neutre (argon ou azote) pour éviter l'oxydation.

La mise au point d'une machine de tirage performante nécessite une régulation fine du générateur alimentant l'inducteur associé à un dispositif de pesée extrêmement stable et sensible **[41]**.

Ci-dessous un schéma illustratif présentant la méthode de Czochralski avec un générateur Haute Fréquence (de la société *HÜTTINGER(2003)*. **[41]**). Ces générateurs se caractérisent particulièrement par leur stabilité à long terme et leur faible taux de pannes, ce qui nous permet d'obtenir des paramètres de fonctionnement et de régulation très stables.

:

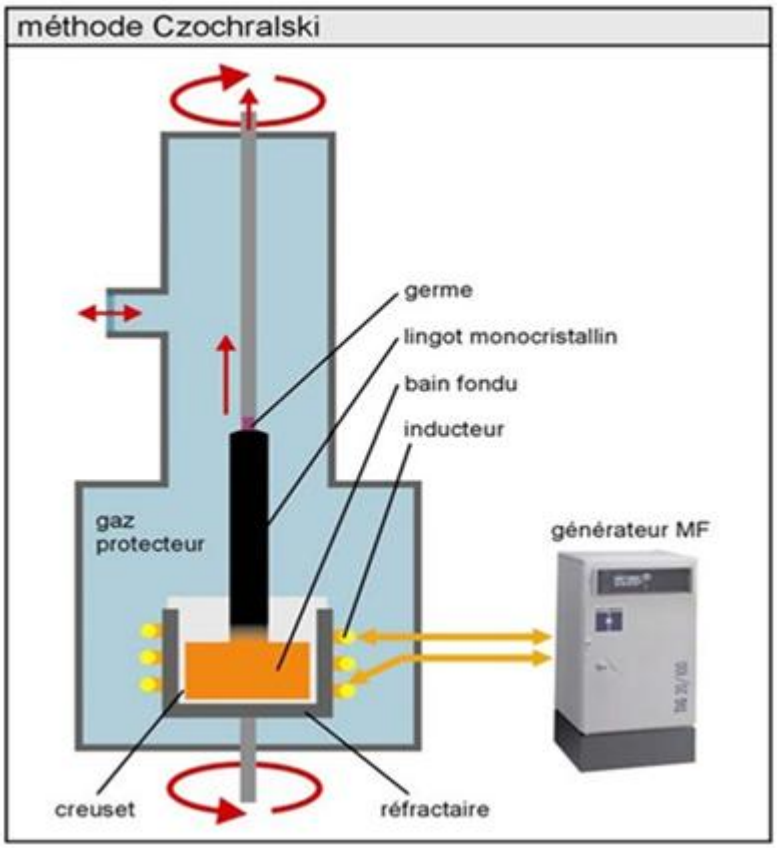


Figure 1.13 : Illustration schématique de la méthode Czochralski.

1-7-6-1 L'utilisation de cette méthode:

Parmi les méthodes les plus utilisées dans le cadre des applications laser et qui permettent d'obtenir de gros monocristaux de bonne qualité optique, on a la méthode de Czochralski. Cette technique utilise un procédé de croissance de monocristaux de grande dimension (plusieurs centimètres) **[15]**. Ces monocristaux « géants » sont utilisés dans l'industrie électronique (cristaux semi-conducteurs de silicium dopé), pour les études métallurgiques. On peut aussi faire croître des germes artificiels.

Après la première découverte du cristal laser par la croissance Verneuil. En 1961, l'effet laser est obtenu à *1,064 μm* par tirage Czochralski dans un monocristal de $CaWO_4$ dopé *Nd* **[43].** Czochralski est l'un des processus les plus stables dans l'industrie pour accroître des monocristaux du saphir (Al_2O_3) de bonne qualité **[45]**. Actuellement cette méthode est une technique du choix pour élaborer des monocristaux d'excellente qualité optique comme *(YAG, $LiNbO_3$, $LiTaO_3$, BGO, GGG,…)*.On cite particulièrement les aluminates $(YAlO_3, LaMgAl_{11}O_{19})$, silicates $(Y_2SiO_5, Gd_2SiO_5, Lu_2SiO_5)$, germanates

($Bi_4Ge_3O_{12}$, $Bi_{12}GeO_{20}$), vanadates *(YVO_4)*, borates *($YCa_4B_3O_{10}$, $GdCa_4B_3O_{10}$)*, tungstates *($CaWO_4$)*, mais également les fluorures *($LiYF_4$)* **[35]**.

Nous citons dans les paragraphes suivants quelques travaux à la méthode Czochralski, on présente aussi quelques résultats obtenus :

I.Ch. Avetissov, et al. 2009 :

En 2009 I.Ch. Avetissov, et *al* ont présenté une étude expérimentale dans la référence **[29]** sur le contrôle de vibration axiale *(AVC)* appliquée à la croissance cristalline de la technique de Czochralski. Ils ont montré que le contrôle de vibration contribue à stabilisation de la température dans le creuset et à l'augmentation du gradient thermique simultanément près de l'interface de croissance ayant une influence directe sur la cinétique de croissance. Lors de la croissance du monocristal du $NaNO_3$, ils ont pu déterminer les paramètres pour lesquels les écoulements vibratoires suppriment les écoulements de thermoconvectionelle et changent la forme de l'interface de croissance pour les cristaux conventionnels de Czochralski.

L'installation de leur dispositif de croissance consiste en un four et un creuset transparent afin de visualiser le processus de croissance en temps réel.

Ci-dessous un exemple du dispositif d'arrangement pour la croissance cristalline par Czochralski utilisée dans la référence **[29]** :

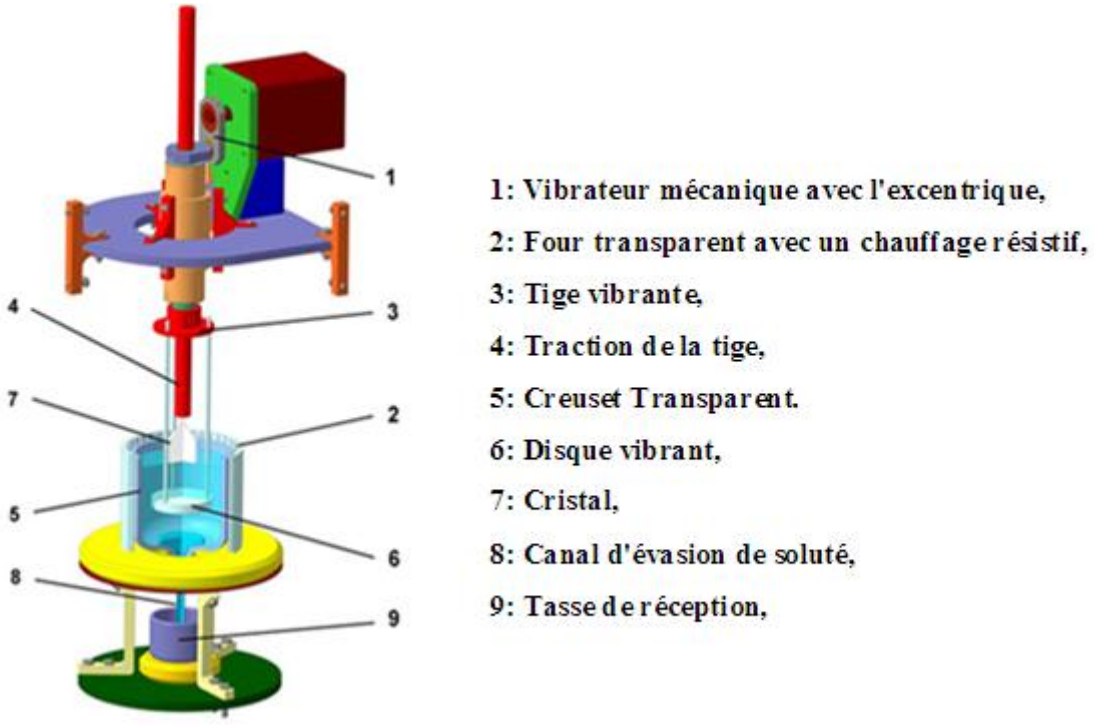


Figure1.14 : L'arrangement de l'installation pour le dispositif de croissance Czochralski.

A.Raufeisen, M.Breuer et al. (2009) [44]:

Dans ce travail, A. Raufeisen et *al* ont réalisé une étude numérique sur le mouvement de la jonction triphasée explicitement (la jonction triphasée, c.-à-d. : la ligne où le liquide, le cristal et l'atmosphère environnante). Dans un premier lieu, le mouvement a été limité aux directions horizontales. Ils ont pu quantifier, de façon précise, plusieurs effets qui se produisent lors du processus de croissance cristalline de Czochralski, En l'occurrence la l'augmentation du diamètre du cristal tiré. Des prévisions de *LES (Large-Eddy Simulations)* de la croissance cristalline de silicium par le processus de Czochralski *(Cz)* ont aussi été réalisées en 3D avec succès et ceci pour la première fois.

Chung-Wei Lu et al. (2010) :

En 2010 Chung-Wei Lu et *al* ont exposé une étude numérique dans la référence **[45]**, sur la croissance cristalline du saphir dans un four avec un chauffage du type inductif. Ils ont utilisé la méthode Czochralski. Ils ont calculé numériquement la forme de l'interface liquide/solide, ils ont trouvé que cette interface est déterminée principalement par le transfert de chaleur dans le système de la croissance, et ils ont pu montrer que les grandes valeurs de la température et de vitesse du tirage diminuent la convexité de cette dernière (l'interface liquide/solide).

1-8 la technique micro-pulling down *µ-PD* :

La technique « micro-Pulling Down » *(µ-PD)* est une technique utilisée pour tirer vers le bas des cristaux et des fibres monocristallines **[9]**. Elle est devenue une des méthodes principales pour la croissance des fibres cristallines de bonne qualité **[11]** avec des formats contrôlés imposés par la géométrie du capillaire au fond du creuset, (la forme de la fibre tirée dépend de la géométrie du capillaire) **[51].** Le tirage des fibres monocristallines se fait à partir d'un germe orienté, qui est en connexion avec une goutte pendante, c'est pour cela qu'on dit que cette méthode est dérivée de la goutte pendante. Elle a été inventée par Ricard et *al* à la fin des années 60 **[23]**. A l'Université Tohoku de Sendaï (Japon), le Professeur Fukuda **[52]** l'a répétée, réformée, et l'a aussi améliorée. La technique micro-pulling down implantée au Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux Luminescents *(LPCML)* à l'Université Lyon en France par le Docteur K.Lebbou **[53]**. Plusieurs types de nouvelles fibres et de monocristaux ont été cristallisés en utilisant cette méthode avec une excellence commande du diamètre et une homogénéité de concentration **[79]**.

1-8-1 Le principe de la méthode de micro-pulling down *µ-PD* [51]:

La fusion de matière première se fait dans un creuset en platine ou en iridium. La fibre formée par le contact du germe avec le liquide se trouvant dans ce creuset, et passant par capillarité vers le bas à travers le canal micrométrique. L'alignement du germe est piloté par des micro-déplacements xyz. Le tirage s'exécute vers le bas avec des vitesses contrôlées.

Pour suivre la procédure de tirage on utilise une caméra CCD **[11]**. Pendant le tirage il faut conserver l'équilibre du liquide (liquide-goute) qui à l'intérieur du creuset est déjà fondu par chauffage inductif ou résistif. On peut aussi contrôler la géométrie de l'interface de cristallisation et l'épaisseur de la zone fondue.

La hauteur du ménisque dépend de la position verticale du germe cristallin **[9]**.

La figure suivante illustre le principe de la goutte pendante, et un exemple de connexion réelle **[23]**:

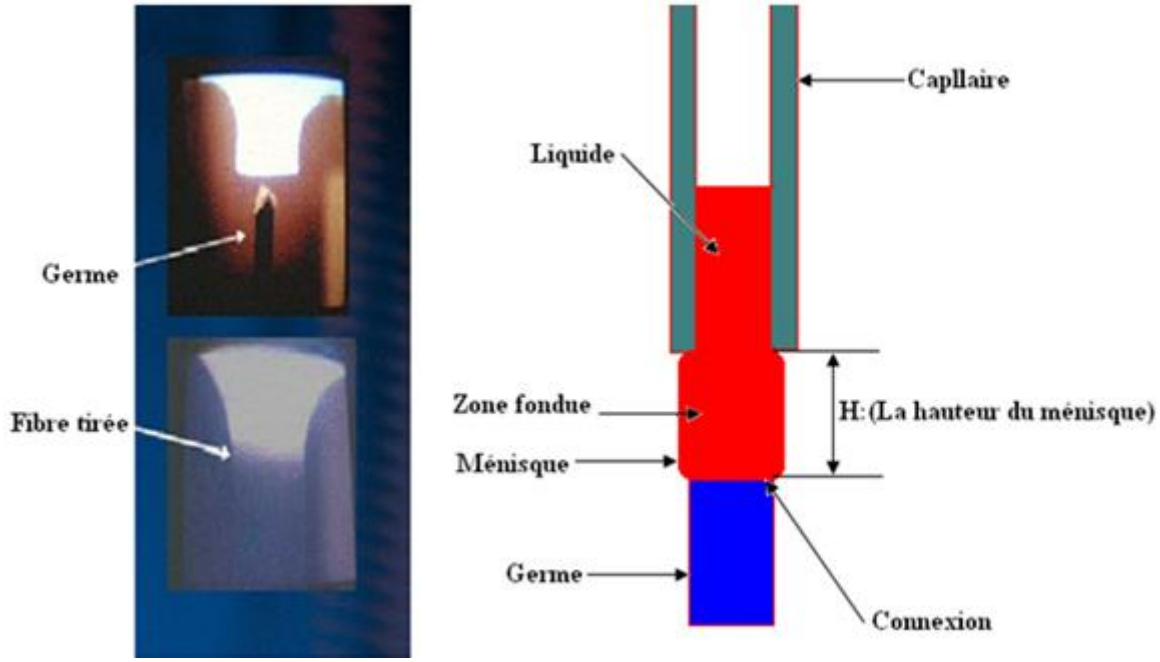


Figure1.15 : Principe de la goute pendante avec un exemple de connexion réelle.

1-8-2 Dispositif expérimentale de la technique *µ-PD* :

Dans cette présentation on donne le descriptif de l'appareil *µ-PD* qui nécessite différents accessoires **[3]** ; on cite parmi ses composantes les suivantes :

- Un creuset.
- Un matériau source.

- Un support autour du creuset, de même type que ce dernier (After heater).
- Une construction céramique autour de creuset et de l'after heater pour minimiser les pertes de température et contrôler les gradients de température.
- Un générateur radio fréquence pour le chauffage.
- Pour le tirage on utilise un Moteur de translation.
- Une caméra CCD pour suivre la procédure de tirage.

Dans la figure ci dessous on représente la procédure micro-pulling down d'après la référence **[3]**:

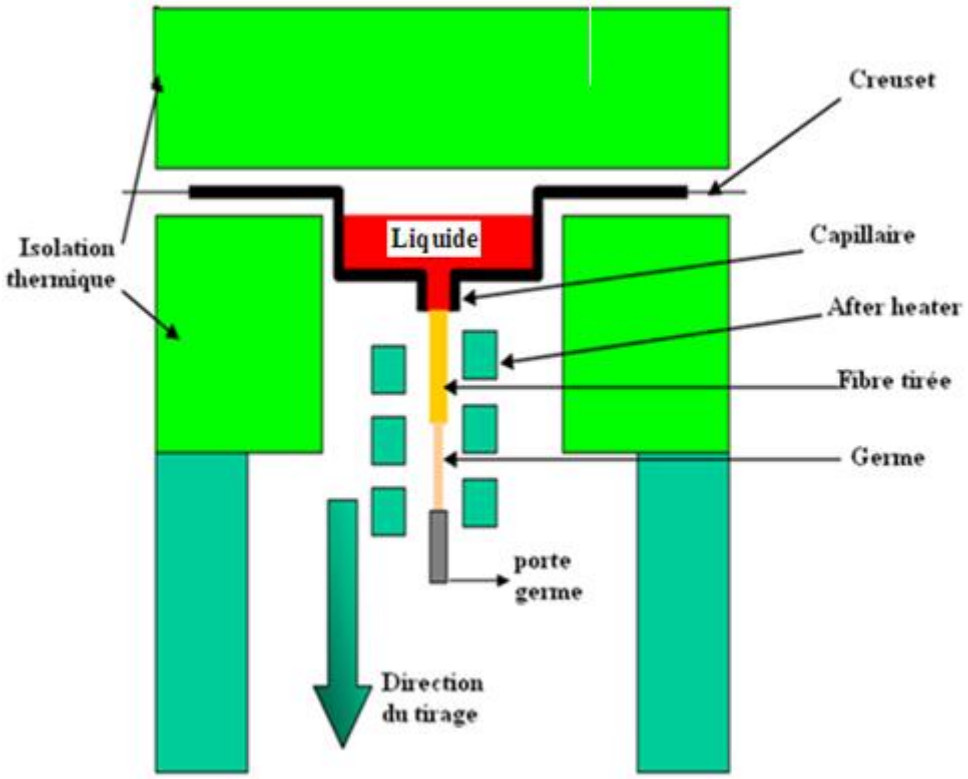


Figure1.16 : Illustration schématique de la technique de micro-pulling down.

1-8-3 Opération de tirage du saphir par la technique de micro-pulling down:

On cite dans cet exemple les étapes de l'opération du tirage du saphir par la technique de micro-pulling down, (se sont des étapes réalisées expérimentalement **[23]**). La première étape consiste en la fusion de matériau dans le creuset.

Le protocole de tirage est le suivant :

- Une installation du creuset dans la chambre ; puis le remplissage par le gaz Argon bien sûr après l'opération du vide si l'on veut travailler sous atmosphère contrôlée.

- la génération d'une goutte dans le capillaire, se faisant en chauffant le creuset par induction; ce jusqu'à la fusion de cette goutte.
- Connexion du germe à la goutte.
- La dernière étape c'est le démarrage de l'opération du tirage vers le bas. Au cours de cette dernière, il faut contrôler les paramètres suivants :

  - ✓ Puissance de chauffage.
  - ✓ Vitesse de translation (tirage).
  - ✓ Hauteur du ménisque.

Pour suivre la procédure du tirage on utilise une caméra. D'après la référence **[39]** on illustre la chambre et la caméra CCD avec un exemple d'une fibre tirée :

Figure1.17 : L'appareillage de la technique micro-pulling down au LPCML en France.

1-8-4 Le type du creuset

Le matériau est fondu dans un creuset (en platine ou en iridium par exemple). Il faut donc prendre en considération le type de creuset, donc le choix dépend de la température de fusion du matériau **[51].** Les fibres peuvent être tirées sous atmosphère contrôlée pour éviter la détérioration des creusets. Le creuset doit être compatible avec le liquide (pas de réaction chimique creuset-charge **[23]**).

1-8-5 Les principaux avantages de la technique *µ-PD* :

La technique *µ-PD* présente les avantages suivants :

- ❖ Les gradients de température sont contrôlés au niveau de l'interface solide-liquide ce qui minimise la propagation de défauts, (Contrôle de la

forme de l'interface liquide-solide).

- Les coefficients de ségrégation (k) sont pratiquement égaux à l'unité si les vitesses de tirage sont suffisamment élevées **[23]**.
- La méthode μ-PD permet l'obtention de fibres cristallines avec une bonne homogénéité chimique **[51]**. Pour les applications en optique, les cristaux sont dopés avec des ions actifs généralement des terres-rares. Il est difficile d'avoir une bonne homogénéité du liquide et une parfaite distribution des dopants dans le cristal, en particulier au cours du tirage par les techniques Czochralski et Bridgman alors qu'avec la méthode *μ-PD* il est possible d'améliorer l'homogénéité du cristal.
- Possibilité d'utiliser des concentrations très élevées en dopants dans le cristal. Les cations peuvent être figées dans le solide en raison des vitesses de tirage élevées ; ce qui permet d'élaborer des cristaux non congruents.
- Procédé rapide et flexible, il peut être adapté au tirage des matériaux à fusion congruente et non congruente **[51]**.
- Possibilité de faire croître des fibres de grande longueur.
- Rapidité de la croissance, ce qui réduit le coût des cristaux par rapport à d'autres techniques (Czochralski, Bridgman).
- Rapport Longueur/Diamètre inaccessible aux techniques classiques **[50]**.
- Stabilité du diamètre des fibres.
- Excellente qualité cristalline **[55]**.
- Les puissances de chauffe sont plus faibles que dans les autres méthodes de fabrication des monocristaux **[51]**.
- Faible cout de la matière première.
- Possibilité de cristaux préformés.

1-8-6 Conservation de masse et de chaleur et la stabilité de la zone fondue :

Dans l'ordre de croître une fibre stable avec un diamètre constant ; trois principes fondamentaux pour la croissance cristalline de fibre **[9] :** Conservation de la masse, Conservation de l'énergie, stabilité mécanique du système, il faut les prendre en considération pour maintenir la forme constante et le volume de la zone fondue.

1-8-6-1 Conservation de la masse : quand on néglige la différence de densité entre le liquide et le cristal, on a :

$$(d_{cry})^2 v_{cry} = (d_{cap})^2 v_{cap} \quad (1.17)$$

Où :

d_{cry} : Diamètre du cristal (de la fibre).

d_{cap} : Diamètre du capillaire.

v_{cry} : Vitesse du cristal.

v_{cap} : Vitesse d'écoulement moyenne dans le capillaire.

1-8-6-2 Conservation de l'énergie:

La conservation de l'énergie est décrite par la loi suivante **[11]** :

$$\rho_s \Delta H \, v_{cry} + K_l Gr_l = K_s Gr_s \quad (1.18)$$

$K_l Gr_l \; et \; K_s Gr_s$: sont les flux de chaleur du liquide et du solide respectivement.

ρ_s : Densité du solide.

ΔH : Chaleur latente dégagée, du à la solidification.

v_{cry} : Vitesse du cristal.

K_l : Conductivité thermique du liquide.

K_s : Conductivité thermique du solide.

Gr_l : Gradient de la température dans le liquide.

Gr_s : Gradient de la température dans le solide.

Le premier terme du premier membre de l'équation précédente est très faible par rapport aux deux autres; ce à cause du gradient de température plus élevé à l'interface.

1-8-6-3 Types de convection dans la zone fondue:

L'étude des phénomènes de convection dans la zone fondue est un élément essentiel pour la compréhension des phénomènes régissant la synthèse des fibres. La forme de l'interface de croissance dépend du type et du sens des phénomènes de convection.

A cause du gradient thermique élevé proche de la surface libre et de l'interface de croissance, on observe qu'il y a un type de convection qui domine, appelé convection de Marangoni (Convection thermocapillaire), elle est liée à la minimisation de l'énergie

(Les tensions superficielles). Puisque le système est petit les mesures de température et de concentration sont difficiles **[24]** ; la convection de flottabilité peut être négligeable à cause des dimensions physiques qui sont très petites. On a aussi un mouvement du fluide des zones les plus chaudes vers les zones les plus froides (Convection naturelle).

Donc l'écoulement et le transfert thermique dans la zone fondue est influencé par la poussée d'Archimède, la convection de Marangoni, le rayonnement thermique et le procédé de cristallisation lui-même. Dans les grands creusets comme ils sont employés dans la production industrielle des cristaux de silicium par exemple, la convection dans la zone fondue est très forte par conséquence l'écoulement du liquide devient turbulent et anisotrope (en 3D) **[44].** Donc la convection dans la zone fondue joue un rôle très important pour la forme et la qualité des fibres tirées.

1-8-7 L'équilibre de la forme de ménisque

La stabilité de la fibre et des cristaux formés est liée aussi à la forme et la nature du creuset ainsi qu'à la forme de ménisque **[25].** La forme stable de la zone fondue est déterminée par l'angle de mouillage $\emptyset$ **[9],** elle est liée en particulier aux tensions superficielles. Pour obtenir une forme stable du ménisque il faut que :

$$\emptyset = \emptyset_0 \qquad (1.19)$$

Tel que :

$\emptyset$: L'angle entre le ménisque et l'axe de croissance.

$\emptyset_0$: L'angle de croissance, il dépend de l'orientation cristallographique (constante du matériau). Pour le saphir la valeur de l'angle de croissance $\emptyset_0$ est égale à 17^0 dans la direction [0001] **[23,47].** Cet angle est indépendant des paramètres de croissance, tel que la hauteur de la zone, le diamètre et le taux de croissance de la fibre, il se déduit des tensions superficielles d'équilibre du système entre le liquide, solide, et gaz (contact de trois phase), sa forme se donne par **[9]**:

$$cos(\emptyset_0) = (\gamma_{SG})^2 + (\gamma_{LG})^2 - \frac{(\gamma_{SL})^2}{2(\gamma_{SG})(\gamma_{LG})} \qquad (1.20)$$

Tel que :

γ_{ij} : Energie interficielle entre les interfaces de trois phase (liquide- solide, liquide -gaz, solide- gaz).

1-8-8 Forme de l'interface de croissance

L'interface liquide-solide est la goutte qui pend au bas d'un capillaire ouvert à son extrémité supérieure et rempli du liquide à cristalliser. Selon le type du fluide, on distingue deux types d'interface :

- Interface déformable : c'est une interface entre deux fluides (gaz ou fluide).

-Interface mobile : c'est une interface d'un fluide avec un corps solide.

Il faut créer une interface pour faire germer les noyaux, et leur croissance se produit par l'adjonction des atomes ou des molécules sur l'interface entre la phase mère et la nouvelle phase **[10]**.

Dans beaucoup de problèmes de technologie, l'interface entre les phases joue un rôle important dans la qualité du produit **[26]**. Par conséquent, sa prévision ou sa conception est une tâche importante dans l'optimisation du processus.

La forme de l'interface dépend de nombreux paramètres tels que **[23]**:

- La taille de la zone fondue.
- Les conditions de tirage.
- Les tensions superficielles liquide-solide-gaz.
- La conductivité thermique du liquide.
- La profondeur de la pénétration du chauffage dans la zone fondue (effet de Peau).
- Le type des phénomènes de convection.
- L'émissivité du liquide.

Aussi le champ thermique et d'écoulement ont un grand rôle tel qu'ils affectent fortement la forme de l'interface de phase entre le liquide et le solide, qui sont aussi essentiels pour la qualité des fibres **[44, 45]**.

1-9 Les travaux théoriques et expérimentaux qui ont été réalisés par la *μ-PD* :

Dans les paragraphes suivants nous présentons quelques travaux théoriques et expérimentaux qui ont été réalisés pour cette nouvelle méthode :

C.W. Lan et al (1998) [64] :

Dans son étude C.W. Lan a développé un modèle numérique pour analyser la croissance des fibres du $Ge_x Si_{1-x}$ par la technique micro-pulling down *(μ-PD)*. Il a fait des calcules simultanément pour étudier le transfert de la chaleur, de la masse, l'écoulement du fluide dans la zone fondue, et la forme d'interface, aussi bien que le diamètre de fibre. C.W. Lan a utilisé la méthode des volumes finis pour analyser théoriquement ce procédé de *μ-PD* ; il a fourni une vue directe de l'écoulement et le transport du liquide dans la zone fondue. Il a calculé le diamètre de la fibre, en fonction de la longueur de cette zone, il a trouvé qu'il est en bon accord avec les mesures expérimentales. Un accord raisonnable pour la forme de ménisque est aussi bien obtenu, cette forme calculée, est presque identique à la solution analytique en utilisant l'approximation à faible nombre de Bond.

***A.YOSHIKAWA et al (1999) [66, 67]** :*

Ce groupe a réussi à tirer des fibres eutectiques d' AL_2O_3/YAG par la technique de micro-pulling down *(μ-PD)* avec des vitesses de tirage relativement élevées compris entre (0.15 - 10 mm/min). En 2001 J. H. Lee *et al* **[68, 69 ,70]** ont aussi étudié un système tridimensionnels de $AL_2O_3/Y_2O_3/ZrO_2$; en utilisant la même technique (micro-pulling down). Le tirage de ces fibres eutectiques, se fait avec des taux de croissance jusqu'à 10 mm⁄min.

Jean-Marie FOURMIGUE, et al (2008) [51] :

En 2008, dans la référence **[51]** Jean-Marie FOURMIGUE, et *al* ont réussi à tirer des fibres monocristallines de composition $YAG\text{-}Nd^{3+}$ en contact avec un germe *YAG* monocristallin orienté suivant la direction (111) de ce cristal.

Ils ont utilisé la technique micro- Pulling down pour faire la croissance de ces fibres monocristallines avec des vitesses du tirage vers le bas. Ce groupe a montré que le taux de croissance dépend du diamètre de la fibre, de la puissance et la température de chauffe, aussi de la viscosité du liquide.

I. Martial et al (2009) [54] :

Dans cet article, un exemple sur les fibres monocristallines *YAG* dopées *Yb (Nicolas AUBRY – JNCO 2009)* produites par la méthode (micro- Pulling Down) pour l'application laser est présenté dans la figure ci-dessous avec un descriptif de base d'une machine *(μPD)* par chauffage inductif **[54]**:

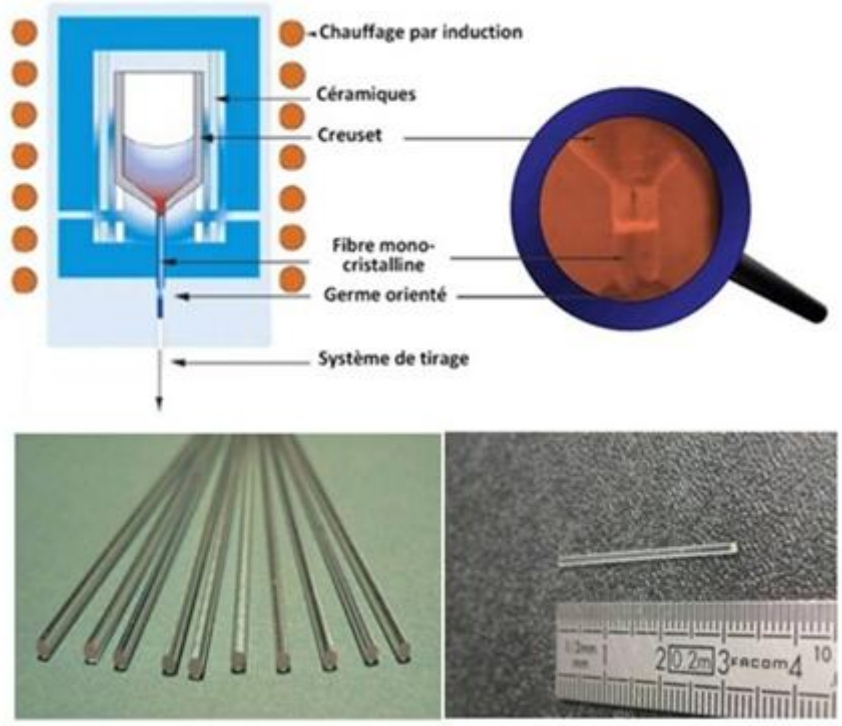


Figure 1.19 : Fibres monocristallines tirées par la méthode micro- Pulling Down avec un schéma descriptif de cette machine.

D. Sangla, N.Aubry et al. (2009) [39]:

Dans ce travail D. Sangla, N.Aubry et *al* ont réalisé la croissance des fibres monocristaux du $Lu_3Al_5O_{12}$ non dopées et dopées Yb^{3+} par la méthode de croissance micro-Pulling Down *(μ-PD)* et ont déterminé le diamètre de la fibre cristalline.

Ils ont étudié la hauteur de la zone fondue, le transfert thermique et ont mesuré le coefficient de ségrégation longitudinal des dopant Yb^{3+} par la fluorescence optique.

Ce groupe a trouvé que la distribution des ions Yb^{3+} est homogène le long de l'axe de croissance et que la convection dans la zone fondue n'affecte pas sur la distribution de dopant dans la fibre cristallisée.

D. Sangla et al (2009) [50]:

Dans cette étude, D. Sangla et *al* ont expliqué la méthode de travail pour l'élaboration des fibres monocristallines de qualité laser *Yb:YAG* par la technique de croissance micro-Pulling down. Ils ont présenté les avantages de ce procédé aussi celui du laser à fibre cristalline, la différence entre le laser à cristaux massifs et le laser à fibres, ils ont trouvé que la puissance laser émise par la fibre à la sortie de cavité est proportionnelle à la puissance de pompe incidente. Le schéma ci-dessous montre les étapes de la méthode de travail et les étapes suivies pour l'élaboration des fibres cristallines *Yb:YAG* :

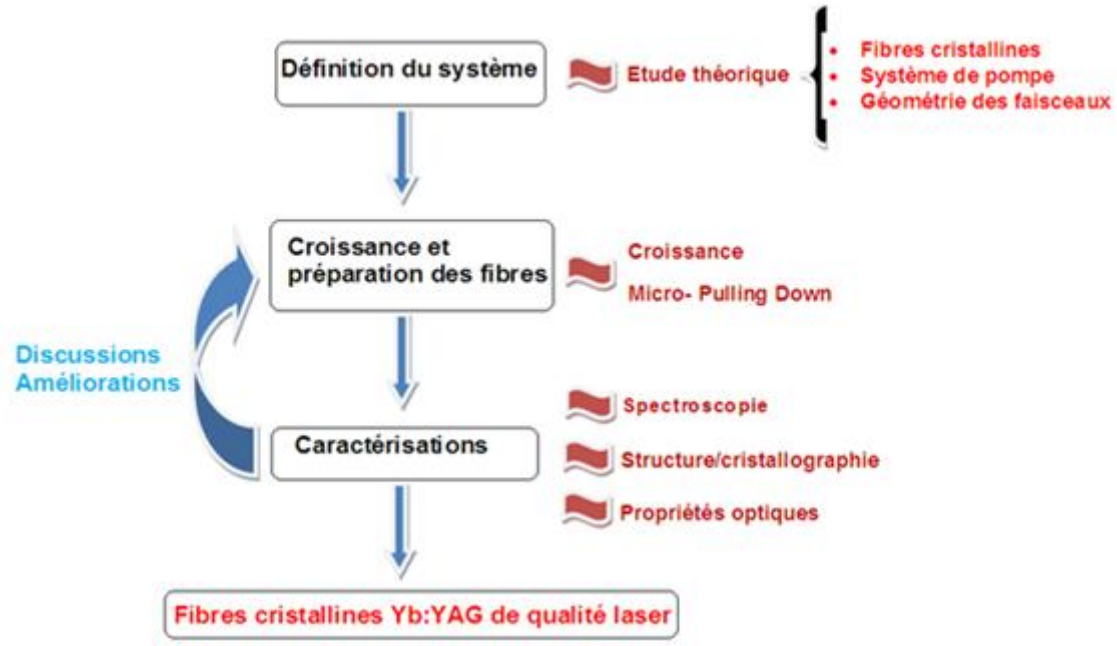


Figure 1.20 : Etapes du travail de la réalisation des fibres cristallines de qualité laser.

A. Laidoune (2010) [23] :

En 2010, A. Laidoune a présenté un travail contenant deux parties :

La première basée sur l'étude du système Al_2O_3-Y_2O_3-ZrO_2, les échantillons ont été synthétisés sous forme de fibres eutectiques par la technique *LHPG*.

La seconde partie, il l'a consacrée au développement de la croissance de fibre monocristalline du saphir (Al_2O_3) non dopé et dopé Ti^{3+} à partir de l'état liquide. Il a réalisé la croissance de ces fibres en utilisant la technique micro-pulling down $(\mu\text{-}PD)$. Il a réussi à faire croître des fibres monocristallines qui sont transparents dans le visible, et ont une bonne qualité macroscopique et microscopique, aussi les fibres du saphir dopée titane avec différentes

vitesses du tirage (0.3mm/min, 0.5mm/min, 0.8mm/min, 1mm/min). Les conditions de cristallogenèse (vitesse de tirage, température du liquide, type de germe) sont l'objectif principal de ce travail. Le tirage a été fait avec des formes géométriques contrôlées pour l'amélioration de la qualité des matériaux et ce dans le cadre du développement d'une nouvelle approche de recherche de nouveaux matériaux.

Les fibres du saphir non dopé, et saphir dopés *Ti* tirées avec différents taux de croissance sont présentées dans les deux figures ci-dessous **[23]** :

Figure1.21.a *Figure1.21.b*

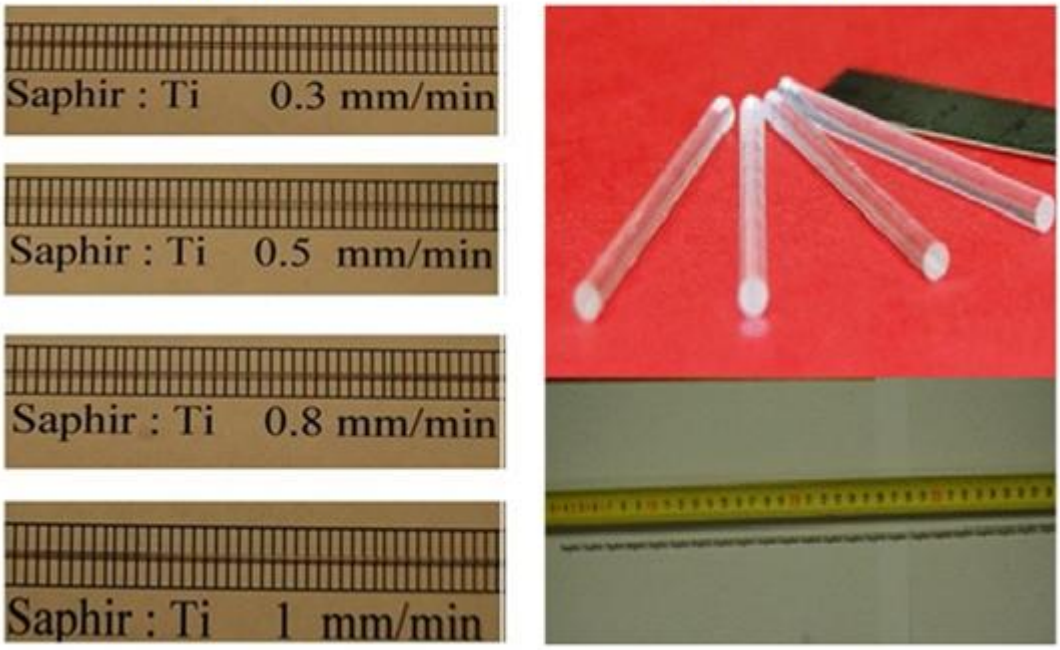


Figure1.21:

a : Fibres monocristalline du saphir dopé Ti^{3+} Tirées avec différentes vitesses.

b : Fibres du saphir transparentes produites par la micro-Pulling Down.

A. Nehari, A. Laidoune et al. [25] :

En ***2011*** Dans cette référence, ce groupe a utilisé la technique de croissance micro-pulling down *(μ-PD)* pour croître des fibres monocristaux du Saphir de diamètre de 1mm. Dans cette étude expérimentale la quantité totale de la matière première (le saphir sous forme d'un liquide) a été transformée complètement dans le creuset vide jusqu'à la fin de l'opération de croissance qui a été effectuée avec une optimisation dans les conditions du tirage et la forme de la zone fondue. Ils ont cristallisé les fibres du saphir au-dessous de 1 bar de pression dans une atmosphère de gaz protecteur (l'argon) avec un taux du tirage compris entre 0.5 et 3 mm/min. Ils ont réussi à croitre des monocristaux transparents et homogènes. Les résultats obtenus montrent les homogénéités chimiques élevées et les bonnes propriétés optiques.

Nous illustrons les fibres monocristallines du saphir qui sont tirées par ce groupe d'après la référence **[25] :**

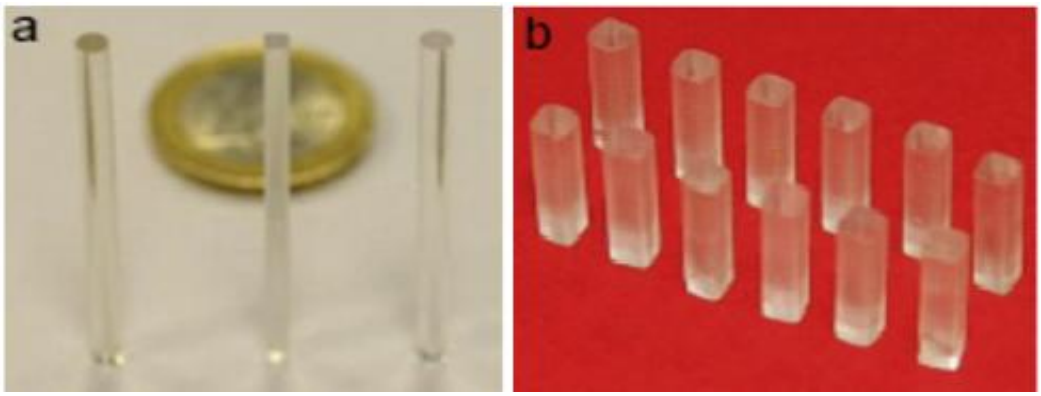


Figure1.22: Fibres monocristallines du saphir tirées par la méthode micro-pulling down.

H. S. Fang et al [11]:

En ***2011*** dans cet article H. S. Fang et *al* ont fait une simulation numérique pour étudier le procédé du tirage micro-pulling down *(μ-PD)* dans le but de la croissance cristalline des fibres du saphir. Ils ont résolu un système d'équations fondamentales pour déterminer l'écoulement du fluide, le transfert thermique, l'interface du liquide/solide, le champ électromagnétique et aussi pour destiner les caractéristiques du système de croissance. Ils ont remarqué que dans le liquide, la convection de Marangoni est dominante (très forte), et la convection de flottabilité est négligeable, mais aussi que le rayonnement thermique autour de la région de creuset est plus grand à cause des grands gradients thermiques appliqués sur cette dernière. Ils ont étudié la convection du gaz qui est aussi importante en raison de la grande différence de température dans les diverses pièces du four. H. S. Fang et *al* ont trouvé une interface liquide/solide avec une forme convexe qui est conforme à l'observation expérimentale.

Conclusion

D'après l'étude de différentes méthodes de croissance précitées, on conclue que la méthode micro-pulling down *(μ-PD)* possède beaucoup d'avantages en comparaison avec les autres techniques, nous citons particulièrement la géométrie dans le cas de ce procédé qui favorise une parfaite distribution des dopants dans le centre de la fibre et évite le problème de ségrégation vers les périphéries et ça tés intéressant pour les applications laser, aussi une rapidité de la croissance, ce qui réduit le coût des cristaux par rapport à d'autres techniques.

Chapitre 2:
Dérivation du modèle théorique

Le but de ce chapitre est la dérivation du modèle théorique , en se basant sur les équations exprimant les phénomènes d'écoulements qui sont principalement celles des dérivées des lois physiques de conservation de la masse, de quantité du mouvement, de l'énergie, et des espèces, tel que nous posons un ensemble des hypothèses simplificatrices pour simplifier ces équations, puis nous les représentons en coordonnées cylindriques ; l'étape suivante c'est la normalisation ou bien l'adimentionnalisation, pour cela on définit les paramètres de référence convenables aussi on introduit l'approximation de Boussinesq ; finalement on obtient un modèle normalisé des équations aux dérivées partielles qui gouvernent le phénomène physique .

2-1 La modélisation

Pour faire une modélisation, il faut connaitre les étapes que nous suivons pour obtenir un modèle, pour le résoudre et donner des résultats qui le valident. La modélisation se divise ordinairement en trois étapes **[38]** :

- La première étape : consiste à déterminer les paramètres essentiels qui interviennent pour décrire le phénomène puis à choisir le modèle adapte pour décrire le phénomène. Dans notre cas les paramètres essentiels qui décrivent l'écoulement sont les vitesses, le transfert de chaleur et de masse qui sont décris par la température et la concentration. Donc notre modèle est basé sur quatre équations (quantité du mouvement, la continuité, équation de l'énergie, et de la concentration), se sont les équations de base que nous utilisons pour construire notre modèle.

- La seconde étape : consiste à établir les équations qui décrivent le phénomène (très souvent se sont des équations différentielles). Dans notre étude nous représentons ces équations qui sont dérivées des lois de conservation (Conservation de la masse, de quantité de mouvement et de l'énergie) en coordonnées cylindriques, en suite on a posé des hypothèses simplificatrices pour simplifier le modèle mathématique.

- La troisième étape : consiste à résoudre les équations précédemment établies afin de donner des réponses et des résultats, soit analytiquement ou numériquement. Dans ce travail la solution sera faire numériquement.

2-2 Les équations fondamentales

Les équations fondamentales de la mécanique des fluides des quantités précédentes (la masse, quantité du mouvement, l'énergie et la concentration) sont **[27, 28]** :

Equation de la continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \boldsymbol{V}) = 0$$

Equation de quantité du mouvement :

$$\rho \frac{d\boldsymbol{V}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla}\, p + \rho \boldsymbol{g} + \mu \boldsymbol{\nabla^2 V} + \frac{\mu}{3}\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}.V)$$

Equation de l'énergie :

$$\rho c_p \frac{d\boldsymbol{T}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla} q'' + \boldsymbol{q}''' + \beta T \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} + \mu \boldsymbol{\Phi}$$

Equation de la concentration :

$$\frac{d\boldsymbol{C}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla} \mathbf{j}_{\mathrm{i}} + \boldsymbol{m}'''$$

2-2-1 Les hypothèses simplificatrices

Pour construire des modèles suffisamment précis, il faut tenir compte d'un certain nombre d'hypothèses simplificatrices. Donc pour la simplification du système d'équations, nous supposons :

- Le milieu d'étude est un milieu continu (fluide);
- Le fluide est supposé comme étant incompressible $\frac{d\rho}{dt} = 0$;
- Fluide visqueux Newtonien (Un fluide visqueux Newtonien est tout fluide dont la relation entre contrainte et le taux de déformation est linéaire);
- Les forces externes se réduisent aux forces gravitationnelles ;
- L'approximation de Boussinesq prend ainsi comme hypothèse(les fluides ont une masse volumique constante qui ne dépend que de la température et de la concentration elle apparait en terme g de l'équation de quantité du mouvement) ;
- La génération interne de la chaleur q''' négligeable ;
- La fonction des dissipations visqueuses $\mu\Phi$ est négligeable ;
- Le terme de l'effet de compressibilité $\beta T \frac{dp}{dt}$ est négligeable ;
- L' absence de géneration des constituents $(m''' = 0)$;

2-3 Simplification des équations fondamentales

2-3-1 Equation de la continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.(\rho \boldsymbol{V}) = 0 \qquad (2.1)$$

Où :

ρ : Densité du fluide par unité de volume.

$\boldsymbol{V}$: Vitesse du fluide.

Cette équation (L'équation de la continuité**)** résulte de l'application de la loi de conservation de la masse, à un fluide qui passe à travers un volume de contrôle « V ».

L'équation (2.1) est dérivée en utilisant l'approximation d'Euler, c'est une approximation dans laquelle Euler a utilisé un volume de contrôle fixé, infinitésimal, et à travers lui le fluide passe avec une vitesse $\boldsymbol{V}$. La représentation Eulerienne **[27]** est la plus utilisée dans ces applications mécaniques des fluides.

On substitue la dérivée $\frac{\partial}{\partial t}$ dans l'équation (2.1) qui devient :

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{V}) = 0 \qquad (2.2)$$

Tel que :

$$\frac{d(\,)}{dt} = \frac{\partial(\,)}{\partial t} + \boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla}(\,) \qquad (2.3)$$

$\frac{d(\,)}{dt}$: Dérivée particulaire.

La dérivée matérielle est une notion fondamentale en mécanique des fluides ; elle est utilisée pour déterminer l'expression de l'accélération d'une particule fluide **[27]**.

Avec :

$$\boldsymbol{\nabla}.(\rho \boldsymbol{V}) = \rho(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{V}) + \boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla}(\,) \qquad (2.4)$$

La densité de chaque élément fluide reste constante quand le fluide est en écoulement c.-à-d. :

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \qquad (2.5)$$

Ce fluide est appelé incompressible. Mathématiquement, cela signifié que :

$$\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{V} = \boldsymbol{0} \qquad (2.6)$$

En coordonnées cylindriques, l'équation de la continuité pour un écoulement incompressible, s'écrit comme suit :

$$div\,\boldsymbol{V} = \boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{V} = \frac{1}{r}\frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \qquad (2.7)$$

Où $u\,, w, v$ représentent respectivement les vitesses radiale, azimutal et axiale.

Dans le cas d'un fluide axisymétrique :

$$w = 0\,, donc\ \frac{\partial w}{\partial \theta} = 0;$$

Donc l'équation (2.4) devient :

$$div\, V = \nabla . V = \frac{1}{r}\frac{\partial (ru)}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \qquad (2.8)$$

2-3-2 Equation de quantité du mouvement :

La loi de conservation de quantité du mouvement exprime la deuxième loi de Newton. Quand cette loi est appliquée à un fluide en écoulement on obtient une équation vectorielle connue comme équation de quantité du mouvement tient la forme :

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{VV} = \rho \boldsymbol{f} + \boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{ij}} \qquad (2.9)$$

Note $\rho \boldsymbol{VV}$ qu'est un tenseur donc $\boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{VV}$ n'est pas une divergence simple, elle peut être exprimée comme suit :

$$\boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{VV} = \rho \boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla V} + \boldsymbol{V}(\boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{V}) \qquad (2.10)$$

On substitue l'expression (2 .10) dans (2 .9) :

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{V}(\boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{V}) + \rho \boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla V} = \rho \boldsymbol{f} + \boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{ij}} \qquad (2.11)$$

Sachant que :

$$\frac{d\rho \boldsymbol{V}}{dt} = \frac{\partial \rho \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{V}(\boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{V}) \qquad (2.12)$$

$$\rho \frac{d\boldsymbol{V}}{dt} + \boldsymbol{V}\frac{d\rho}{dt} + \rho \boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla V} = \rho \boldsymbol{f} + \boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{ij}} \qquad (2.13)$$

On simplifie cette dernière en utilisant l'équation de la continuité($\boldsymbol{\nabla V} = \mathbf{0}$), et on prend en considération que notre fluide est incompressible ($\frac{d\rho}{dt} = 0$) donc l'équation de quantité du mouvement réduit à :

$$\rho \frac{d\boldsymbol{V}}{dt} = \rho \boldsymbol{f} + \boldsymbol{\nabla}.\rho \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{ij}} \qquad (2.14)$$

$\boldsymbol{f}$ **:** Force par unité de masse. Elle désigne la résultante des forces massiques s'exerçant dans le fluide (unité SI : $N.kg^{-1}$) ;

Dans ce cas, la force externe qui est appliquée c'est la force gravitationnelle donc on pose :

$$\rho \boldsymbol{f} = \rho \boldsymbol{g} \ (\boldsymbol{g}: \text{Vecteur de gravité})$$

$\boldsymbol{\Pi_{ij}}$: Tenseur des contraintes , et sa formule est donnée comme suivant :

$$\Pi_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) + \mu' \delta_{ij} \frac{\partial V_k}{\partial x_k} . \qquad i,j,k = 1,2,3 \tag{2.15}$$

V_i , V_j , V_k : Représentent les composantes du vécteur vitesse **V.**

Où :

$\boldsymbol{\delta_{ij}}$ **:** Fonction delta Kronecker et ($\boldsymbol{\delta_{ij}} = \mathbf{1}$ si i = j et $\boldsymbol{\delta_{ij}} = \mathbf{0}$ si i ≠ j). .

$\boldsymbol{\mu} , \boldsymbol{\mu'}$: Coefficients de la viscosité dynamique.

Ces deux coefficients sont reliés entre eux par la relation ci-dessous. Généralement, le coefficient de viscosité en volume est négligeable **[30]** :

$\frac{2}{3}\mu + \mu' = K$ Et $K = 0$ Donc $\mu' = -\frac{2}{3}\mu$

En prenant la viscosité en facteur, le tenseur des contraintes devient :

$$\Pi_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu\left[\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right] \tag{2.16}$$

On peut écrire ce tenseur sous la forme :

$$\Pi_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \tag{2.17}$$

τ_{ij} : Tenseur des contraintes visqueuses (unité SI : Pa) ; et son expression :

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu\delta_{ij} \frac{\partial V_k}{\partial x_k} = \mu\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu(\nabla . V)\delta_{ij} \tag{2.18}$$

L équation de Navier-stokes obtenue est :

$$\rho \frac{dV}{dt} = \rho f - \nabla p + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu (\nabla . V)\delta_{ij} \right] \tag{2.19}$$

Maintenant on introduit la dérivée $\frac{\partial}{\partial x_j}$, et comme μ est constante, on a :

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \mu \left[\frac{\partial^2 V_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\partial V_j}{\partial x_j}\right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x_i}(\nabla . V)$$

$$= \mu\left[\frac{\partial^2 V_i}{\partial {x_j}^2} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\nabla . V) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x_i}(\nabla . V) = \mu \frac{\partial^2 V_i}{\partial {x_j}^2} + \frac{\mu}{3}\frac{\partial}{\partial x_i}(\nabla . V) \tag{2.20}$$

On peut faire une projection de l équation de Navier-stokes sur les trois directions (r,θ, z) c.-à-d. une séparation en ses trois composantes. Cette projection nous donne :

Suivant la direction r :

$$\rho\frac{dV_r}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho g_r + \mu\nabla^2 V_r + \frac{\mu}{3}\frac{\partial}{\partial r}(\nabla.V) \tag{2.20.1}$$

Suivant la direction $\boldsymbol{\theta}$:

$$\rho\frac{dV_\theta}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho g_\theta + \mu\nabla^2 V_\theta + \frac{\mu}{3}\frac{\partial}{\partial \theta}(\nabla.V) \tag{2.20.2}$$

Suivant la direction z :

$$\rho\frac{dV_z}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \mu\nabla^2 V_z + \frac{\mu}{3}\frac{\partial}{\partial z}(\nabla.V) \tag{2.20.3}$$

On peut représenter ces trois équations sous forme vectorielle générale :

$$\rho\frac{dV}{dt} = -\nabla p + \rho g + \mu\nabla^2 V + \frac{\mu}{3}\nabla(\nabla.V) \tag{2.21}$$

En introduisant l équation de la continuité, et pour un fluide incompressible on peut écrire :

$$\rho\frac{dV}{dt} = -\nabla p + \rho g + \mu\nabla^2 V \tag{2.22}$$

On devise cette dernière sur la densité, elle s'écrit :

$$\frac{dV}{dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}(\rho g) + \frac{\mu}{\rho}\nabla^2 V \tag{2.23}$$

Dans tous les termes de l'équation de Navier-stokes, la densité constante ($\rho = \rho_0$: densité du fluide) sauf dans le terme de gravité (l'approximation de Boussinesq), nous parlerons sur ce point dans les paragraphes suivants. On écrit l équation de Navier-stokes seulement selon deux directions (r, z) :

Selon la direction radiale r :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{w}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta} - \frac{w^2}{r} + v\frac{\partial u}{\partial z}\\ &= -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial r} + \nu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial w}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)\\ &+ \frac{1}{\rho_0}(\rho g_r)\end{aligned} \tag{2.24}$$

$\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$: La viscosité cinématique.

Nous avons :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} = \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\,u)\right)$$

$$\begin{cases} \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} - \dfrac{2}{r^2}\dfrac{\partial w}{\partial \theta} = 0 \\ Et : \qquad \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} = 0 \end{cases}$$

Donc selon l'axe r :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} + v\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial r} + \nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\,u)\right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{\rho_0}(\rho g_r) \qquad (2.25)$$

Selon la direction axiale z :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{w}{r}\frac{\partial v}{\partial \theta} + \boldsymbol{v}\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{\rho_0}(\rho g_z) \qquad (2.26)$$

Nous avons :

$$\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial r} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left((r\,\frac{\partial v}{\partial r})\right)$$

Donc l équation selon l'axe z devient :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial r} + v\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left((r\,\frac{\partial v}{\partial r})\right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{\rho_0}(\rho g_z) \qquad (2.27)$$

Avec : $\rho_0 = \rho_m = cte$

2-3-2-1 Approximation de Boussinesq

On introduit dans le dernier terme de ces deux équations une approximation qui s'appelle l'approximation de Boussinesq. Cette dernière prend ainsi comme hypothèse que les fluides ont une masse volumique constante qui ne dépend que de la température et de la concentration. Il déclare que des différences de densité sont suffisamment petites pour être négligées, excepté où elles apparaissent en terme g de l'équation de conservation de quantité du mouvement (g :l'accélération due à la pesanteur)**.** Cette approximation est donc acceptable dans la plupart des situations à large échelle. Dans la limite de la petite variation de la densité, en basant sur l'approximation de Boussinesq, on peut écrire **[28]** :

$$\rho(T,C) = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T}(T - T_0) + \frac{\partial \rho}{\partial C}(C - C_0) = \rho_0[1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_C(C - C_0)] \qquad (2.27)$$

On définit β_T comme coefficient de dilatation thermique et β_C le coefficient de dilatation de concentration, les expressions de ces deux coefficients se donnent par :

$$\beta_T = -\frac{1}{\rho_0}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p$$

$$\beta_C = \frac{1}{\rho_0}\left(\frac{\partial \rho}{\partial C}\right)_p$$

La densité du matériau diminue avec la température, c'est pour cela β_T est négatif. Par contre la densité augmente avec la concentration c'est pourquoi β_C est positif.

Nous remplaçons l'expression de la densité dans l'équation de quantité du mouvement, on obtient la forme finale de l'équation de Navier-stokes selon les deux axes **[63]** :

Suivant la direction radiale r :

Puisque la valeur du champ gravité radiale est nulle, l'équation projetée sur l'axe r devient :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} + v\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial P}{\partial r} + \nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\,u)\right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) + 0 \qquad (2.28)$$

Suivant la direction axiale z :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial r} + v\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial P_m}{\partial z} + \nu\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) - g_z\beta_T(T - T_0) + g_z\beta_C(C - C_0) \qquad (2.29)$$

P_m : Pression motrice.

2-3-3 Equation de l'énergie :

La loi de conservation de l'énergie, traduit le premier principe de la thermodynamique **[27]**. Les propriétés thermodynamiques d'un fluide dépendant de la température, le principe de conservation d'énergie, exprime l'équation d'énergie pour une diffusivité thermique et une source de chaleur q''' et une fonction des dissipations visqueuses $\mu\Phi$.

$$\rho_i c_{p_i}\frac{dT}{dt} = -\nabla q'' + q''' + \beta T\frac{dp}{dt} + \mu\Phi \qquad (2.30)$$

$\beta T \frac{dp}{dt}$: Variation de l'énergie due à la compressibilité.

En négligeant la source de chaleur q''' et la fonction des dissipations visqueuses $\mu\Phi$, aussi la variation d'énergie due à la compressibilité $\beta T \frac{dp}{dt}$ l'équation (2.30) devient :

$$\rho_i c_{p_i}\left(\frac{\partial T}{\partial t} + V.(\nabla T)\right) = \nabla.(K_i \nabla \mathrm{T}) = \nabla.\left(\frac{K_i}{\rho_i c_{p_i}} \nabla \mathrm{T}\right) \tag{2.31}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} + V.(\nabla T)\right) = \nabla.(\alpha_i(T) \nabla \mathrm{T}) \tag{2.32}$$

$$\alpha_i(T) = \frac{K_i}{\rho_i(T) Cp_i} \;\; ; \; (i = : \; m \; pour \; le \; \text{liquide}, c \;\; pour \; le \; \text{solide} \;)$$

K : Coefficient de la conductivité thermique.

c_p : Chaleur spécifique.

α : Diffusivité thermique.

En coordonnées cylindriques, le Laplacian de la température se donne :

$$\boldsymbol{\Delta} T = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Le membre droit de l'équation (2.32) s'écrit :

$$\boldsymbol{\Delta}(\,\alpha_i(T)\,T\,) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial z^2} \tag{2.32.1}$$

Aussi on écrit le premier terme de la même équation dans ces coordonnées :

$$\boldsymbol{V}.\boldsymbol{\nabla} T = \frac{u}{r}\frac{\partial(rT)}{\partial r} + \frac{w}{r}\frac{\partial T}{\partial \theta} + v\frac{\partial T}{\partial z} \tag{2.32.2}$$

En remplaçant les deux expressions ((2.32.1)) et ((2.32.2)) dans l'équation (2.32) ; la forme d'équation de l'énergie sera :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{1}{r}\frac{\partial(rT)}{\partial r} + \frac{w}{r}\frac{\partial T}{\partial \theta} + v\frac{\partial T}{\partial z}\right)$$
$$= \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2(\,\alpha_i(T)\,T\,)}{\partial z^2}\right) \tag{2.33}$$

Dans le cas d'un fluide axisymétrique les termes dépendants de la vitesse azimutale sont négligeables, donc l'équation ci-dessus s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{1}{r}\frac{\partial (rT)}{\partial r} + v\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial(\alpha_i(T)\,T)}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial(\alpha_i(T)\,T)}{\partial z} \qquad (2.34)$$

C'est l'équation d'énergie.

2-3-4 Equation de la concentration :

$$\frac{dC}{dt} = -\nabla \mathbf{j}_{\mathrm{i}} + m^{\cdot\prime\prime\prime} \qquad (2.35)$$

$\boldsymbol{j}$ **:** Vecteur du flux de la diffusion.

$m^{\cdot\prime\prime\prime}$ **:** Géneration des constituents.

De la meme manière que le flux de chaleur qu'est une fonction linéaire du gradient de température $\nabla \mathbf{T}$, le flux de la diffusion est aussi une fonction linéaire du gradient de la concentration $\nabla \mathbf{C}_{\mathrm{i}}$ **.** En 1855, le physiologiste allemand ***Adolph Fick*** a le mérite d'avoir déclenché le développement analytique moderne du champ de transfert de la masse **[61]**, et de la même idée que la loi de ***Fourier*** en conduction ; la loi de ***Fick*** pour la diffusion de la masse pour un alliage de deux composantes est :

$$\mathbf{j}_1 = -D_{12}\nabla \mathbf{C_1} \qquad (2.36)$$

Tel que:

$D_{12} = D_{21} = D$; Où D : Diffusivité de la masse de la composante 1 dans la composante 2 et l'inverse et son unité est (m^2/s). La loi de ***Fick*** est une approximation utile dans les problèmes du couplage transfert chaleur- masse. On fait une substitution de cette loi dans l'équation (2.35) sachant qu'il n'est y a pas une géneration des constituents ($m^{\cdot\prime\prime\prime} = 0$) **[28]**, on trouve :

$$\frac{dC}{dt} = D\nabla^2.\boldsymbol{C} \qquad (2.37)$$

Nous remplaçons le dérivé total par sa valeur on obtient :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} + \boldsymbol{V}.\nabla \mathrm{C}\right) = D\nabla^2.\boldsymbol{C} \qquad (2.38)$$

Sachant que :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}.\nabla \mathrm{C} = u\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial (rC)}{\partial r} + \dfrac{w}{r}\dfrac{\partial C}{\partial \theta} + v\dfrac{\partial C}{\partial z} \\ \nabla^2\boldsymbol{C} = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r\dfrac{\partial C}{\partial r}\right) + \dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} + \dfrac{\partial^2 C}{\partial z^2} \end{cases} \qquad (2.39)$$

L'équation de concentration des espèces en coordonnées cylindriques a la forme :

$$\left(\frac{\partial(rC)}{\partial t}+u\frac{1}{r}\frac{\partial(rC)}{\partial r}+\frac{w}{r}\frac{\partial C}{\partial \theta}+v\frac{\partial C}{\partial z}\right)=D\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right] \quad (2.40)$$

En introduisant l'équation de la continuité, dans notre cas, cette équation se transforme à :

$$\frac{\partial(rC)}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ruC)}{\partial r}+\frac{\partial(vC)}{\partial z}=D\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right] \quad (2.41)$$

D : Diffusivité massique.

2-4 Le modèle obtenu en coordonnées cylindrique :

Equation de la continuité :

$$div\,V=\nabla.V=\frac{1}{r}\frac{\partial(ru)}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial z}=0$$

Equation de quantité du mouvement :

Suivant la direction r :

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial r}+v\frac{\partial u}{\partial z}=-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial r}+\nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\,u)\right)+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)$$

Suivant la direction axiale z :

$$\frac{\partial v}{\partial t}+u\frac{\partial v}{\partial r}+v\frac{\partial v}{\partial z}=-\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial P_m}{\partial z}+\nu\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left((r\frac{\partial v}{\partial r})\right)+\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right)-g_z\beta_T(T-T_0)+g_z\beta_C(C-C_0)$$

Equation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ruT)}{\partial r}+\frac{\partial(vT)}{\partial z}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial(\alpha_i(T)\,T)}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2(\alpha_i(T)\,T)}{\partial z^2}$$

L'équation de la concentration :

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ruC)}{\partial r}+\frac{\partial(vC)}{\partial z}=D\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right)$$

2-5 Normalisation des équations

Une étape-clé dans le passage du modèle physique au modèle numérique est l'adimensionnalisation des équations et le choix des variables numériques **[37]**. L'avantage de cette normalisation est que les paramètres caractéristiques tels que le nombre de Prandtl, de Schmidt, Rayleigh, peuvent être variées indépendamment **[27]**, c.-à-d. on peut étudier leur effet sur les résultats obtenus.

On considère notre fluide comme incompressible et Newtonien ; où l'écoulement est Laminaire, les équations gouvernants le problème doivent être sous forme adimensionnelle, pour cela nous remplaçons les variables par les paramètres de référence suivants **[9, 64]** :

- La vitesse par : $\frac{\alpha_m}{R_d}$
- Le temps par : $\frac{R_d^2}{\propto_m}$
- La température par $\Delta T_{max} = T_{ch} - T_F$
- La concentration par la concentration C_0

Où :

- R_d : Diamètre du creuset (longueur de référence).
- $T_{ch} - T_F$: Différence entre la température chaude et froide dans le domaine d'étude.
- C_0 : Concentration minimale du dopant.
- α_m : Diffusivité thermique du liquide.

On définit les variables adimensionnelles comme suivant **[64]** :

Le temps : $\frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{{R_d}^2}{\alpha_m}$;

La dérivée radiale : $\frac{\partial}{\partial r^*} = R_d \frac{\partial}{\partial r}$;

La dérivée axiale : $\frac{\partial}{\partial z^*} = R_d \frac{\partial}{\partial z}$;

La vitesse radiale : $u^* = \frac{R_d}{\alpha_m} u$;

La vitesse axiale : $v^* = \frac{R_d}{\alpha_m} v$;

La température : $T^* = \frac{T - T_F}{T_{ch} - T_F} = \frac{T - T_F}{\Delta T_{max}}$, $T_{ch} = T_d|_{-\mathrm{L_h}}$; $T_F = T_a = T_0$;

La concentration : $C^* = \frac{C - C_0}{C_{max} - C_0}$;

La pression : $p^* = \frac{p}{\rho(\frac{\alpha_m}{R_d})^2}$, $donc\ p = p^*\rho(\frac{\alpha_m}{R_d})^2$;

2-5-1 Adimensionnalisation d'équation de quantité du mouvement :

Nous réécrivons l'équation de quantité du mouvement suivant la direction r :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial r} + v\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p}{\partial r} + \nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\,u)\right) + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) \quad (2.42)$$

En substituant tous les variables ci-dessus dans cette équation, nous trouvons :

$$\begin{aligned}\frac{\alpha_m}{{R_d}^2}\frac{\partial}{\partial t^*}\left(\frac{\alpha_m}{R_d}u^*\right) + \frac{\alpha_m}{R_d}u^*\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{\alpha_m}{R_c}u^*\right) + \frac{\alpha_m}{R_d}v^*\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\alpha_m}{R_d}u^*\right)\\ = -\frac{1}{\rho_0}\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(p^*\rho_0\left(\frac{\alpha_m}{R_d}\right)^2\right)\\ + \nu\left(\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{R_d}\frac{1}{r^*}\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(r\,\frac{\alpha_m}{R_c}u^*\right)\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\frac{\alpha_m}{R_d}u^*\right)\right)\end{aligned} \quad (2.43)$$

Donc l'équation équivalente à cette dernière est :

$$\begin{aligned}\frac{\alpha_m^2}{R_d^3}\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \frac{\alpha_m^2}{R_d^3}u^*\frac{\partial u^*}{\partial r^*} + \frac{\alpha_m^2}{R_d^3}v^*\frac{\partial u^*}{\partial z^*}\\ = -\frac{\alpha_m^2}{R_d^3}\frac{\partial p^*}{\partial r^*} + \nu\frac{\alpha_m}{R_d^3}\left(\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial}{\partial r^*}(r^*\,u^*)\right) + \frac{\alpha_m}{R_d^3}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\partial u^*}{\partial z^*}\right)\right)\end{aligned} \quad (2.44)$$

La formule finale normalisée d'équation radiale de quantité du mouvement est :

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^*\frac{\partial u^*}{\partial r^*} + v^*\frac{\partial u^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial r^*} + P_r\left(\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial}{\partial r^*}(r^*\,u^*)\right) + P_r\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\partial u^*}{\partial z^*}\right)\right) \quad (2.45)$$

Suivant la direction axiale, l'équation fondamentale s'récrit :

$$\begin{aligned}\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial r} + v\frac{\partial v}{\partial z}\\ = -\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p_m}{\partial z} + \nu\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) - g_z\beta_T(T - T_0)\\ + g_z\beta_C(C - C_0)\end{aligned} \quad (2.46)$$

En utilisant les mêmes variables adimensionnelles définis précédemment on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^*\frac{\partial v^*}{\partial r^*} + v^*\frac{\partial v^*}{\partial z^*}\\ = -\frac{\partial {p_m}^*}{\partial z^*} + \frac{\nu}{\alpha_m}\left(\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial}{\partial r^*}(r^*\,v^*)\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\partial v^*}{\partial z^*}\right)\right) - \frac{\nu g_z\beta_T\Delta T_{max}R_d^3}{\alpha_m\alpha_m\nu}\ T^*\\ + \frac{D\ \nu g_z\beta_C\Delta C_{max}R_d^3}{D\ \alpha_m\alpha_m\nu}\ C^*\end{aligned} \quad (2.47)$$

On définit les nombres adimensionnels suivants :

$Ra_T = \frac{g_0 \beta_T \Delta T_{max} R_d^3}{\alpha_m \nu}$: Nombre de Rayleigh thermique.

$Ra_S = \frac{g_0 \beta_C \Delta C_{max} R_d^3}{D\, \nu}$: Nombre de Rayleigh de la concentration.

$Sc = \frac{\nu}{D}$: Nombre de Schmidt.

$P_r = \frac{\nu}{\alpha_m}$: Nombre de Prandtl.

Donc la forme finale d'équation axiale de quantité du mouvement est :

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial {p_m}^*}{\partial z^*} + P_r \left(\frac{\partial}{\partial r^*} \left(\frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* v^*) \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left(\frac{\partial v^*}{\partial z^*} \right) \right) - P_r \, Ra_T T^* + \frac{{P_r}^2}{Sc} Ra_S \, C^* \quad (2.48)$$

2-5-2 Adimensionnalisation d'équation de Poisson :

La forme de l'équation de Poisson, en coordonnées cylindriques s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + S_\phi = 0 \quad (2.49)$$

$$\text{Où :} \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*} \\ \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*} \end{cases}$$

On introduit ces variables dans l'équation de Poisson **:**

$$\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{R_d r^*}\frac{1}{R_d}\frac{\partial \phi}{\partial z^*}\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{R_d r^*}\frac{1}{R_d}\frac{\partial \phi}{\partial r^*}\right) + S_\phi = 0 \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \phi}{\partial z^*}\right) + \frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \phi}{\partial r^*}\right) + {S_\phi}^* = 0 \quad (2.51)$$

2-5-3 Adimensionnalisation d'équation de l'énergie :

Réécrivons l'équation de l'énergie :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{1}{r}\frac{\partial (rT)}{\partial r} + v\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial (\alpha_i(T)\, T)}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial (\alpha_i(T)\, T)}{\partial z} \quad (2.52)$$

Le même procédé utilisé pour transformer cette équation à une autre sans dimensions, nous substituons chaque variable par sa valeur, nous trouvons :

$$\frac{\alpha_m}{{R_d}^2} R_d r^* \frac{\partial}{\partial t^*}(T^*\Delta T_{max} + T_F) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(R_d r^* \frac{\alpha_m}{R_d} u^*(T^*\Delta T_{max} + T_F)\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(R_d r^* \frac{\alpha_m}{R_d} v^*(T^*\Delta T_{max} + T_F)\right) = \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(R_d r^*\, \alpha_i(T)\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}(T^*\Delta T_{max} + T_F)\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(R_d r^* \alpha_i(T)\, \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}(T^*\Delta T_{max} + T_F)\right) \quad (2.53)$$

Avec :

$$\frac{\partial T_F}{\partial t^*} = 0\,, \frac{\partial T_F}{\partial r^*} = \frac{\partial T_F}{\partial r^*} = 0, \frac{\partial \Delta T_{max}}{\partial z^*} = 0\,, \frac{\partial \Delta T_{max}}{\partial z^*} = 0$$

Après l'introduction des opérations mathématiques, nous arrivons à :

$$\frac{\partial (r^*T^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial r^*}(r^*u^*T^*) + \frac{\partial}{\partial z^*}(r^*v^*T^*) = \left[\frac{\partial}{\partial r^*}\left(r^*\, \alpha_i(T^*)\frac{\partial T^*}{\partial r^*}\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(r^*\alpha_i(T^*)\, \frac{\partial T^*}{\partial z^*}\right)\right] \quad (2.54)$$

2-5-4 Equation de la concentration :

Le bilan de matière est décrit par l'équation de transport de la masse, qui peut être écrite selon l'expression suivante :

$$\frac{\partial (rC)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(ruC) + \frac{\partial}{\partial z}(rvC) = D\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(r\frac{\partial C}{\partial z}\right)\right] \quad (2.55)$$

On fait un remplacement des variables adimensionnelles :

$$R_d r^* \frac{\alpha_m}{{R_d}^2}\frac{\partial}{\partial t^*}(C^*\Delta C_{max} + C_0) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(R_d r^* \frac{\alpha_m}{R_d} u^*(C^*\Delta C_{max} + C_0)\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(R_d r^* \frac{\alpha_m}{R_d} v^*(C^*\Delta C_{max} + C_0)\right) = D\left[\frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}\left(R_d r^* \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial r^*}(C^*\Delta C_{max} + C_0)\right) + \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}\left(R_d r^* \frac{1}{R_d}\frac{\partial}{\partial z^*}(C^*\Delta C_{max} + C_0)\right)\right] \quad (2.56)$$

Avec :

$$\frac{\partial C_0}{\partial t^*} = 0 \,, \frac{\partial C_0}{\partial r^*} = \frac{\partial C_0}{\partial z^*} = 0, \frac{\partial \Delta C_{max}}{\partial r^*} = 0 \,, \frac{\partial \Delta C_{max}}{\partial z^*} = 0$$

Où sa forme adimensionnelle s'écrit :

$$\frac{\partial (r^* C^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* u^* C^*) + \frac{\partial}{\partial z^*}(r^* v^* C^*) = \frac{P_r}{Sc}\left[\frac{\partial}{\partial r^*}\left(r^* \left(\frac{\partial C^*}{\partial r^*}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(r^* \left(\frac{\partial C^*}{\partial z^*}\right)\right)\right] \quad (2.57)$$

Finalement nous avons obtenu un modèle des équations aux dérivées partielles normalisées décrit le problème. L'axisymétrie de l'écoulement permet d'écrire les équations adimensionnelles dans un système de coordonnées cylindriques bidimensionnelles **[46]**:

2-6 Le modèle adimensionnel :

Equation de quantité du mouvement :

Pour la vitesse radiale u :

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial u^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial r^*} + P_r \left(\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* u^*)\right) + P_r \frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\partial u^*}{\partial z^*}\right)\right)$$

Pour la vitesse axiale v :

$$\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial {p_m}^*}{\partial z^*} + P_r \left(\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* v^*)\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\partial v^*}{\partial z^*}\right)\right) - P_r \, Ra_T T^* + \frac{{P_r}^2}{Sc} Ra_S \, C^*$$

Equation de Poisson :

$$\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \phi}{\partial z^*}\right) + \frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \phi}{\partial r^*}\right) + S^* = 0$$

Equation de l'énergie :

$$r^* \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* u^* T^*) + \frac{\partial}{\partial z^*}(r^* v^* T^*) = \frac{\partial}{\partial r^*}\left(r^* \alpha_i(T^*) \frac{\partial T^*}{\partial r^*}\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(r^* \alpha_i(T^*) \frac{\partial T^*}{\partial z^*}\right) 0$$

Equation de la concentration:

$$r^* \frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \frac{\partial}{\partial r^*}(r^* u^* C^*) + \frac{\partial}{\partial z^*}(r^* v^* C^*) = \frac{P_r}{Sc}\left[\frac{\partial}{\partial r^*}\left(r^* \frac{\partial C^*}{\partial r^*}\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(r^* \frac{\partial C^*}{\partial z^*}\right)\right]$$

Les grandeurs transportées pour chaque équation, sont résumés dans ce tableau:

Tableau 2.1 : Présentation des différents termes pour le modèle.

Grandeurs transportés	ϕ	Γ	S
Equation de quantité du mouvement selon la direction r	u	P_r	0
Equation de quantité du mouvement selon la direction z	v	P_r	$-P_r\, Ra_T T^* + \frac{{P_r}^2}{Sc} Ra_S\, C^*$
Equation de l'énergie	T	${\alpha_i}^*$	0
Equation de concentration	C	$\frac{P_r}{Sc}$	0

2-7 Approche de la fonction vorticité-ligne du courant :

Si nous parlons de la vorticité, l'approche de la fonction vorticité-ligne du courant a été une des méthodes les plus populaires, pour résoudre les équations Navier-Stokes incompressible en 2D. **[27]** Dans cette approche on fait un changement de variable tel que nous remplaçons les composantes de la vitesse par la vorticité ω et la fonction des lignes du courant. Le vecteur de la vorticité est défini par :

$$\omega = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{V}$$

La valeur scalaire de la vorticité pour un écoulement en 2D s'écrit comme suit **[27]** :

$$\omega = \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}; \qquad \text{Avec:} \quad \begin{cases} u = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z} \\ v = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} \end{cases} \tag{2.58}$$

ψ : La fonction des lignes du courant.

Donc la formule de la vorticité sera comme suivante :

$$\omega = -\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right) - \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) \tag{2.59}$$

Pour obtenir l'équation de la vorticité, on dérive l'équation de quantité du mouvement suivant la direction r par rapport à z, et on dérive l'équation de quantité du mouvement selon

la direction z par rapport à r, la soustraction de ces équations résultantes, nous forme l'équation de la vorticité :

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\omega}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\omega}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) = \nu\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\omega)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial z}(r\omega)\right)\right) - \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{\rho_0}(\rho g_z) \quad (2.60)$$

Où sa forme normalisée donnée par **[9,64]**:

$$\frac{\partial \omega^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{\omega^*}{r^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial z^*}\right) - \frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{\omega^*}{r^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial r^*}\right) + P_r\left[\frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial}{\partial r^*}(r^*\omega^*)\right) + \frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial}{\partial z^*}(r^*\omega^*)\right)\right] - P_r Ra_T \frac{\partial T^*}{\partial r^*} + P_r Ra_S \frac{\partial C^*}{\partial r^*} \quad (2.61)$$

Equation de Poisson pour les lignes du courant :

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \omega = 0 \quad (2.62)$$

Son expression adimensionnelle est :

$$\frac{\partial}{\partial z^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial z^*}\right) + \frac{\partial}{\partial r^*}\left(\frac{1}{r^*}\frac{\partial \psi^*}{\partial r^*}\right) + \omega^* = 0 \quad (2.63)$$

Tableau 2.2 : Présentation des différents termes pour la vorticité, et la ligne du courant.

Grandeurs transportés	ϕ	Γ	S_ϕ
Equation de quantité du mouvement (pour la vorticité)	ω	P_r	$-P_r\, Ra_T \frac{\partial T^*}{\partial r^*} + P_r Ra_S \frac{\partial C^*}{\partial r^*}$
Equation de Poisson	ψ	1	ω

Conclusion

La forme finale du modèle mathématique est un système des équations différentielles aux dérivées partielles , du second ordre non linéaires, fortement couplées qui ne peuvent être résolues analytiquement mais plutôt par des méthodes de type numérique, on parlera sur ce point dans le chapitre suivant .

Chapitre 3 : Etude numérique

Les phénomènes physiques en général obéissent à des lois et à la résolution de systèmes d'équations mathématiques. Pour notre étude, il s'agit essentiellement d'équations différentielles du second ordre à coefficients constants ; pour résoudre ces équations on utilise une méthode numérique ou analytique qui consiste à développer les moyennes de la résolution de ces dernières. On a déjà évoqué dans le chapitre précédent de l'impossibilité de l'utilisation de la méthode de résolution analytique pour notre modèle. En conséquence, nous adoptons donc la méthode de résolution numérique qui nécessite une discrétisation, nous permettant de transformer les équations aux dérivées partielles en un système d'équations algébriques.

Dans ce chapitre on décrit la méthode numérique utilisée pour résoudre les équations de base formulées dans le Chapitre précédent, aussi nous citons les étapes principales de cette méthode. Généralement dans le cas d'un milieu continu, la solution numérique est obtenue avec l'approche des volumes de contrôle ***[37]*** *; d'un autre coté dans le cas d'un milieu poreux, elle est obtenue avec les méthodes des différences finies et des éléments finis.*

3-1 Méthodes de résolution des problèmes de mécanique des fluides

En mécanique des fluides les problèmes rencontrés en pratique peuvent être répertoriés en deux grandes classes **[20]**; dans la première on traite les problèmes directs dans lesquels on essaie de déterminer les caractéristiques d'un écoulement dans une géométrie donnée. Dans la seconde on déduit la géométrie à partir de données. En générale l'analyse de ces problèmes s'appuie sur :

- ✓ Les principes fondamentaux (conservation de la masse, de quantité du mouvement, et de l'énergie).
- ✓ Les lois de comportement (loi de *Newton, Fourier, Fick*).
- ✓ Les méthodes de l'analyse mathématique : Théorie des équations différentielles aux dérivées partielles, l'analyse vectorielle,…
- ✓ Les méthodes numériques suivantes :

  - Différences finies : dans cette méthode on utilise des approximations de dérivées.
  - Eléments finis.
  - Volumes finis.

Les deux dernières méthodes (éléments finis et les volumes finis) sont basées sur les approximations d'intégrales.

3-2 Les conditions aux limites :

La résolution d'une équation différentielle aux dérivées partielles n'a de sens que si l'on impose un certain nombre de conditions que la solution doit respecter. Ce sont des conditions initiales ou des conditions aux limites. On distingue trois types de conditions aux limites :

Condition de Dirichlet :

Pour la condition de Dirichlet**,** la propriété physique prend une valeur constante c.-à-d. on impose une valeur constante de la solution sur la frontière de notre domaine d'étude, (Par exemple : $\phi = cte$).

Condition de Neumann :

On impose une condition de flux de la solution à la frontière de la région sous la forme :

$$a.\phi = b.\frac{\partial \phi}{\partial n} \quad (3.1)$$

On parle alors de condition de Neumann**.**

a, b : Constants.

n : Etant la normale à la frontière.

Condition de Cauchy :

Une condition de Cauchy est une condition qui fait le couplage entre la condition de Dirichlet et la condition de Neumann, c.-à-d. on impose une condition de la forme :

$$a.\phi + b.\frac{\partial \phi}{\partial n} = c \quad (3.2)$$

ϕ : Propriété physique, peut être une vitesse, une température, une concentration, fonction de courant, pression etc.

Pour vérifier la propriété de conservation, nous essayons d'écrire toutes les conditions aux limites sous une forme générale similaire à la forme de la condition de Cauchy, (avec la détermination des constantes a, b et c). La conservation du flux ici se traduit par l'égalité des quantités du flux entrants le volume de contrôle et celles sortants le même volume (Par exemple si on prend un matériau il faut que le transfert thermique par conduction égale le transfert thermique par convection de même face, c.-à-d. que nous sommes en présence d'une conservation du flux) **[81]**.

3-3 Le modèle physique:

La figure ci-dessous représente le domaine de notre étude et les paramètres caractéristiques qui le distinguent, aussi un maillage uniforme pour le calcul. On suppose que le diamètre de la fibre tirée est constant.

D'après ce schéma, on définit les paramètres caractéristiques qui apparaissent dans la figure **3.1** comme suivant :

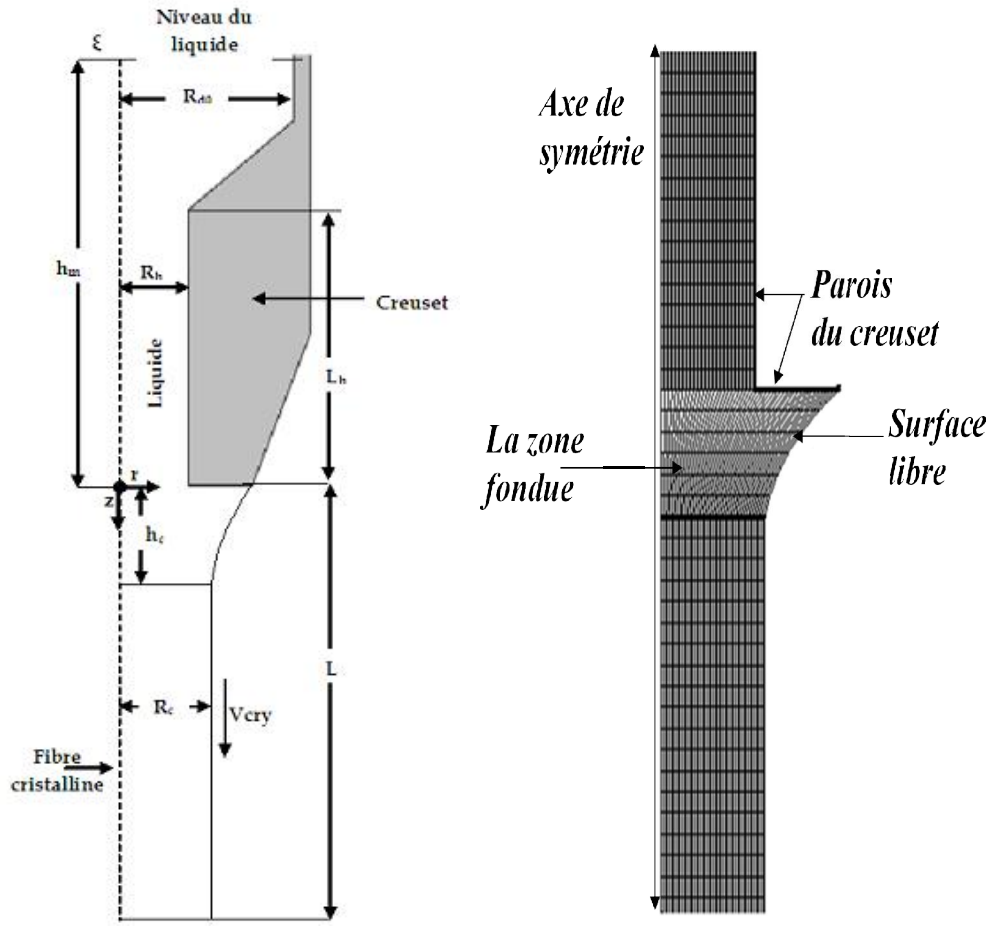


Figure 3.1 : Paramètres caractéristiques du domaine d'étude, avec une représentation du maillage.

R_{d0} : Rayon du creuset.

R_h : Rayon du capillaire.

R_c : Rayon du cristal.

h_m : Hauteur du liquide.

h_c : Hauteur du ménisque.

L_h : Longueur du capillaire.

L : Longueur de fibre et de la zone fondue (tous les deux).

$\emptyset_0$: Angle de croissance.

θ_c : Angle de mouillage.

v_c : Vitesse du cristal.

γ : Coefficient de la tension superficielle.

Le contact entre le germe et le liquide qui se trouve dans le creuset peut alors être réalisé par l'interface solide – liquide qui établit la croissance du cristal. Le tirage s'effectue vers le bas avec des vitesses contrôlées reliées entre elles par la relation :

$$(d_{cry})^2 v_{cry} = (d_{cap})^2 v_{cap} \quad (3.3)$$

Où :

d_{cry} : Diamètre du cristal.

v_{cry} : Vitesse du cristal.

d_{cap} : Diamètre du capillaire.

v_{cap} : Vitesse du capillaire.

Le profil du ménisque de la zone fondue est donné par l'expression **[9]** :

$$z(r) = R_2 \cos(\emptyset_0) \left[\cos h^{-1}\left(\frac{R_1}{R_2 cos(\emptyset_0)}\right) - \cos h^{-1}\left(\frac{r}{R_2 \cos(\emptyset_0)}\right)\right] \quad (3.4)$$

Ou r est la distance radiale de l'axe de croissance,

Tel que : $R_2 < r < R_1$

$R_{1=}R_d$: Rayon du bas du creuset.

$R_2 = R_c$: Rayon du cristal.

3-4 Choix de la méthode de résolution

Il faut intervenir sur le concept de la discrétisation donnant un système d'équations algébriques non linéaires qui décrivent les propriétés discrètes du fluide aux nœuds dans le domaine de solution. La discrétisation des équations différentielles aux dérivés partielles, se fait par différentes méthodes numériques, on les a déjà citées précédemment. Parmi ces méthodes, nous avons choisi celle des volumes finis avec un schéma Hybride, où l'on prend un volume de contrôle et un maillage structuré.

La méthode des volumes finis a fait ses preuves dans différents domaines de physique : mécanique des fluides, transfert thermique, transfert massique…etc. Elle s'applique aux problèmes linéaires ou non linéaires, stationnaires ou non stationnaires.

3-4-1 Principe de la méthode des volumes finis:

La méthode des volumes finis a été décrite pour la première fois en 1971 par *Patankar* et *Spalding* et publiée en 1980 par *Patankar* (Numerical Heat Transfer and Fluid Flow) **[65]**. Cette dernière *(MVF)* est une méthode numérique, dans laquelle, on divise le domaine de

calcul en un nombre fini de sous-domaines élémentaires, appelés volumes de contrôle en 3D, des surfaces en 2D et segment en 1D. La technique des volumes finis consiste à intégrer les équations aux dérivées partielles, qui décrivent le phénomène physique, sur chaque volume de contrôle ; puis la discrétisation du domaine considéré, en choisissant un schéma convenable qui représente la variation de notre quantité physique.

On montre ci-dessous un exemple de volume du contrôle bidimensionnel. Chacun de ces volumes de contrôle contenant un nœud dit: "nœud principal" (p). Les faces de ce volume sont localisées aux points (e) et (w) dans la direction r qui déterminent respectivement les faces « Est » et « Ouest », et aux points (n) et (s) dans la direction z, qui indiquent les faces « Nord » et « Sud ». On appelle respectivement les points qui sont au voisinage de « P » sur la direction r, (E : Est) et (W : West) et les voisins dans la direction z, (N: le Nord, S : le Sud).

On représente dans la figure suivante un volume de contrôle bidimensionnel en coordonnées cylindriques dans le plan (r, z) :

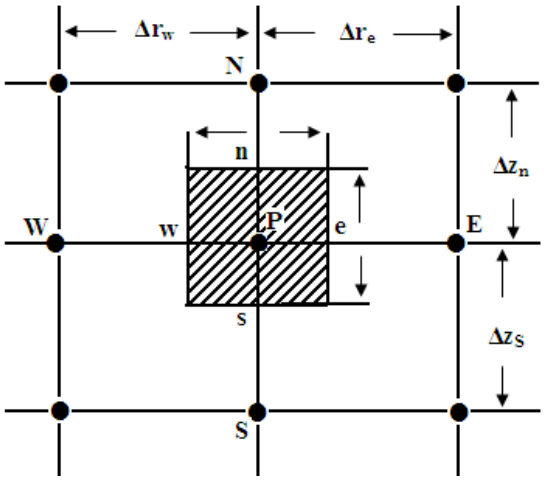


Figure 3.2 : Volume de contrôle bidimensionnel en coordonnées cylindriques.

3-4-2 Avantages de la méthode *MVF* :

On peut citer certains de ses avantages :

- Les équations ont une propriété de conservation. Cela signifie que l'extension du principe de conservation écrit sous une forme discrétisée pour un volume fini typique **[56]** est vérifiée pour l'ensemble du domaine numérique (conservation du flux dans tout le domaine de solution), on peut résumer tout cela dans la préservation du caractère conservatif des équations sur chaque volume de contrôle (Continuité des flux aux interfaces), valable pour n'importe quelle finesse du maillage.

- Tous les coefficients de la méthode des volumes finis sont toujours positifs.
- Son côté pratique et sa maniabilité lors de la résolution de cette classe de problèmes, les problèmes convectifs-diffusifs (Mise en œuvre relativement facile **[65]**).
- Elle est facilement utilisable avec des maillages non-structurés. On peut dire que sa formulation ne prend pas en compte la complexité du maillage, pour ce qui est de la discrétisation des lois de conservation.
- Elle est applicable aux géométries complexes.
- Temps de calcul et stockage avec une mémoire raisonnable.

3-4-3 Etapes de la méthode des volumes finis :

La méthode des volumes finis passe par des étapes qui sont :

- **Maillage du domaine physique**:

Le domaine de calcul est divisé en un nombre fini de points **[56]** (les nœuds du maillage), autour desquels on définit des volumes élémentaires appelés volumes de contrôle contigus, non juxtaposés et sans discontinuités aux interfaces ;

- **Discrétisation des équations modèles** :

Les équations aux dérivées partielles sous forme conservative, sont intégrées sur chaque volume de contrôle fini. Les intégrales sur un volume de contrôle en un nœud donné sont évaluées en approchant la variation de P par des profils ou des lois d'interpolation entre les nœuds voisins du point considéré. La dernière étape de la discrétisation c'est l'écriture des équations algébriques en fonction des valeurs de P aux nœuds du maillage ;

- **la recherche de la solution :** il faut choisir une méthode convenable pour la résolution du système d'équations algébrique linéaires sur le domaine du calcul.

a- Maillage du domaine d'étude :

Le maillage est la subdivision du domaine d'étude en grilles longitudinales et transversales dont l'intersection représente un nœud. La discrétisation du domaine est obtenue par un maillage constitué d'un réseau de points (nœuds). Ainsi un élément de volume (volume de contrôle) est défini autour de chaque nœud.

b- Discrétisation:

La discrétisation est une étape principale dans la méthode des volumes finis, elle contient une étape clé d'intégration. Ce passage (La discrétisation) nous permet d'obtenir une équation discrétisée au point nodale P_{ij} .pour obtenir la forme finale de l'équation discrétisée ; il

faut choisir un schéma convenable nous permettant d'obtenir une solution stable et de réaliser sa convergence.

c- Propriétés des schémas de discrétisation :

- **Conservation de propriété physique (conservation du flux)**

L'intégration de l'équation de convection-diffusion, sur un nombre fini de volumes de contrôle, donne un nombre d'équations de conservation discrétisés introduisant les flux de la propriété transportée à travers les faces du volume de contrôle. Pour assurer la conservation dans tout le domaine de solution, le flux sortant d'un volume de contrôle par une certaine face doit être égale au flux d'entrant dans le volume adjacent de même face (conservation du flux).

- **Limitation**

En chaque point nodal, les équations discrétisées représentent une série d'équations algébriques devant être résolues numériquement. Généralement dans ces problèmes les méthodes itératives sont les plus utilisées, ces dernières débutent le processus à partir d'estimations initiales de la distribution de la variable**,** et réalisent des itérations successives jusqu'à ce que la solution converge vers la solution du problème.

- **Transport**

Cette propriété de l'écoulement peut être illustrée en considérant une source de ϕ constante placée en un point P. Nous définirons le nombre de Peclect comme étant la mesure de la puissance relative de la convection par rapport à la diffusion $pe_i = \frac{F_i}{D_i}$.

3-5 Equation de transport :

Les équations de conservation qui régissent notre problème (équation de la continuité, de la quantité du mouvement, de l'énergie et de la concentration) sont présentées au chapitre précédent ; elles peuvent être écrites sous une forme conservative commune (équation de transport). Dans cette équation, la variable Φ, représente à chaque fois une des propriétés physique (la vitesse, la température, la concentration, la pression). La formulation de l'équation de transport permet de ne pas répéter le travail de discrétisation pour chaque équation. Donc chacune des équations peut être réduite à une seule équation générale, en coordonnées cylindriques selon la forme :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial w\phi}{\partial \theta} + \frac{\partial v\phi}{\partial z} = \Gamma\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}\right] + S_\phi \qquad (3.5)$$

Dans le cas d'un fluide axisymétrique :

$$\frac{\partial w\phi}{\partial \theta} = 0 \ et \ \ \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} = 0$$

Donc l'équation (3.5) devient :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z} = \Gamma\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}\right] + S_\phi \qquad (3.6)$$

Où les différents termes de cette équation sont définis comme :

$\frac{\partial \phi}{\partial t}$: Terme temporel.

$\frac{1}{\mathrm{r}}\frac{\partial \mathrm{ru}\phi}{\partial \mathrm{r}} + \frac{\partial \mathrm{v}\phi}{\partial \mathrm{z}}$: Terme convectif.

$\frac{1}{\mathrm{r}}\frac{\partial}{\partial \mathrm{r}}\left(\mathrm{r}\frac{\partial \phi}{\partial \mathrm{r}}\right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \mathrm{z}^2}$: Terme diffusif.

S_ϕ : Terme source.

Γ : Coefficient de diffusion

3-5-1 Discrétisation de l'équation de transport :

Le principe de discrétisation peut être illustré en considérant l'équation de transport pour une grandeur scalaire ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z} = \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial \phi}{\partial z})\right] + S_\phi$$

L'intégration sur le volume de contrôle :

La première étape c'est l'intégration sur le volume de contrôle et sur le temps, c'est une étape clé pour la méthode des volumes finis. L'évaluation des différentes intégrales de l'équation de transport ci-dessus demande que l'on fasse un certain nombre d'approximations de façon à former un système des équations linéaires reliant entre elles par les valeurs de la fonction Φ aux points du maillageP_{ij}.

$$\int_t \oint_{Vc}\left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z}\right] dVdt$$

$$= \int_t \oint_{Vc}\left[\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial \phi}{\partial z})\right] + (a\phi_P + b)\right] dVdt \qquad (3.7)$$

L'approche du type du volume de contrôle exige que l'on définisse autour du point P_{ij} un volume élémentaire sur lequel on va intégrer l'équation aux dérivées partielles. Pour deux points voisins, les volumes de contrôle respectifs doivent posséder une face commune. Il s'en suit que la réunion de tous les volumes de contrôle couvre l'ensemble du domaine du calcul. On remplace le volume de contrôle en coordonnées cylindriques par sa valeur dans l'intégrale de l'équation de transport :

$$\int_t \oint_{Vc} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z}\right] r dr 2\pi dz dt$$

$$= \int_t \oint_{Vc} \left[\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)\right] + (a\phi_P + b)\right] r dr 2\pi dz dt \qquad (3.8)$$

Puisque l'angle θ est constant, on peut diviser membre à membre $par\ 2\pi$ les intégrales de volume de l'équation (3.8) ; ce qui donne :

$$\int_t^{t+\Delta} \oint_{Vc} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z}\right] r dr dz dt$$

$$= \int_t \oint_{Vc} \left[\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)\right] + (a\phi_P + b)\right] r dr dz dt \qquad (3.9)$$

Avec : $dV = r dr d\theta dz \ \ et \ \ d\theta = cte.$

a) Discrétisation du terme temporel :

$$\int_w^e \int_s^n r dr dz \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt = r_p\, r|_w^e . z|_s^n . \phi|_t^{t+\Delta t} = \left(\phi_p^{t+\Delta t} - \phi_p^t\right) r_p \Delta r \Delta z$$

$$= \left(\phi_p^{t+\Delta t} - \phi_p^t\right) \Delta V \qquad (3.10)$$

Avec : $\Delta V = r_p \Delta r \Delta z$

b) Discrétisation du terme convectif :

Discrétisation du terme convectif suivant r :

$$\int_{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{e}} \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} r dr \int_s^n dz \int_t^{t+\Delta t} dt = (ru\phi)|_w^e \, \Delta z \Delta t = [(ru\phi)_e - (ru\phi)_w] \Delta z \Delta t \qquad (3.11)$$

$$\int_{w}^{e} \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} r dr \int_{s}^{n} dz \int_{t}^{t+\Delta t} dt = [r_e u_e \phi_e - r_w u_w \phi_w]\Delta z \Delta t = (F_e \phi_e - F_w \phi_w)\Delta t \qquad (3.12)$$

On définit les coefficients convectifs (Est et Ouest) :

$$F_e = r_e u_e . \Delta z \,, \quad F_w = r_w u_w . \Delta z$$

Discrétisation du terme convectif suivant z :

$$\int_{w}^{e} r dr \int_{s}^{n} \frac{\partial v\phi}{\partial z} dz \int_{t}^{t+\Delta t} dt = r_p . r|_w^e (v\phi)|_s^n \, \Delta t = r_p \Delta r((v\phi)_n - (v\phi)_s)\Delta t$$

$$= r_p \Delta r[v_n \phi_n - v_s \phi_s]\Delta t = \left[r_p \Delta r \, v_n \phi_n - r_p \Delta r \, v_s \phi_s \right]\Delta t \qquad (3.13)$$

La forme finale de cette équation est :

$$\int_{w}^{e} r dr \int_{s}^{n} \frac{\partial v\Phi}{\partial z} dz \int_{t}^{t+\Delta t} dt = (F_n \phi_n - F_s \phi_s)\Delta t \qquad (3.14)$$

De la même façon on définit les expressions des coefficients convectifs Nord et Sud :

$$F_n = r_p \, v_n \, \Delta r \,, \quad F_s = r_p \, v_s \, \Delta r$$

c) Discrétisation du terme diffusif :

Discrétisation du terme diffusif suivant r :

$$\int_{w}^{e} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) r dr \int_{s}^{n} dz \int_{t}^{t+\Delta t} dt = \left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right)|_w^e \, \Delta z \Delta t$$

$$= \left[\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right)_e - \left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right)_w\right]\Delta z \Delta t \qquad (3.15)$$

Pour avoir une forme adéquate de l'équation discrétisée, le coefficient de diffusion Γ et les gradients $\left(\frac{\partial \phi}{\partial r}\right), et \left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)$ sur les faces « Est » et « Ouest » sont nécessaires. Ces valeurs sont connues aux points nodaux, il faut les interpoler pour obtenir celles au centre des faces.

L'approximation linéaire semble la méthode la plus directe pour obtenir ces valeurs à l'interface. Si la grille est uniforme, le flux à travers les faces « Est et Ouest » est :

$$\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right)_e = \Gamma_e r_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta r_{PE}}$$

$$\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right)_w = \Gamma_w r_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta r_{PW}}$$

En remplaçant ces expressions dans l'équation (3.15) cela donne :

$$\int_w^e \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial \Phi}{\partial r}\right) r dr \int_s^n dz \int_t^{t+\Delta t} dt = \left(\frac{\Gamma_e \mathrm{r}_e}{\Delta r_{PE}}(\phi_E - \phi_P) - \frac{\Gamma_w \mathrm{r}_w}{\Delta r_{PW}}(\phi_P - \phi_W)\right).\Delta z \Delta t$$

$$= \left(D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W)\right)\Delta t \qquad (3.16)$$

Les coefficients diffusifs (Est et Ouest) sont définis ci-dessous :

$$D_e = \frac{\Gamma_e \mathrm{r}_e . \Delta z}{\Delta r_{PE}}$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w \mathrm{r}_w . \Delta z}{\Delta r_{PW}}$$

Discrétisation du terme diffusif suivant z :

$$\int_w^e r dr \int_s^n \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}) dz \int_t^{t+\Delta t} dt = r_p \,.\, r|_w^e \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)|_s^n \Delta t$$

$$= r_p . \Delta r \left[\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_n - \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_s\right]\Delta t \qquad (3.17)$$

En utilisant les approximations introduites précédemment, on peut écrire les flux à travers les faces Nord et Sud du volume de contrôle respectivement par :

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_n = \Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta z_{NP}}$$

$$\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_s = \Gamma_S \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta z_{PS}}$$

En substituant ces expressions dans l'équation (3.17) cela donne :

$$\int_w^e r dr \int_s^n \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial z}) dz \int_t^{t+\Delta t} dt = r_p . \Delta r \left(\Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta z_{NP}} - \Gamma_S \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta z_{PS}}\right)\Delta t =$$

$$= \left(\frac{\Gamma_n \, r_p . \Delta r}{\Delta z_{NP}}(\phi_N - \phi_P) - \frac{\Gamma_S \, r_p . \Delta r}{\Delta z_{PS}}(\phi_P - \phi_S)\right)\Delta t =$$

$$= \left(D_n(\phi_N - \phi_P) - D_s(\phi_P - \phi_S)\right)\Delta t \qquad (3.18)$$

La forme des coefficients diffusifs Nord et Sud s'écrit :

$$D_n = \frac{\Gamma_n \, r_p . \Delta r}{\Delta z_{NP}} \quad , \qquad D_s = \frac{\Gamma_S \, r_p . \Delta r}{\Delta z_{PS}}$$

d) Le terme source :

Dans les situations réelles, le terme source « S » peut être fonction de la variable dépendante ; dans ce cas, une approximation est adoptée pour le linéariser par la forme présentée ci-dessous de façon à forcer la convergence :

$S_\phi = a\phi_P + b$

Où :

b: Est la partie constante qui ne dépend pas explicitement de ϕ_P .

a : Etant la pente de ϕ_P.

Il est faut que $a < 0$ pour que la solution soit numériquement stable et que la convergence soit plus rapide **[65]**.

Discrétisation du terme source :

$$\int_t^{t+\Delta t}\int_w^e\int_s^n (a\phi_P + b) r dr dz\, dt = r_p\, r|_w^e\, (a\phi_P + b)\Delta z\Delta t = r_p.\Delta r(a\phi_P + b)\Delta z\Delta t$$
$$= a\phi_P.\, r_p.\Delta r\Delta z\Delta t + b.\, r_p.\Delta r\Delta z.\Delta t \qquad (3.19)$$

Donc la forme discrétisée est :

$$\int_t^{t+\Delta t}\int_w^e\int_s^n (a\phi_P + b) r dr dz\, dt = a\phi_P\Delta V\Delta t + b\Delta V\Delta t;\ \ \Delta V = r_p.\Delta r\Delta z \qquad (3.20)$$

La forme finale discrétisée de l'équation de transport (convection-diffusion) :

$$\left(\phi_p^{t+\Delta t} - \phi_p^t\right)\Delta V + \left(F_e\phi_e - F_w\phi_w\right)\Delta t + \left(F_n\phi_n - F_s\phi_s\right)\Delta t$$
$$= \left(D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W)\right)\Delta t + \left(D_n(\phi_N - \phi_P) - D_s(\phi_P - \phi_S)\right)\Delta t$$
$$+ a\phi_P\Delta V\Delta t + b\Delta V\Delta t \qquad (3.21)$$

Discrétisation de l'équation de continuité :

L'intégrale d'équation de continuité décrite dans le deuxième chapitre est donnée par :

$$\int_e^w\int_s^n \frac{1}{r}\frac{\partial(ru)}{\partial r} r dr 2\pi dz + \int_w^e\int_s^n \frac{\partial v}{\partial z} r dr 2\pi dz = [(ru)_e - (ru)_w]\Delta z + \left(r_p v_n - r_p v_s\right)\Delta r \qquad (3.22)$$

Nous trouvons :

$$\int_{Vc} \nabla.V\, dV = F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \qquad (3.23)$$

3-5-2 Choix du schéma de discrétisation :

Il faut choisir un schéma de discrétisation des termes convectifs et diffusifs pour obtenir une forme finale. Le schéma proposé pour la discrétisation est le schéma hybride, il est basé sur les propriétés de transport et de conservation. Ce schéma, dont la précision spatiale est réduite au premier ordre, utilise le prototype de la formule basée sur le nombre de Peclect local pour estimer le flux net à travers chaque face du volume de contrôle. Le schéma hybride se réduit à l'approximation du schéma centré *(CSD)* lorsque $|pe_i| < 2$ mais il devient identique au schéma Upwind *(UDS)* lorsque$|pe_i| \geq 2$.

3-5-3 Schéma de différentiation centré :

Le schéma aux différences centrales est un schéma conservatif ; il utilise des expressions substantielles pour l'évaluation du flux convectif aux interfaces du volume de contrôle (il réalise la propriété de conservation). Pour la propriété du transport, ce schéma introduit des influences vers tous les voisins du nœud *P* quand on calcule le flux de convection et de diffusion. L'approximation de différentiation centrée est utilisée pour montrer les termes de diffusion qui apparaissent dans le terme de droite de l'équation convection-diffusion, pour calculer les valeurs sur les faces des cellules pour les termes convectifs posés dans le membre de gauche de cette équation, il parait raisonnable d'essayer l'interpolation linéaire dans le cas d'un maillage uniforme. Le schéma ne reconnaît pas le sens d'écoulement, les valeurs de la propriété ϕ peuvent être écrits sur les faces des cellules d'un maillage uniforme comme :

$$\begin{cases} \phi_e = \dfrac{\phi_P + \phi_E}{2}, \quad \phi_w = \dfrac{\phi_W + \phi_P}{2} \\ \phi_n = \dfrac{\phi_P + \phi_N}{2}, \quad \phi_s = \dfrac{\phi_S + \phi_P}{2} \end{cases}$$

On substitue ces valeurs dans la forme finale discrétisée de l'équation de transport, après un réarrangement nous avons :

$$\left[\left(D_e + \frac{F_e}{2}\right) + \left(D_w - \frac{F_w}{2}\right) + \left(D_n + \frac{F_n}{2}\right) + \left(D_s - \frac{F_s}{2}\right) + \frac{\Delta V}{\Delta t} - a\Delta V\right] {\phi_P}^{t+\Delta t}$$
$$= (D_e - \frac{F_e}{2}){\phi_E}^{t+\Delta t} + (D_w + \frac{F_w}{2}){\phi_W}^{t+\Delta t} + \left(D_n - \frac{F_n}{2}\right){\phi_N}^{t+\Delta t}$$
$$+ \left(D_s + \frac{F_s}{2}\right){\phi_S}^{t+\Delta t} + b\Delta V + \phi_p^t \frac{\Delta V}{\Delta t} \qquad (3.24)$$

Nous introduisons des opérations mathématiques sur le terme convectif :

$$\left[\left(D_e-\frac{F_e}{2}\right)+\left(D_w+\frac{F_w}{2}\right)+\left(D_n-\frac{F_n}{2}\right)+\left(D_s+\frac{F_s}{2}\right)+F_e-F_w+F_n-F_s+\frac{\Delta V}{\Delta t}-a\Delta V\right]{\phi_P}^{t+\Delta t}$$
$$=(D_e-\frac{F_e}{2}){\phi_E}^{t+\Delta t}+(D_w+\frac{F_w}{2}){\phi_W}^{t+\Delta t}+\left(D_n-\frac{F_n}{2}\right){\phi_N}^{t+\Delta t}$$
$$+\left(D_s+\frac{F_s}{2}\right){\phi_S}^{t+\Delta t}+b\Delta V+\phi_p^t\frac{\Delta V}{\Delta t} \qquad (3.25)$$

Après l'identification des coefficients de $\phi_W,\phi_E,\phi_N,\phi_S$ aux a_W,a_E,a_N,a_S , on a :

$${a_P\phi_P}^{t+\Delta t}=a_W{\phi_W}^{t+\Delta t}+a_E{\phi_E}^{t+\Delta t}+a_N{\phi_N}^{t+\Delta t}+a_S{\phi_S}^{t+\Delta t}+{a_P}^0\phi_p^t+b\Delta V \qquad (3.26)$$

Avec :

$${a_P}^0=\frac{r_P\Delta r\Delta z}{\Delta t}=\frac{\Delta V}{\Delta t}\quad et\ \Delta F=F_e-F_w+F_n-F_s$$

Tableau3.1 : Les coefficients du schéma centré pour la convection-diffusion

a_E	a_W	a_N	a_S	a_P
$\left(D_e-\frac{F_e}{2}\right)$	$\left(D_w+\frac{F_w}{2}\right)$	$\left(D_n-\frac{F_n}{2}\right)$	$\left(D_s+\frac{F_s}{2}\right)$	${a_P}^0+a_W+a_E+a_N+a_S-a\Delta V+(\Delta F)$

3-5-4 Schéma de différentiation Upwind (décentré amont) :

L'inconvénient principal du schéma centré est que la valeur de la propriété sur la face (Ouest) w est influencée de manière égale par les valeurs $\phi_P\ et\ \phi_W$ (inaptitude à identifier le sens de l'écoulement). Dans un écoulement fortement convectif dans les sens « Ouest-Est », ce traitement n'est pas recommandé car la face Ouest de la cellule doit recevoir une plus grande influence du nœud W que du nœud P. Le schéma Upwind prend en considération la direction du flux pour évaluer la valeur sur la face de la cellule, donc il est construit pour éviter de dire que la convection est forte dans une direction. Dans les cas suivants, nous montrons les valeurs nodales utilisées pour estimer les valeurs sur les faces des cellules.

a)- Quand la direction de l'écoulement est positive :

$$\begin{cases}u_w>0\ ;\ u_e>0\ ,donc\ F_w>0\ ;\ F_e>0\\ u_n>0\ ;\ u_s>0\ ,donc\ F_n>0\ ;\ F_s>0\end{cases}$$

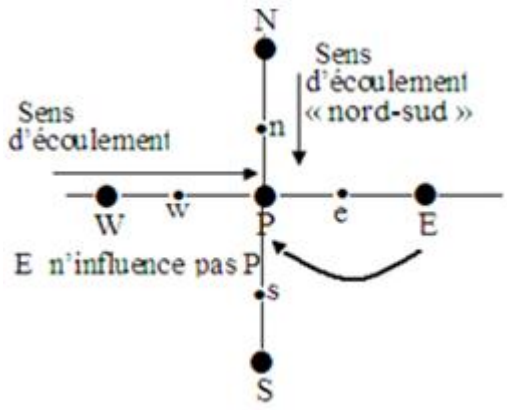


Figure 3.3 : Explication au schéma « Upwind » pour le sens positif.

Dans la figure ci-dessus, nous montrons une figure explicative au schéma "Upwind" où l'écoulement est dans le sens positif. Donc le schéma Amont devient :

$$\begin{cases} \phi_w = \phi_W \; et \; \phi_e = \phi_P \\ \phi_s = \phi_S \; et \; \phi_n = \phi_P \end{cases}$$

Après une substitution de ces valeurs, l'équation de transport peut être réarrangée comme suit :

$$\left[(D_e + F_e) + D_w + (D_n + F_n) + D_s + \frac{\Delta V}{\Delta t} - a\Delta V\right] {\phi_P}^{t+\Delta t}$$
$$= D_e {\phi_E}^{t+\Delta t} + (D_w + F_w){\phi_W}^{t+\Delta t} + D_n {\phi_N}^{t+\Delta t} + (D_s + F_s){\phi_S}^{t+\Delta t} + b\Delta V$$
$$+ \phi_p^t \frac{\Delta V}{\Delta t} \qquad (3.27)$$

Qui donne finalement :

$$\left[(D_e + F_w) + (D_s + F_s) + D_w + D_n + (F_e - F_w - F_s + F_n) + \frac{\Delta V}{\Delta t} - a\Delta V\right] {\phi_P}^{t+\Delta t}$$
$$= D_e {\phi_E}^{t+\Delta t} + (D_w + F_w){\phi_W}^{t+\Delta t} + D_n {\phi_N}^{t+\Delta t} + (D_s + F_s){\phi_S}^{t+\Delta t} + b\Delta V$$
$$+ \phi_p^t \frac{\Delta V}{\Delta t} \qquad (3.28)$$

Si nous introduisons l'opérateur suivant :

$$[A, B] = max(A, B)$$

Alors le schéma décentré s'écrit :

$$F_e {\phi_e}^{t+\Delta t} = {\phi_P}^{t+\Delta t}[F_e, 0] - \phi_E[-F_e, 0]$$
$$F_w {\phi_w}^{t+\Delta t} = {\phi_W}^{t+\Delta t}[F_w, 0] - \phi_P[-F_w, 0]$$

En accordant les coefficients de $\phi_W, \phi_E, \phi_N, \phi_S$ aux a_W, a_E, a_N, a_S , on trouve :

$$a_P{\phi_P}^{t+\Delta t} = a_W{\phi_W}^{t+\Delta t} + a_E{\phi_E}^{t+\Delta t} + a_N{\phi_N}^{t+\Delta t} + a_S{\phi_S}^{t+\Delta t} + {a_P}^0\phi_p^t + b\Delta V \qquad (3.29)$$

Les coefficients convectifs-diffusifs du Schéma Centré sont résumés dans le tableau suivant :

Tableau3.2 : Les coefficients convectifs-diffusifs du schéma « amont » dans le sens positif.

	a_E	a_W	a_N	a_S	a_P
$F_w > 0$ et $F_e > 0$ $F_n > 0$; $F_s > 0$	D_e	$D_w + [F_w, 0]$	D_n	$D_s + [F_s, 0]$	$(D_e + F_w) + (D_s + F_s) + D_w + D_n + \Delta F + {a_P}^0 - a\Delta V$

b)- Quand l'écoulement est dans le sens négatif :

$$\begin{cases} u_w < 0\ ;\ u_e < 0\ , donc\ F_w < 0\ ;\ F_e < 0 \\ u_n < 0\ ;\ u_s < 0\ , donc\ F_n < 0\ ;\ F_s < 0 \end{cases}$$

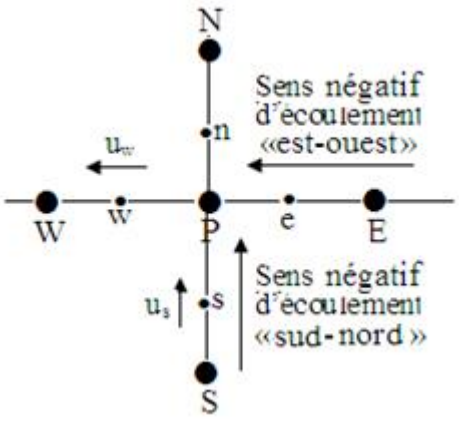


Figure 3.4 : le sens négatif du schéma « Upwind ».

Le schéma Upwind devient :

$$\begin{cases} \phi_w = \phi_P \ \ et \ \ \phi_e = \phi_E \\ \phi_s = \phi_P \ \ et \ \ \phi_n = \phi_N \end{cases}$$

Dans ce cas l'équation de transport s'écrit :

$$\left[(D_e - F_e) + D_w + (D_n - F_n) + D_s + F_e - F_w + F_n - F_s + \frac{\Delta V}{\Delta t} - a\Delta V\right]{\phi_P}^{t+\Delta t} = (D_e - F_e){\phi_E}^{t+\Delta t} + D_w{\phi_W}^{t+\Delta t} + (D_n - F_n){\phi_N}^{t+\Delta t} + D_s{\phi_S}^{t+\Delta t} + b\Delta V + \phi_p^t\frac{\Delta V}{\Delta t} \qquad (3.30)$$

Un accordement des coefficients nous donne la forme générale suivante :

$$a_P{\phi_P}^{t+\Delta t} = a_W{\phi_W}^{t+\Delta t} + a_E{\phi_E}^{t+\Delta t} + a_N{\phi_N}^{t+\Delta t} + a_S{\phi_S}^{t+\Delta t} + {a_P}^0\phi_p^t + b\Delta V \qquad (3.31)$$

Tableau3.3 : Les coefficients convectifs-diffusifs du schéma « Upwind» dans la direction négative d'écoulement.

	a_E	a_W	a_N	a_S	a_P
$F_w < 0\ et\ F_e < 0$ $F_n < 0\ ;\ F_s < 0$	$D_e + [-F_e, 0]$	D_w	$D_n + [-F_n, 0]$	D_s	$[(D_e - F_e) + D_w + (D_n - F_n) + D_s + \Delta F + {a_P}^0 - a\Delta V]$

3-5-5 Schéma de Différentiation Hybride (HDS) :

Le schéma hybride a été introduit par *Spalding* en 1972 **[62]**. Il utilise le prototype de la formule basée sur le nombre du Peclect. Le schéma hybride est une combinaison entre le schéma Centré et le schéma Amont. Le schéma centré (précis au deuxième ordre) est utilisé pour les petits Peclect ($pe_i < 2$) tandis que le schéma Amont (précis au premier ordre et tenant compte du sens de l'écoulement) est utilisé pour les Peclect plus grands $pe_i \geq 2$

Où : le nombre de Peclet est défini par :

$$pe_i = \frac{F_i}{D_i} = \frac{u_i(\Delta r_i)}{\Gamma_i} \quad avec\ \ (i = e, w, n, s)$$

Suivant le schéma hybride les coefficients a_i tel que $(i = e, w, n, s)$ sont donnés par :

$$a_e = max\left[-F_e;\ D_e - \frac{F_e}{2}; 0\right]$$

$$a_w = max\left[F_w;\ D_w + \frac{F_w}{2}; 0\right]$$

$$a_n = max\left[-F_n;\ D_n - \frac{F_n}{2}; 0\right]$$

$$a_s = max\left[F_s;\ D_s + \frac{F_s}{2}; 0\right]$$

3-6 Equation de la pression

La résolution des équations de Navier-Stocks présente une difficulté du fait que le champ de pression n'est pas connu et, il n'existe pas d'équation gouvernante pour le champ de pression p. Dans le cas d'un fluide incompressible le champ de pression n'est pas connu, et on a besoin des algorithmes de type couplage pression-vitesse pour résoudre le problème. En se basant sur les équations de quantité de mouvement discrétisées, celles-ci étant pleinement implicites, on pourra à chaque itération déduire le champ de vitesse à partir du champ de pression. Dans notre étude nous ne nous intéressons pas au champ de pression mais aux autres champs (température, concentration, vitesses),

L'astuce numérique que nous allons mettre en œuvre pour pallier cette difficulté repose sur une méthode qui est basée sur une division du pas du temps.

Réécrivons l'équation de conservation de la quantité de mouvement projetée sur les deux directions, radiale et axiale comme suit :

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial ruu}{\partial r}+\frac{\partial vu}{\partial z}=\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial u}{\partial z})\right]+S_u-\frac{\partial p}{\partial r} \tag{3.32}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial ruv}{\partial r}+\frac{\partial vu}{\partial z}=\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial v}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial v}{\partial z})\right]+S_v-\frac{\partial p}{\partial z} \tag{3.33}$$

On introduit un temps arbitraire $t+\frac{\Delta t}{2}$ dans l'intervalle$[t,t+\Delta t]$, c.-à-d. On décompose le terme de stockage du temps t à $t+\frac{\Delta t}{2}$ et de $t+\frac{\Delta t}{2}$ à $t+\Delta t$, on trouve:

$$\frac{u^{t+\Delta t}-u^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}+\frac{u^{t+\frac{\Delta t}{2}}-u^{t}}{\Delta t}=-\frac{1}{r}\frac{\partial ruu}{\partial r}-\frac{\partial vu}{\partial z}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial u}{\partial z})\right]+S_u-\frac{\partial p}{\partial r} \tag{3.34}$$

$$\frac{v^{t+\Delta t}-v^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}+\frac{v^{t+\frac{\Delta t}{2}}-v^{t}}{\Delta t}=-\frac{1}{r}\frac{\partial ruv}{\partial r}-\frac{\partial vu}{\partial z}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial v}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial v}{\partial z})\right]+S_v-\frac{\partial p}{\partial z} \tag{3.35}$$

L'équation de quantité du mouvement projetée sur les deux axes se donne :

$$\frac{u^{t+\frac{\Delta t}{2}}-u^{t}}{\Delta t}=-\frac{1}{r}\frac{\partial ruu}{\partial r}-\frac{\partial vu}{\partial z}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\frac{\partial u}{\partial z})\right]+S_u \tag{3.36}$$

$$\frac{v^{t+\frac{\Delta t}{2}}-v^{t}}{\Delta t}=-\frac{1}{r}\frac{\partial ruv}{\partial r}-\frac{\partial vu}{\partial z}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r\frac{\partial v}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma\frac{\partial v}{\partial z}\right)\right]+S_v \tag{3.37}$$

L'algorithme couplage pression-vitesse consiste en deux étapes, la première dite :

Etape de prédiction :

La résolution de ces deux équations de quantité du mouvement représente cette étape, elle nous permet d'obtenir le champ provisoire de vitesse (u^{t^*},v^{t^*}) qui est calculé simplement à partir des champs u^t et v^t. Le champ provisoire ne vérifie à priori pas l'équation de continuité. Maintenant, on essai de découvrir l'équation de pression, tel que :

$$\frac{u^{t+\Delta t}-u^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}=-\frac{\partial p}{\partial r} \tag{3.38}$$

$$\frac{v^{t+\Delta t}-v^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}=-\frac{\partial p}{\partial z} \tag{3.39}$$

Pour trouver l'équation de Poisson de la pression, on dérive les deux équations ci-dessus respectivement par rapport à r et à z , et on introduit des opérations mathématiques d'où :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{u^{t+\Delta t}-u^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}\right)=-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial p}{\partial r}\right) \tag{3.40}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{v^{t+\Delta t}-v^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}\right)=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right) \tag{3.41}$$

La sommation de ces deux dérivées nous donne :

$$\frac{1}{\Delta t}\left[\left(\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^{t+\Delta t})}{\partial r}+\frac{\partial v^{t+\Delta t}}{\partial z}\right)-\left(\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial r}+\frac{\partial v^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\partial z}\right)\right]$$
$$=-\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial p}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)\right] \tag{3.42}$$

D'après l'équation de continuité en coordonnées cylindriques on a :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^{t+\Delta t})}{\partial r}+\frac{\partial v^{t+\Delta t}}{\partial z}=0 \tag{3.43}$$

Par conséquent, l'équation (3.42) devient :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial p}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial p}{\partial z}\right)=\frac{1}{\Delta t}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^{t+\frac{\Delta t}{2}})}{\partial r}+\frac{\partial v^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\partial z}\right) \tag{3.44}$$

Etape de projection :

Pour obtenir les champs des vitesses radiale et axiale ($u^{t+\Delta t}\ et\ v^{t+\Delta t}$), nous avons l'étape de projection qui consiste à réintroduire le champ de pression calculé ci-dessus, dans les équations (3.40, 3.41), celui-ci convient aussi bien à l'équation de quantité de mouvement qu'à l'équation de continuité.

$$u_{ij}^{t+\Delta t}=u_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}}-\frac{\left(P_{i+1\,j}-P_{i\,j}\right)}{\Delta r}\Delta t \tag{3.45}$$

$$v_{ij}^{t+\Delta t}=v_{ij}^{t+\frac{\Delta t}{2}}-\frac{\left(P_{i+1\,j}-P_{i\,j}\right)}{\Delta z}\Delta t \tag{3.46}$$

Discrétisation de l'équation de Pression

L'équation de pression est une équation de transport dont le terme de stockage et les termes convectifs sont nuls : $\nabla\left(\Gamma.\nabla(\phi)\right)=S_\phi$. L'équation de pression a la forme de l'équation de poisson, la propriété physique ϕ dans ce cas est la pression :

Equation de poisson :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)=S_\phi$$

L'intégration sur le volume de contrôle de l'expression précédente s'écrit :

$$\begin{aligned}\int_{Vc}&\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)-S\right)dV\\&=\int_w^e\int_s^n\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\,\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)rdrdz+\int_w^e\int_s^n\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)rdrdz-\int_w^e\int_s^n S_\phi\,rdrdz\\&=0\end{aligned} \tag{3.47}$$

En intégrant cela nous résulte l'expression :

$$\left[\left(r\,\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)|_w^e\,\Delta z+\,r_P\Delta r\left(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)|_s^n\right]-\,S_P\,r_P\Delta r\Delta z\,=0 \tag{3.48}$$

Pour obtenir les valeurs au centre des faces. On utilise l'approximation linéaire, pour les gradients $\left(\frac{\partial \phi}{\partial r}\right)$ et $\left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)$ connus aux points nodaux :

$$\left[\frac{\Delta z\ \mathrm{r}_e}{\Delta r_{PE}}(\phi_E - \phi_P) - \frac{\Delta z\ \mathrm{r}_w}{\Delta r_{PW}}(\phi_P - \phi_W)\right] + \left[\frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{NP}}(\phi_N - \phi_P) - \frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{PS}}(\phi_P - \phi_S)\right] - S\ r_P \Delta r \Delta z \quad (3.49)$$

Après un réarrangement, l'expression (3.49) devient :

$$\left[\frac{\Delta z\ \mathrm{r}_e}{\Delta r_{PE}} + \frac{\Delta z\ \mathrm{r}_w}{\Delta r_{PW}} + \frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{NP}} + \frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{PS}}\right]\phi_P = \frac{\Delta z\ \mathrm{r}_e}{\Delta r_{PE}}\phi_E + \frac{\Delta z\ \mathrm{r}_w}{\Delta r_{PW}}\ \phi_W + \frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{NP}}\phi_N + \frac{r_P \Delta r}{\Delta z_{PS}}\phi_S + S\ r_P \Delta r \Delta z \quad (3.50)$$

D'où sa forme discrétisée

$$a_p \phi_P = a_w \phi_W + a_e \phi_E + a_s \phi_S + a_n \phi_N + S\Delta V \quad (3.51)$$

Où les différents coefficients sont donnés :

$$\begin{cases} a_w = D_w;\ a_e = D_e\ ;\ a_s = D_s\ ;\ a_n = D_n \\ \Gamma_e = \Gamma_w = \Gamma_s = \Gamma_n = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_e = \dfrac{\Delta z\ \mathrm{r}_e}{\Delta r_{PE}} \\ a_w = \dfrac{\Delta z\ \mathrm{r}_w}{\Delta r_{PW}} \\ a_n = \dfrac{r_P \Delta r}{\Delta z_{NP}} \\ a_s = \dfrac{r_P \Delta r}{\Delta z_{PS}} \\ Avec :\ a_p = a_e + a_w + a_n + a_s \end{cases}$$

3-6-1 Résolution de l'équation de Pression :

La discrétisation de l'équation de Pression nous donne un système linéaire d'une équation algébrique, on utilise une méthode itérative de Gauss-Seidel pour résoudre l'équation de poisson ; on a choisi cette méthode pour sa rapidité de convergence.

3-6-2 Méthode de Gauss Seidel :

Le fait que les variables dépendent les unes des autres, une méthode itérative est nécessaire pour arriver à une solution finale. Plusieurs techniques numériques sont utilisées pour assurer la stabilité de la solution ainsi que la convergence ; la méthode de Gauss Seidel

est l'une des ces méthodes. On l'utilisera pour résoudre l'équation de poisson (pression). La méthode de Gauss Seidel consiste à calculer ${\phi_{i,j}}^{k+1}$ à partir d'une estimation de solution ${\phi_{i,j}}^{k}$ à l'itération k comme suit :

$$a_P {\phi_{i,j}}^{k+1} = a_W {\phi_{i-1,j}}^{k+1} + a_E {\phi_{i+1,j}}^{k} + a_N {\phi_{i,j+1}}^{k} + a_S {\phi_{i,j-1}}^{k+1} + S_P \Delta V \qquad (3.52)$$

Le contrôle du processus itératif se fait par un test de convergence sur la variable ϕ. On arrête les itérations lorsque les valeurs de la variable ϕ restent pratiquement constantes entre deux itérations. Ceci se traduire par le critère de convergence relatif pour chaque variable. La condition de convergence est définie par :

$$\left| \frac{{\phi_{i,j}}^{k+1} - {\phi_{i,j}}^{k}}{{\phi_{i,j}}^{k+1}} \right| \leq \varepsilon \qquad (3.53)$$

ε : Valeur du critère de convergence.

Le choix de ε dépend de la précision qu'on cherche, on choisi $\varepsilon = 10^{-6}$ **[64]**. Si la condition de convergence n'est pas encore satisfaite, on pose que: ${\phi_{i,j}}^{k} = {\phi_{i,j}}^{k+1}$, et on refait les calculs jusqu'à la convergence.

3-7 Résolution du système des équations algébriques :

Pour résoudre le problème convection-diffusion, écrivons les équations discrétisées d'une forme algébrique pour chaque point nodal de la grille. Ceci donnera une série d'équations algébriques à résoudre pour obtenir la distribution de la propriété transportée ϕ .

Dans ce travail on a utilisé les méthodes ADI et de Gauss-Seidel. La méthode ADI pour résoudre le système d'équations résultant de la discrétisation de l'équation de transport, et la méthode de Gauss-Seidel pour résoudre l'équation de poisson.

3-7-1 Méthode ADI

Schéma implicite :

Le grand avantage du schéma implicite est que ce dernier n'est pas dépendant ou bien restreint au critère de la stabilité, il se distingue par sa stabilité quelque soit le Δt autrement dit il est inconditionnellement stable. Dans cette étude on a choisi la méthode ADI, largement utilisée dans la résolution des problèmes de transport, bidimensionnels et qui est stable quelque soit la valeur de Δr et Δt. En plus de cela, la solution des systèmes tridiagonaux pour

cette méthode est plus simple que la solution des autres méthodes implicites. Le nom ADI (Alternative-Direction-Implicite) vient d'Alterner la Direction après chaque traversée, et Implicite parce que dans cette solution les valeurs de ϕ ne sont pas trouvées directement. Elles sont trouvées après la résolution d'un ensemble d'équations, le schéma ADI consiste à diviser le pas du temps Δt en deux pas :

Le premier pas $t \to t + \frac{1}{2}\Delta t$: l'ADI, consiste en une discrétisation implicite selon la direction des r au temps $t + \frac{1}{2}\Delta t$ et explicite selon la direction des z au temps t, cela nous permet d'écrire l'équation de transport pour un point P_{ij} du domaine sous la forme :

$$-a_w {\phi_W}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + a_p {\phi_P}^{t+\frac{\Delta t}{2}} - a_e {\phi_E}^{t+\frac{\Delta t}{2}} = a_s {\phi_S}^{t} + a_n {\phi_N}^{t} + a_P{}^0 {\phi_P}^{t} + b\Delta V \qquad (3.54)$$

Le deuxième pas $t + \frac{1}{2}\Delta t \to t + \Delta t$: Pour cette direction en prenant l'implicite suivant z au temps $t + \Delta t$, et l'explicite suivant r au temps $t + \frac{1}{2}\Delta t$, l'équation de transport pour un point P_{ij} aura la forme :

$$-a_s {\phi_S}^{t+\Delta t} + a_p {\phi_P}^{t+\Delta t} - a_n {\phi_N}^{t+\Delta t} = -a_w {\phi_W}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + a_e {\phi_E}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + a_P{}^0 {\phi_P}^{t+\frac{\Delta t}{2}} + b\Delta V \qquad (3.55)$$

Finalement on obtient deux systèmes algébriques que l'on résout par une méthode directe, qu'est la méthode de Gauss-Seidel.

3-8 Les conditions aux limites :

Les conditions aux limites sont appliquées à toutes les frontières externes du domaine du calcul, les conditions de Dirichlet, et de Cauchy sont utilisées à l'entrée du creuset. Sur les parois du creuset les conditions aux limites pour les vitesses et la concentration sont du type de Neumann, mais la température est une fonction linéaire de la distance axiale. Sur l'axe de symétrie, la condition de la continuité est imposée c.-à-d. la dérivée est nulle pour toutes les variables (la température, la concentration, les vitesses), la condition dans ce cas est de type de Neumann. Dans cette partie, nous présentons les conditions aux limites pour notre domaine d'étude :

A l'entrée supérieure (condition de Cauchy**) :**

$$e_z.\nabla C = \left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m(C - 1) \quad (3.56)$$

Sachant que :

e_z : Vécteur d'unité pour l'axe de croissance (z).

∇C : Gradient de la concentration.

$Pe_m = \frac{u_m}{\alpha_m} R_d$: Nombre de Peclect pour le liquide.

A l'interface liquide –solide :

La condition de la concentration est donnée sous la forme de la condition de Neumann :

$$n.\nabla C = \left[\left(\frac{\rho_c}{\rho_m}\right) - K\right]\left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_c C(n.e_z) \quad (3.57)$$

K : Coefficient de ségrégation.

$Pe_c = \frac{u_c}{\alpha_m} R_d$: Nombre de Peclect pour le solide.

n : Vecteur d'unité normal au front de croissance.

Pour la surface libre (condition de Cauchy**) :** La surface libre subite à un grand gradient thermique c.-a-d. Il y a une convection de Marangoni, donc nous imposons la condition suivante :

$$\nabla V = Ma.\nabla T \quad (3.58)$$

$Ma = \left(\frac{\partial \gamma}{\partial T}\right) R_d T_m / (\mu_m \alpha_m)$: Nombre de Marangoni.

$\frac{\partial \gamma}{\partial T}$: Coefficient température-tension superficielle.

μ_m : Viscosité du fluide.

La paroi droite du creuset : La température de la paroi droite du creuset, est donnée comme une fonction linéaire de la distance axiale z longitudinalement à la paroi:

$$T_d(z) = T_d|_0 - \left(T_d|_{L_h} - T_d|_0\right) z/L_h \quad (3.59)$$

A la surface du matériau (condition de Cauchy**) :** Le transfert thermique du système au milieu externe (à l'ambiant) est traduit par le terme de conduction-convection, selon le bilan énergétique ci-dessous :

$$-n.k_i\nabla T = Bi(T - T_a) \quad (3.60)$$

Tel que :

$$Bi = h\,R_d/k_m$$

Où :

n : Vecteur d'unité normal sur la surface du liquide ou du solide se dirigeant à l'extérieur.

k_i : Rapport de la conductivité thermique de la phase i sur la phase liquide.

Bi : Nombre de Biot.

T_a : Température ambiante.

Pour le liquide :

$$-n.k_m\nabla T = Bi(T - T_a) \quad (3.60.1)$$

Pour le solide :

$$-n.k_s\nabla T = Bi(T - T_a) \quad (3.60.2)$$

A l'extrémité de la fibre (condition de Dirichlet et de Neumann) :

Dans la fin du domaine $(z = L)$, la condition du flux nul est employée. La longueur L est plus grande que la longueur de la zone fondue calculée. Par conséquent, en utilisant la température ambiante comme une condition à la limite, c.-à-d. à $(z = L)$ on a :

$$T = T_a \quad (3.61)$$

3-8-1 La forme générale des conditions aux limites :

Pour les points situés aux frontières du domaine d'étude, l'équation générale doit être modifiée pour introduire les conditions aux limites.

Pour satisfaire la propriété de la conservation, on écrit les conditions aux limites sous la forme générale ci-dessous et nous faisons un résumé pour la forme de ces derniers selon le tableau ci-dessous :

La forme générale des conditions aux limites s'écrit :

$$a.\phi + b.\frac{\partial \phi}{\partial n} = c$$

a, b, c : Constantes.

n : La normale.

Tableau 3.4 : Forme générale des conditions aux limites.

La condition à la limite	**Sous la forme :** $\boldsymbol{a.\phi + b.\frac{\partial \phi}{\partial n} = c}$	$\boldsymbol{a}$	$\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{c}$
A l'entrée : $e_z.\nabla C = \left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m(C-1)$	$\left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m.C - \frac{\partial C}{\partial z} = \left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m$	$\left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m$	-1	$\left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_m$
A la surface du matériau, le transfert thermique : $-n.k_i \nabla T = Bi(T - T_a)$	$Bi\,.T + k_i \frac{\partial T}{\partial r} = Bi.T_a$	Bi	k_i	0
A La fin du domaine, le flux thermique est nul :	$0.T + \frac{\partial T}{\partial r} = 0$	0	1	0
Sur l'axe de symétrie, il ya la condition de continuité pour toutes les variables.	$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 ; \frac{\partial T}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial u}{\partial r} = 0 ; \frac{\partial v}{\partial r} = 0$	0	1	0

A l'interface liquide-solide : Puisque l'interface se localise à l'intérieur du domaine d'étude, la discrétisation de la condition sur cette interface se fait par l'intégration sur le volume du contrôle :

$$\iint_{w\,n}^{e\,s} \left[\left(\frac{\rho_c}{\rho_m}\right) - K\right] \left(\frac{Sc}{Pr}\right) Pe_c C.rdrdz = \iint_{w\,n}^{e\,s} \frac{\partial C}{\partial z}.rdrdz \qquad (3.62)$$

Nous trouvons :

$$a_P C_P = a_w C_W + a_e C_E + a_s C_S + a_n C_N + S_C.r_p \Delta r.\Delta z \qquad (3.63)$$

Avec :

$$a_P = 2.\left(\left[\left(\frac{\rho_c}{\rho_m}\right) - K\right]\left(\frac{Sc}{Pr}\right)Pe_c\right).\Delta z \;\; ; \;\; a_w = 0 \; ; \; a_e = 0 \; ; \;\; a_s = -1 \;\; a_n = 1 \; ; \; S_C = 0$$

3-8-2 Discrétisation des conditions aux limites :

Puisque les conditions aux limites se situent aux frontières du domaine, la discrétisation de ces derniers (les conditions aux limites) sera seulement pour les deux derniers points localisés aux limites du domaine d'étude.

Pour le premier nœud :

$$\begin{cases} a_1.\phi_{1,j+1} + \dfrac{b_1.\phi_{2,j+1} - b_1.\phi_{1,j+1}}{\Delta n} = c_1 \\ \left(a_1 - \dfrac{b_1}{\Delta n}\right).\phi_{1,j+1} + \dfrac{b_1.\phi_{2,j+1}}{\Delta n} = c_1 \end{cases} \tag{3.64}$$

Pour le dernier nœud on écrit :

$$\begin{cases} a_{N-1}.\phi_{N-1,j+1} + \dfrac{b_{N-1}.\phi_{N,j+1} - b_{N-1}.\phi_{N-1,j+1}}{\Delta n} = c_{N-1} \\ \left(a_{N-1} - \dfrac{b_{N-1}.\phi_{N-1,j+1}}{\Delta n}\right).\phi_{N-1,j+1} + \dfrac{b_{N-1}.\phi_{N,j+1}}{\Delta n} = c_{N-1} \end{cases} \tag{3.65}$$

3-9 Méthode de Gauss :

La matrice doit être comme suit :

$$\begin{bmatrix} \left(a_1 - \frac{b_1}{\Delta n}\right) & \frac{b_1}{\Delta n} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{b_1}{\Delta n} & \left(a_2 - \frac{b_2}{\Delta n}\right) & \frac{b_2}{\Delta n} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{b_2}{\Delta n} & \left(a_3 - \frac{b_3}{\Delta n}\right) & \frac{b_3}{\Delta n} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{b_3}{\Delta n} & \left(a_4 - \frac{b_4}{\Delta n}\right) & \frac{b_4}{\Delta n} & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{b_{N-2}}{\Delta n} & \left(a_{N-1} - \frac{b_{N-1}}{\Delta n}\right) & \frac{b_{N-1}}{\Delta n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{b_N}{\Delta n} & a_N - \frac{b_N}{\Delta n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{1,j+1} \\ \phi_{2,j+1} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,j+1} \\ \phi_{N,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1,j} \\ c_{2,j} \\ \vdots \\ c_{N-1,j} \\ c_{N,j} \end{bmatrix}$$

Tout problème mathématique à structure linéaire se traduira toujours au niveau du calcul numérique par un problème d'algèbre linéaire. La méthode de Gauss est une méthode directe basée sur le principe de ramener le problème par des opérations mathématiques à un système tridiagonal, c.-à-d. éliminer les inconnus d'une façon systématique jusqu'à l'obtention d'un système tridiagonal.

Elimination de Gauss :

L'élimination de Gauss consiste à la transformation de la matrice précédente à une matrice tridiagonale supérieure ou inférieure, en ne changeant rien aux caractères de la matrice, cette transformation permet de gagner le temps et d'éliminer le nombre des inconnues. Si on choisit la transformation tridiagonale supérieure, il faut introduire des opérations mathématiques, donc la matrice ci- dessus devient comme suit :

$$\begin{bmatrix} D_P & D_S & . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & D^*_P & D^*_S & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & D^*_P & D^*_S & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & 0 & D^*_P & D^*_S & . \\ . & . & . & . & . & . & 0 & D^*_P & \phi_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ . \\ c_j \end{bmatrix}$$

D_P : Diagonale principale.

D_I : Diagonale inférieure.

D_S : Diagonale supérieure.

L^* : Indique une nouvelle ligne dans la matrice.

c : Vecteur des connus.

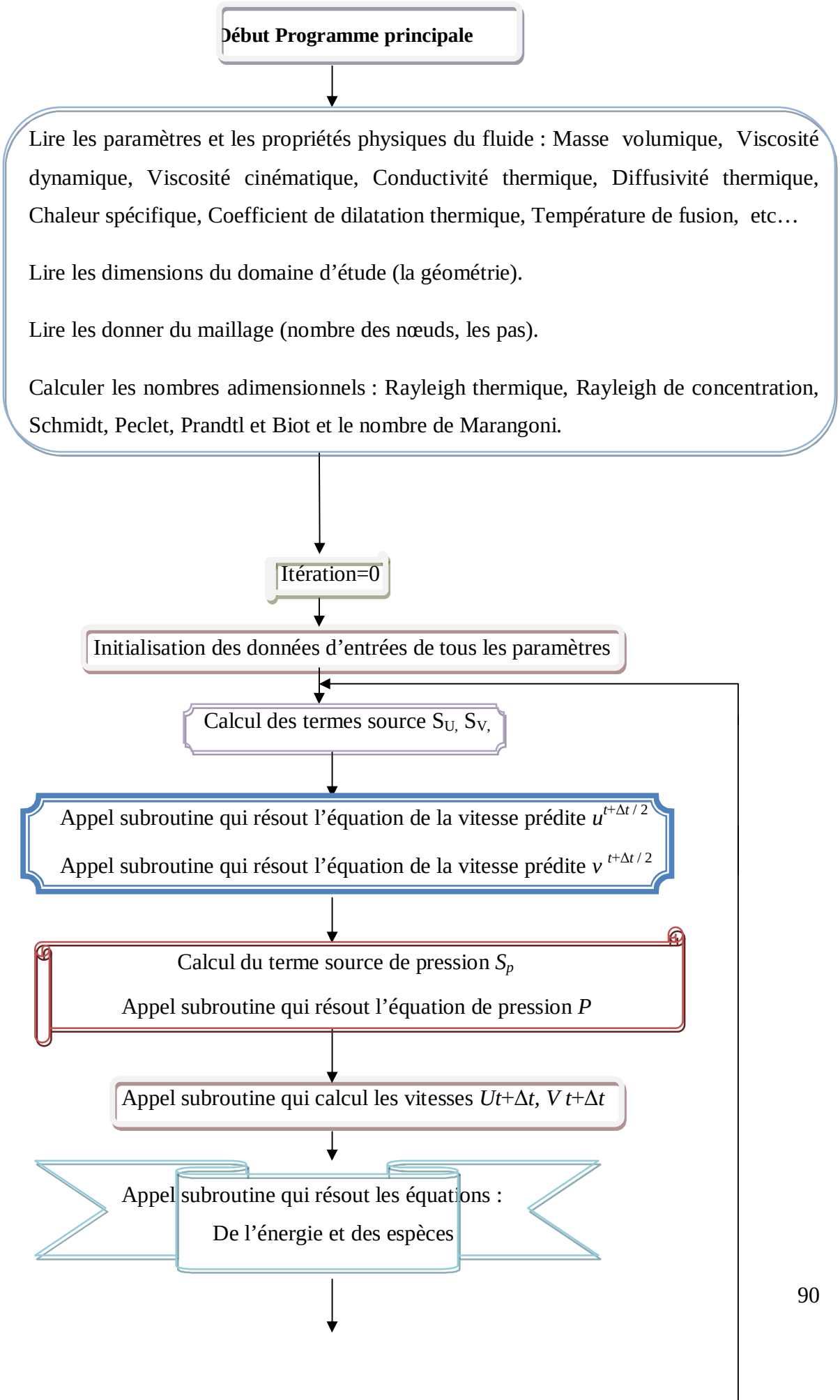
Pour la dernière ligne N, la propriété ϕ est calculée comme suit :

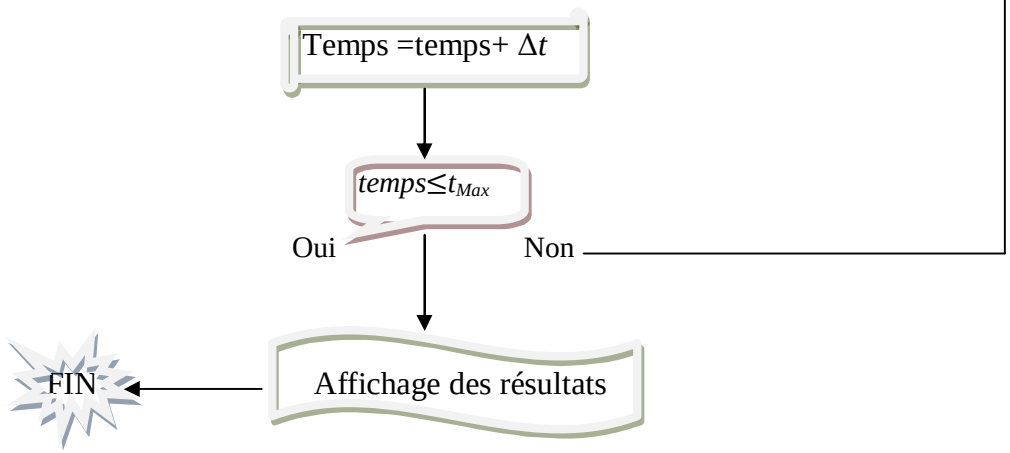
$$\phi_N = \frac{c_N}{D_{P(LN)}} \tag{3.66}$$

Pour chaque ligne la propriété physique ϕ calculée en utilisant la formule ci-dessous :

$$\phi_{L_I} = \left(\frac{c_{L_I} - \left(D_{S(L_I)} . \phi_{L_{I+1}} \right)}{D_{P(L_I)}} \right) ; \text{Pour } L_I = L_{N-1}, L_1, -1 \tag{3.67}$$

3-10 L'organigramme





SUBROUTINE A_WESN

Le but de cette subroutine est de calculer les coefficients de *MVF*

Début de subroutine

Lire les paramètres nécessaires pour la résolution de l'équation de transport à partir du programme principal : Coefficient de diffusion, les coefficient du terme source, le pas du maillage, nombre du point du maillage, etc….

Calcul des coefficients de *MFV* dans le domaine intérieur :

$$F_e = 0.5\left(uc_{(i,j+1)} - uc_{(i,j)}\right).\ r_e.\Delta z$$

$$F_w = 0.5\ \left(uc_{(i,j-1)} - uc_{(i,j)}\right).r_w.\Delta z$$

$$F_n = 0.5\left(vc_{(i+1,j)} - vc_{(i,j)}\right) r_p\ .\Delta r$$

$$F_s = 0.5\left(vc_{(i-1,j)} - vc_{(i,j)}\right).\ r_p.\Delta r$$

$$D_e = \Gamma_e r_e.\Delta z/\ \Delta r_{PE}, \qquad D_w = \Gamma_w r_w.\Delta z/\Delta r_{WP}$$

$$D_n = \Gamma_n\ r_p.\Delta r/\ \Delta z_{NP}, \qquad D_s = \Gamma_S\ r_p.\Delta r/\Delta z_{PS}$$

$$a_e = max - (F_e;\ D_e - 0.5\ F_e; 0)$$

$$a_w = max\ (F_w;\ D_w + 0.5\ F_w; 0)$$

$$a_n = max\ (-F_n;\ D_n - 0.5\ F_n; 0)$$

$$a_s = max\ (F_s;\ D_s + 0.5\ F_s; 0)$$

$$a_P{}^0 = r_P\Delta r\Delta z/\Delta t = \Delta V/\Delta t$$

$$a_P = a_P{}^0 + a_w + a_e + a_n + a_s - a.r_P\Delta r\Delta z + F_e - F_w + F_n - F_s$$

SUBROUTINE TRANSPORT

Le but de cette subroutine est la résolution de l'équation de transport :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial ru\phi}{\partial r} + \frac{\partial v\phi}{\partial z} = \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)\right] + S_\phi$$

Début de subroutine transport

Appel subroutine a-wesn qui calcule les coefficients de MVF

Principe du schéma ADI

Implicite suivant r :

Do i=2, il-1 : DP(1)=ap(i,1) ; DS(1)=-ae(i,1) ; b(1)=s(i,1)

Do J=2, NJ-1, 1 : DI(J-1)= -aw(i,j) ; DP(J)=ap(i,j) ; DS(J)= -ae(i,j)

b(J) =(ap0(i,j)*phi(i,j))+(an(i,j)*phi(i+1,j))+(as(i,j)*phi(i-1,j))+ (s(i,j)*rr(i,j)*dr(i)*dz

End Do

DI(Nj-1)=-aw(i,nj) ; DP(Nj)=ap(i,nj) ; b(Nj)=s(i,nj)

Call SOLUTION (Nj,DI,DP,DS,b,sol)

phic(i,:nj)=sol(:nj)

End Do

phic(1,2:nj-1)=((an(1,2:nj-1)*phic(2,2:nj-1))+s(1,2:nj-1))/ap(1,2:nj-1)

phic(il,2:nj-1)=((as(il, 2:nj-1)*phic(il-1,2:nj-1))+s(il,2:nj-1))/ap(il,2:nj-1)

Implicite suivant z:

Do j=2,nj-1,1 : DP(1)=ap(1,j) ; DS(1)=-an(1,j) ; b(1)=s(1,j)

Do i=2, il-1, 1 : DI(i-1)=-as(i,j) ; DP(i)= ap(i,j) ; DS(i)= -an(i,j)

b(i) =(ap0(i,j)*phic(i,j))+(ae(i,j)*phic(i,j+1))+(aw(i,j)*phic(i,j-1))+

(s (i,j)*rr(i,j)*dr(i)*dz)

End Do

DI (il-1)=-as (il,j) ; DP(il)=ap (il,j) ; b(il)=s (il,j)

Call SOLUTION (il,DI,DP,DS,b,sol)

Phic (:il,j)=sol(:il)

End Do

phic(:il,1)=((ae(:il,1)*phic(:il,2))+s(:il,1))/ap(:il,1)

phic(:il,nj)=((aw(:il,nj)*phic(:il,nj-1))+s(:il,nj))/ap(:il,nj)

SUBROUTINE SOLUTION

Le but de cette subroutine est la résolution du système tridiagonal

par la méthode de Gauss

$$D_{P(L_1)}\phi_{(1)} + D_{S(L_1)}\phi_{(2)} = c_{(L_1)}$$

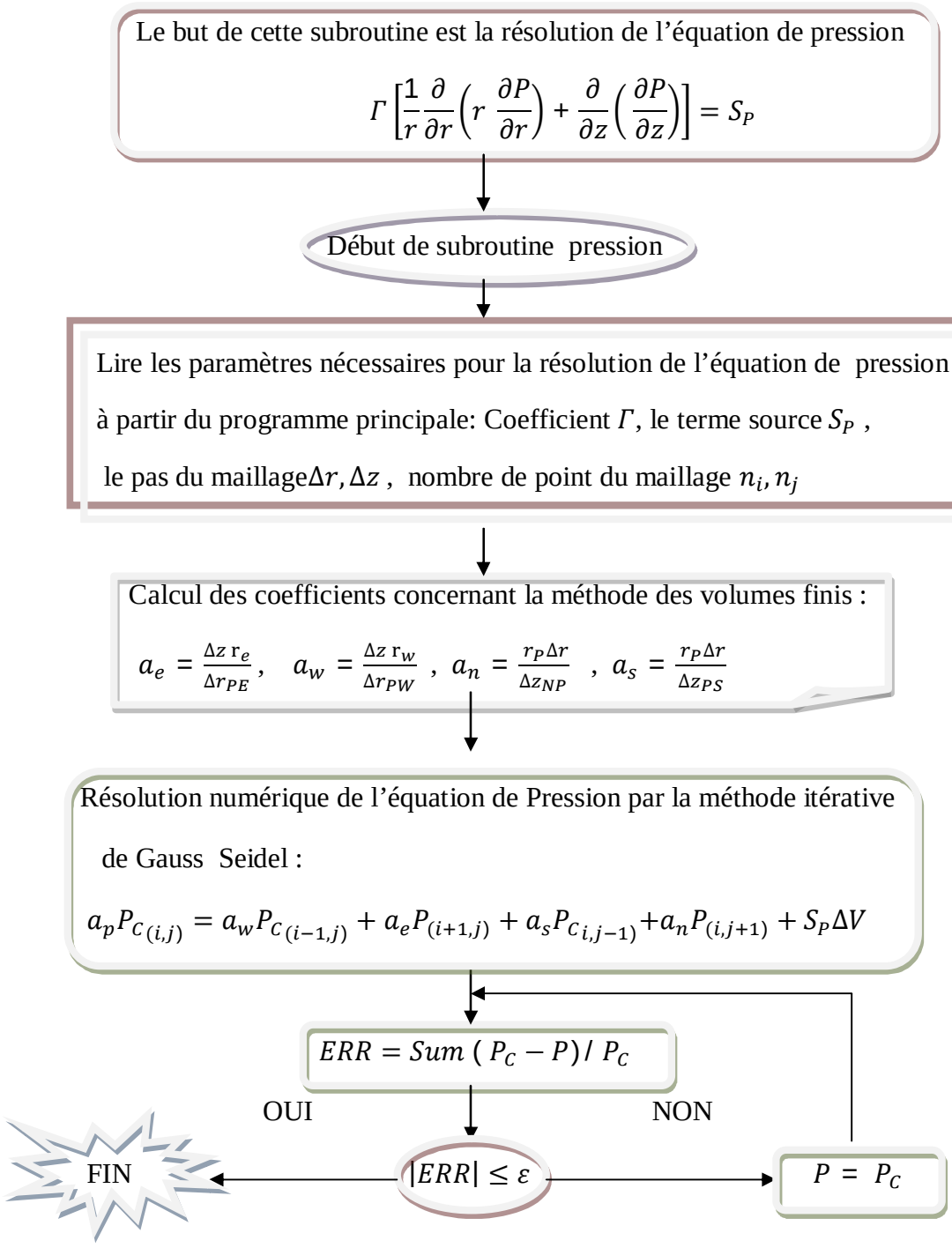
$$D_{i(I)}\phi_{(I-1)} + D_{P(L_I)}\phi_{(I)} + D_{S(L_I)}\phi_{(I+1)} = c_{(I)} \; ; \; I = 2, N-1$$

$$D_{i(L_{N-1})}\phi_{(I-1)} + D_{P(L_N)}\phi_{(N)} = c_{(L_N)}$$

```
SUBROUTINE SOLUTION (N, DI, DP, DS, c, PHI)

REAL DI(N),DP(N),DS(N),V(N),PHI(N)
!------------------
DO I=1, N-1
R= DI (I)/DP (I)
DP (I+1) =DP (I+1)-(R*DS (I))
c (I+1) =V (I+1) - (R*V (I))
END DO
!---------------------------------
PHI (N) =V (N)/DP (N)
DO I=N-1, 1,-1
PHI (I) = (V (I)-(DS (I)*PHI (I+1)))/DP (I)
END DO
END
```

SUBROUTINE PRESSION



Conclusion

La non linéarisation des équations différentielles aux dérivées partielles pose un problème pour la résolution de ces équations. La méthode des volumes finis (*MVF*) nous permet de transformer les systèmes non linéaires aux systèmes algébriques linéaires qui permettent de simplifier et préciser la solution du problème étudié.

Chapitre 4 : Résultats et discussion

Dans le chapitre précédent nous avons discrétisé les équations régissant le problème de convection-conduction pour tous les nœuds du domaine d'étude. Vue la symétrie du problème, nous avons fait notre modélisation dans le cas bidimensionnel d'un écoulement incompressible. Pour résoudre ce problème nous transformons le système non linéaire à un système algébrique linéaire.

Dans le présent chapitre, le contenu se divise en deux parties une première dans laquelle nous présentons les résultats obtenus concernant le comportement du fluide dans le creuset et dans la zone fondue. Nous présentons donc les champs des vitesses, de la concentration et de la température, dans le but d'étudier l'effet de la vitesse du tirage et de la température du creuset sur la distribution des dopants. Dans la deuxième partie une simulation a été réalisée en utilisant un code de calcul « Fluent » dans le but d'étudier l'effet de la géométrie et de la gravité sur la forme de l'interface liquide solide ; aussi pour voir les lignes de courant dans la zone fondue des deux techniques différentes, la micro Pulling Down et celle de Czochralski.

Chapitre 4 : Première partie

Dans cette partie Nous avons élaboré un programme en fortran 90 dans lequel nous avons utilisé la méthode des volumes finis c.-à-d. l'approche des volumes de contrôle et ceci dans le cas d'un milieu continu, pour un problème de convection-diffusion afin d'obtenir les profils de la concentration du titane, de la température et du champ des vitesses.

Parmi les paramètres importants qui ont une grande influence sur l'écoulement du fluide et qui ont été étudiés : la concentration des impuretés c.-à-d. le Titane, la vitesse du tirage, la température de fusion, les nombres de Rayleigh, Prandtl, Marangoni, et de Biot. Les résultats nous montrent la capacité du modèle numérique qui répond aux différentes conditions aux limites et illustrent certains phénomènes de transport thermique et massique qui se produisent dans le creuset et dans la zone fondue aussi dans le solide.

4(A)-1 Le maillage

Nous divisons le domaine d'étude en grilles longitudinales et transversales dont les intersections représentent des nœuds, tel que, autour de chaque nœud on définit un élément de volume de contrôle.

La résolution des équations de notre modèle basée sur une méthode de discrétisation aux volumes finis en adoptant un maillage uniforme et raffiné pour le calcul. Le raffinement du maillage n'a pas un effet considérable sur les calcules et les résultats.

Le maillage du domaine d'étude a été réalisé de façon uniforme, en utilisant le logiciel Tecplot. Les conditions aux limites sont aussi représentées sur le domaine d'étude, comme il est montré dans le schéma ci-dessous :

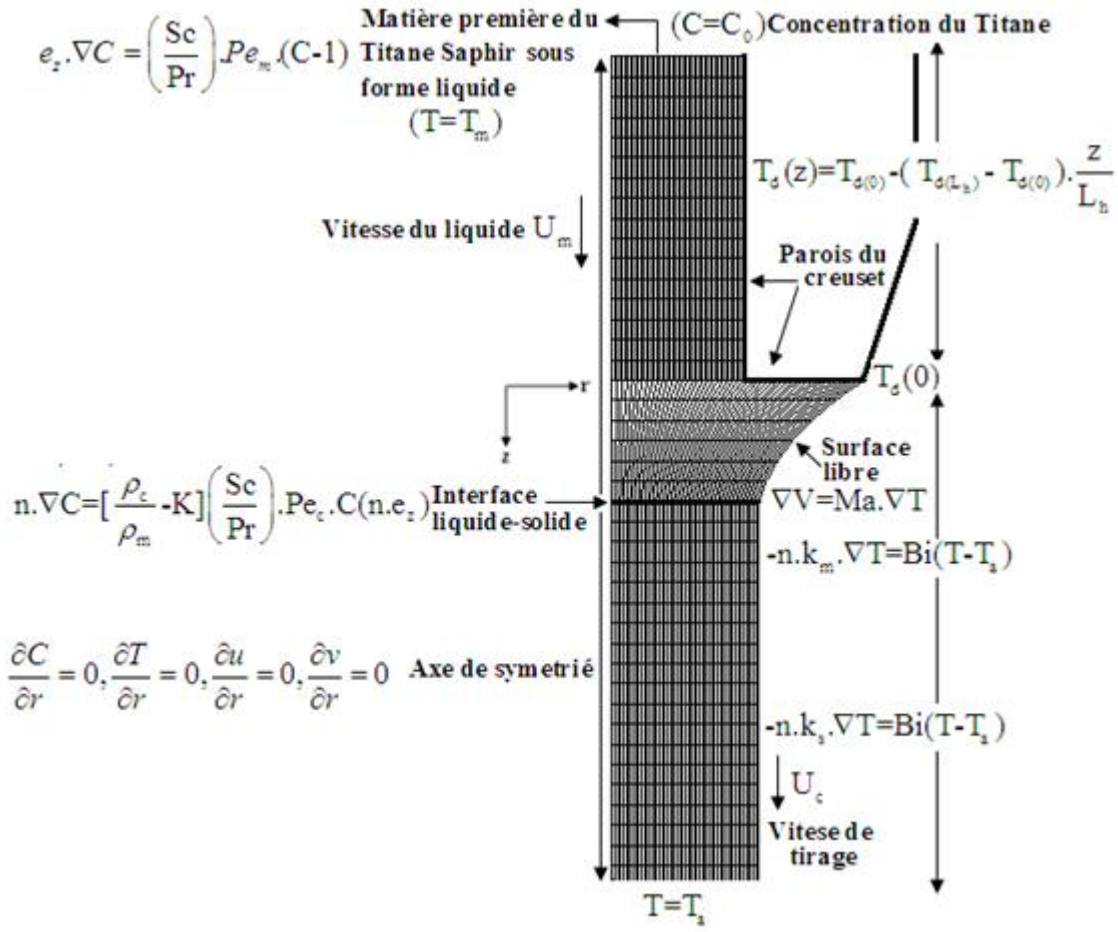


Figure 4.A.1 : Représentation du maillage et de conditions aux limites du domaine d'étude.

Nous présentons dans cette partie, les résultats obtenus pour chaque vitesse du tirage en changeant la température du creuset, pour voir la distribution du titane (la concentration),

de la température et le champ dynamique, en passant aux nombres adimensionnels, et leur effet surtout sur le transfert thermique.

Notre étude est basée surtout sur les résultats de la concentration du titane c.-à-d. la distribution radiale du Titane (Ti^{3+}). Cette distribution du Titane dans la fibre cristalline du Saphir a une grande importance dans les performances de fibre considéré comme milieu actif ou milieu amplificateur et qui est un élément essentiel dans la fabrication des lasers. En effet le faisceau lasers du mode transversal fondamental d'un laser possède un profile gaussien dont la valeur maximale se trouve sur l'axe de la fibre. Nous cherchons donc à ce que la distribution du Titane soit en sorte qu'il y est plus d'ions sur l'axe de la fibre que sur les périphéries. Ceci afin d'augmenter le couplage entre l'onde laser et les ions du dopant pour donner la plus haute puissance lumineuse possible en sortie du laser. Nous étudions aussi la convection de Marangoni radiale et axiale et nous avons montré qu'elle est dominante que la convection de la flottabilité.

4(A)-2 Effet de la vitesse du tirage

4(A)-2-1 La distribution radiale du Ti^{3+}:

On commence par la distribution radiale de la concentration en fonction de la distance à l'axe r, dans la figure ci-dessous, on représente la distribution radiale du Ti^{3+}, pour différentes vitesses de tirage, dans le but d'étudier l'effet de vitesse du tirage sur la distribution radiale du titane.

Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0) ***Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)***

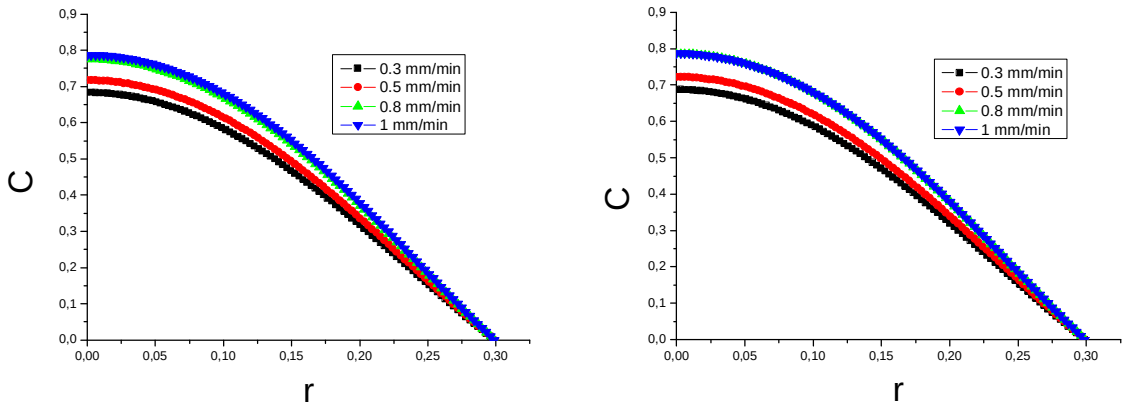


Figure 4.A.2 : Distribution radial du Ti^{3+}, pour différentes vitesses du tirage pour les températures de fusion (2050C^0 ou 2323 K^0) et (2060C^0 ou 2333 K^0).

On note qu'il y a une proportionnalité entre la concentration (c.-à-d. la distribution radiale du titane) et la vitesse du tirage tel que lorsque le taux de croissance augmente, le pourcentage du titane au centre de fibre augmente aussi. Nous remarquons que pour les petites vitesses du tirage (0.3mm/min et 0.5mm/min) la concentration prend aussi des petites valeurs. En comparant avec les deux premières valeurs de vitesse (0.3mm/min et 0.5mm/min) nous observons que pour les grandes valeurs de vitesse qui sont élevées (0.8mm/min et 1mm/min) les impuretés du titane augmente dans le centre de la fibre et leur concentration prend presque la même valeur c.-à-d. ces vitesses nous donnent une concentration importante au centre de la fibre ; ceci correspond aux résultats expérimentaux de la thèse de doctorat de A. Laidoune **[23]**. L'essentiel de ces travaux montre que lorsque la vitesse de tirage est plus élevée, les impuretés se rassemblent dans le centre de la fibre.

Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0) ***Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)***

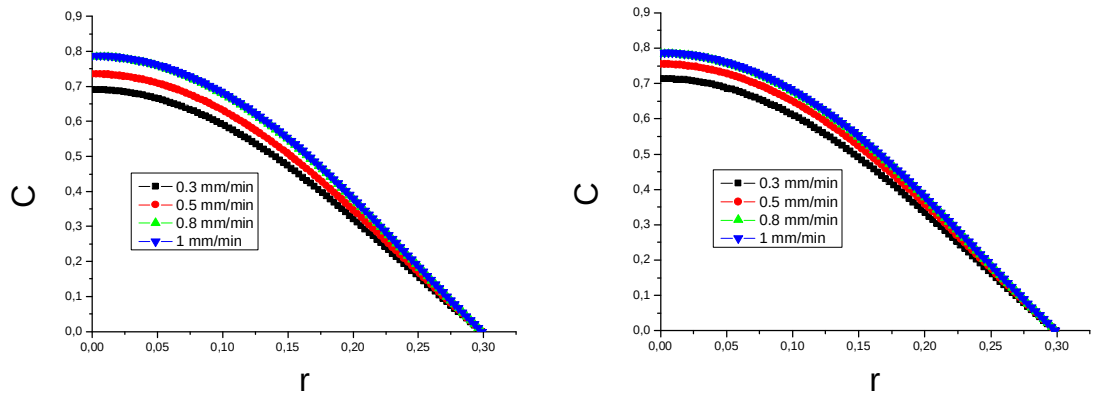


Figure 4.A.3 : distribution radial de Ti^{3+}, pour différentes vitesses de tirage pour les températures de fusion (2070C^0 ou 2343 K^0) et (2104C^0 ou 2385 K^0).

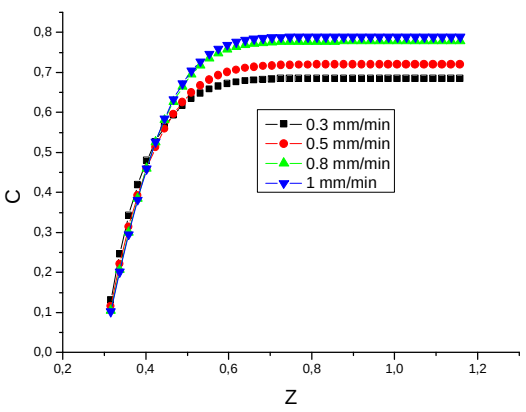
D'après ces figures on remarque aussi que la température du creuset n'a pas d'effet considérable sur la distribution des dopants. De plus il faut bien noter que la géométrie du problème et la vitesse du tirage dans le cas de la méthode micro pulling down favorise le rassemblement des impuretés dans le centre de la fibre et évite le problème de ségrégation vers les périphéries. Par contre dans les autres méthodes de croissance nous citons par exemple la technique Czochralski, dans laquelle les impuretés ne rassemblent pas dans le centre de la fibre mais dans différentes parties dans cette dernière d'une façon non homogène. Généralement pour le procédé de Czochralski la grande quantité se trouve dans la partie supérieure de la fibre tirée, donc à chaque fois il faut fusionner la matière première et répéter l'opération à nouveau.

Par conséquence pour notre cas c.-à-d. la méthode micro pulling down, le résulta obtenu est importants pour les applications lasers et il est difficile à obtenir dans le cas d'autre technique de croissance comme nous avons cité.

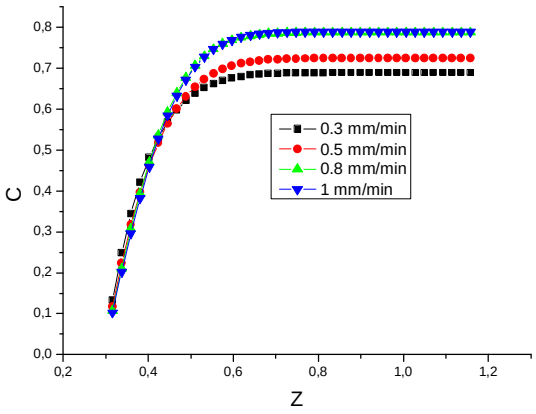
4(A)-2-2 La distribution axiale du Ti^{3+} :

Maintenant, on passe à la distribution axiale de la concentration du titane, la figure ci-dessous, représente la distribution du Ti^{3+} le long de l'axe de croissance « *z* », pour différentes vitesses de tirage et différentes températures du creuset.

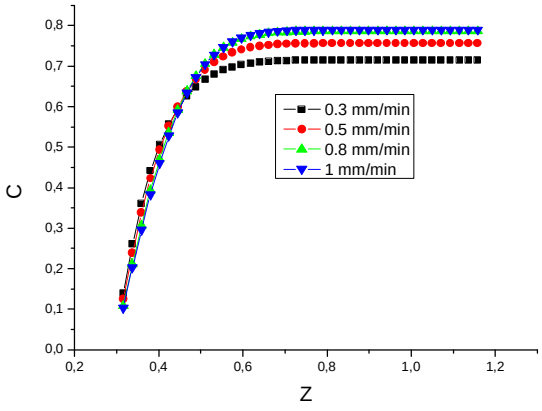
Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0)



Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)



Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0)



Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)

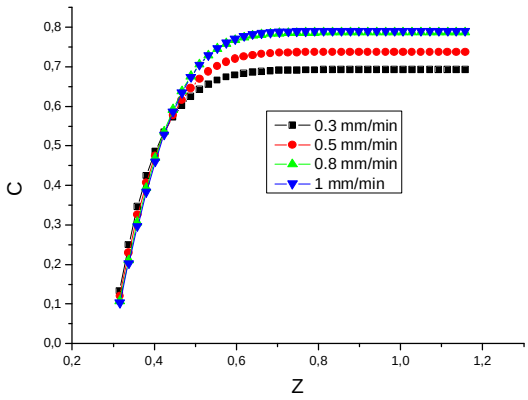


Figure 4.A.4 : Distribution axiale de Ti^{3+}, pour différentes vitesses du tirage et pour différentes températures du creuset (2323 K^0, 2333 K^0, 2343 K^0 et 2385 K^0).

Ces figures montrent la distribution de la concentration le long l'axe de croissance à l'intérieur de la zone liquide et dans la fibre cristalline du saphir dopé titane (solide) et ceci

pendant le processus de la solidification. En constate d'après les figures ci-dessus que la concentration est faible puisque la section de la zone liquide est plus large. Au fur est à mesure que les particules du liquide descendent vers la fibre en bas, la concentration augmente et se stabilise lorsque le diamètre devient stable et en même temps le liquide se solidifie.

Ici aussi on constate que, conformément à l'expérimentale, lorsque la vitesse de tirage est plus élevée, les impuretés rassemblent dans le centre de la fibre [23].

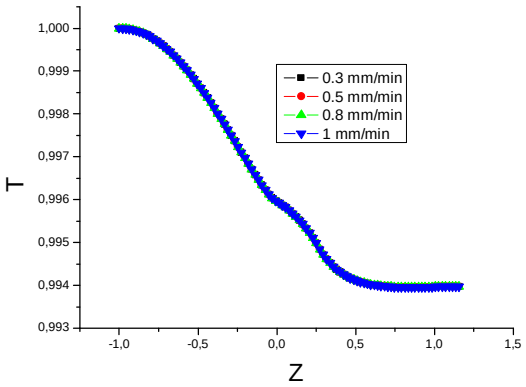
Il faut remarquer que les figures ci-dessus représentent la concentration à l'intérieur de la zone liquide qui n'est pas accessible expérimentalement.

La valeur de la concentration pour $Z = H$ (H : la longueur de la zone fondue) correspond à la concentration à l'interface solide liquide c.-à-d. de la fibre solide. Seul à partir de ce point la valeur de la concentration est accessible expérimentalement. On remarque que la valeur de la concentration est stable le long de la distance axiale. On conclut que la méthode de micro-pulling down donne une distribution axiale constante le long de la fibre. Ceci est en accord avec les résultats expérimentaux de Mr A. Laidoune [23]. Ce résultat est l'un des avantages de cette technique de croissance.

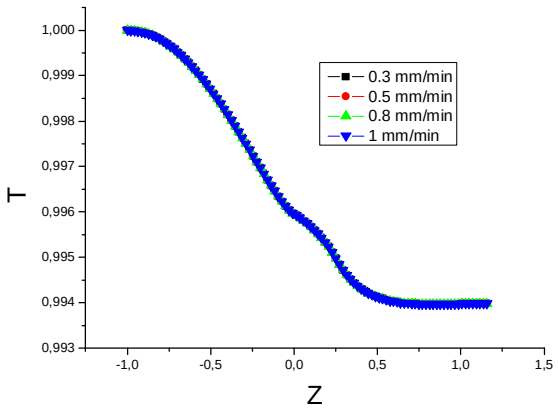
4(A)-3 Le champ thermique :

Les figures suivantes représentent les courbes de la température en fonction de l'axe de croissance pour différentes vitesses de tirage, tel que nous illustrons le champ thermique pour chaque température du creuset:

Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0)



Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)



Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0) ***Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)***

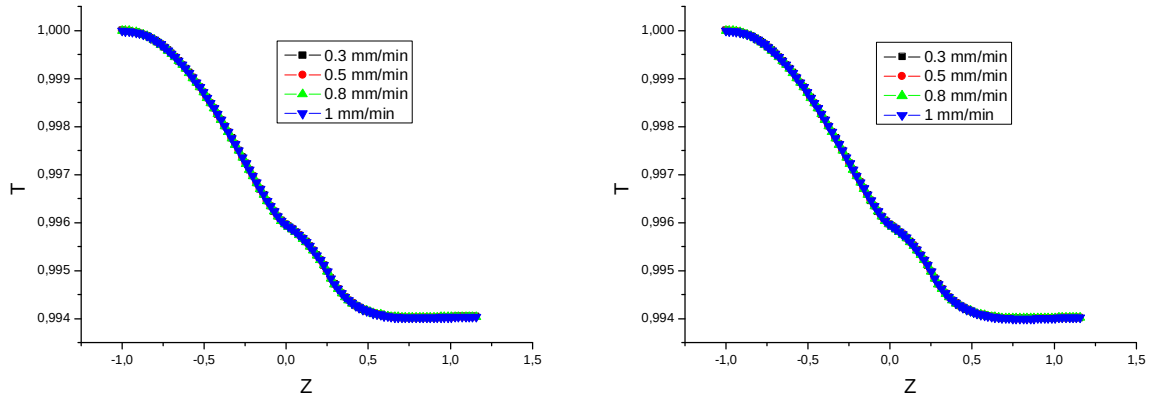


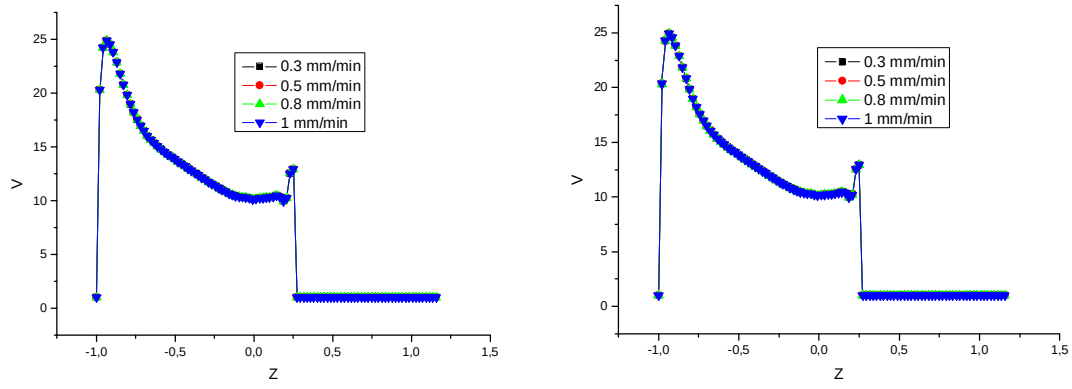
Figure 4.A.5 : Variation du champ thermique pour différentes vitesses du tirage.

Les courbes ci-dessus representent la température du fluide en fonction de la hauteur z, la température du liquide diminue avec l'axe de croissance de la fibre, c-à-d, il y a une solidification du fluide, tel que sa température est elevée dans la partié superieure du creuset, aussi dans la zone fondue et elle diminue quand les particules fluides se solidifient. Ces résultats obtenus sont comparés avec la référence [80], tel que la différence entre la température du creuset et la température de solidification trouvée par nous et la même que la différence de la température dans cette référence.

4(A)-4 Le champ dynamique

4(A)-4-1 La vitesse axiale

Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0) ***Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)***



Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0) ***Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)***

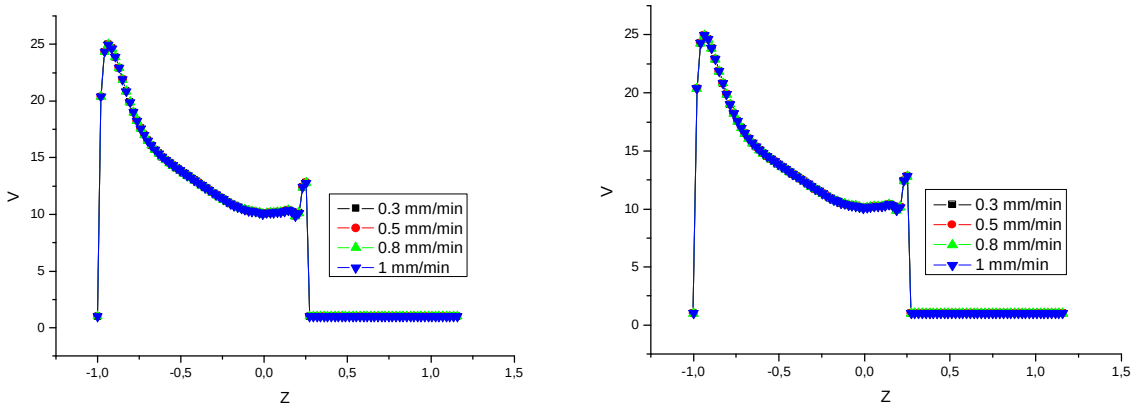
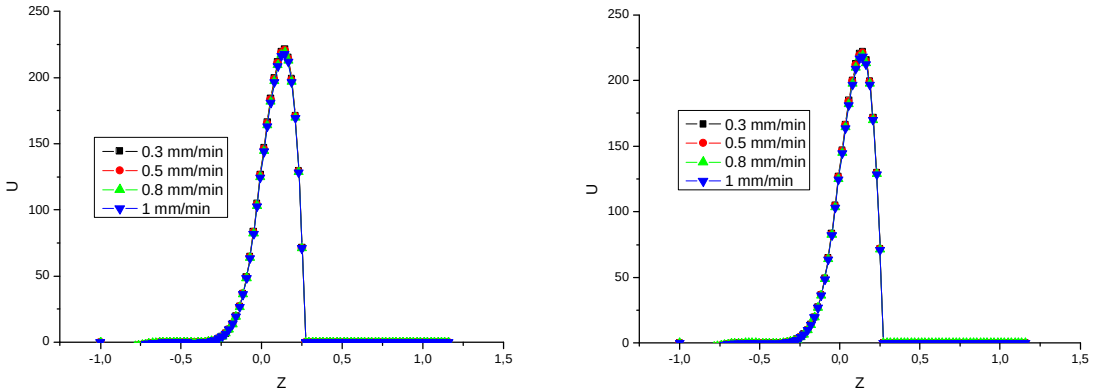


Figure 4.A.6 : Variation du champ dynamique axiale pour différentes vitesses du tirage et pour différentes températures de fusion (2323 K^0, 2333 K^0, 2343 K^0 et 2385 K^0).

Comme présenté sur les courbes ci dessus, la variation de la vitesse axiale, pour les quartes températures du creuset est presque la même, par ce que dans tous les cas la vitesse des particules fluides augmente et prend sa valeur maximale dans la partie supérieure du creuset et dans la zone fondue. La vitesse se stabilise avec une vitesse qu'est la vitesse du tirage à partir de l'interface. Les particules fluides circulent dans un grand remous à cause de la convection de Marangoni due au gradient thermique appliqué sur la surface libre (le ménisque), par conséquence ce mouvement d'agitation dégage une énergie considérable qui résulte du déroulement d'écoulement de Marangoni et ça réalise l'équilibre énergétique dans le système de croissance.

4(A)-4-2 La vitesse radiale :

Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0) ***Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)***



Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0) ***Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)***

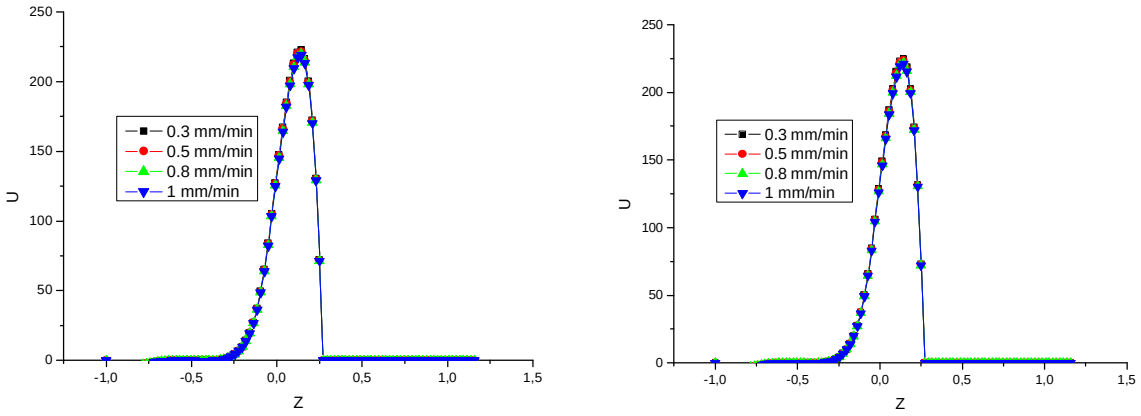
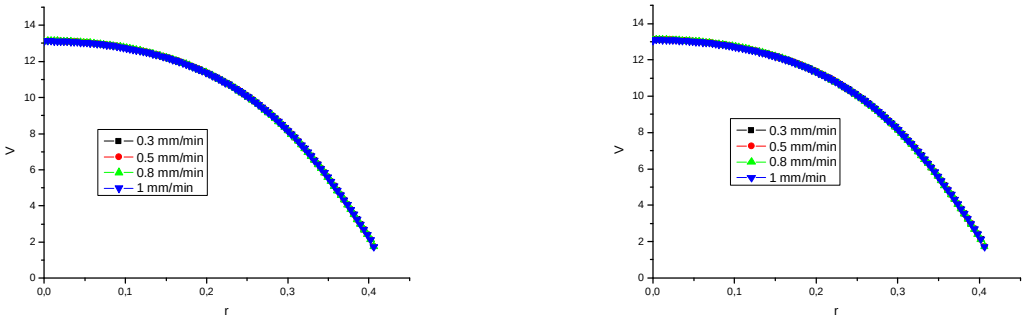


Figure 4.A.7 : La variation de la vitesse radiale le long de l'axe de croissance.

D'après les résultats présentés dans la figure 4.7, une distribution logique de la vitesse radiale le long de l'axe de croissance « z », tel que la vitesse radiale est nulle dans la partie supérieure du creuset et elle commence d'augmenter et prend sa valeur maximale dans la zone fondue, puis elle diminue jusqu'à une valeur nulle à nouveau et ça traduit que vraiment lors de la solidification, les particules fluide ne possèdent pas une vitesse radiale mais seulement une vitesse axiale qu'est la vitesse du tirage vers le bas et la valeur de la vitesse radiale dans la zone fondue se traduit par la convection de Marangoni.

4(A)-4-3 La distribution radiale de la vitesse axiale :

Pour la température du creuset (2050C^0 ou 2323 K^0) ***Pour la température du creuset (2060C^0 ou 2333 K^0)***



Pour la température du creuset (2070C^0 ou 2343 K^0) ***Pour la température du creuset (2104C^0 ou 2385 K^0)***

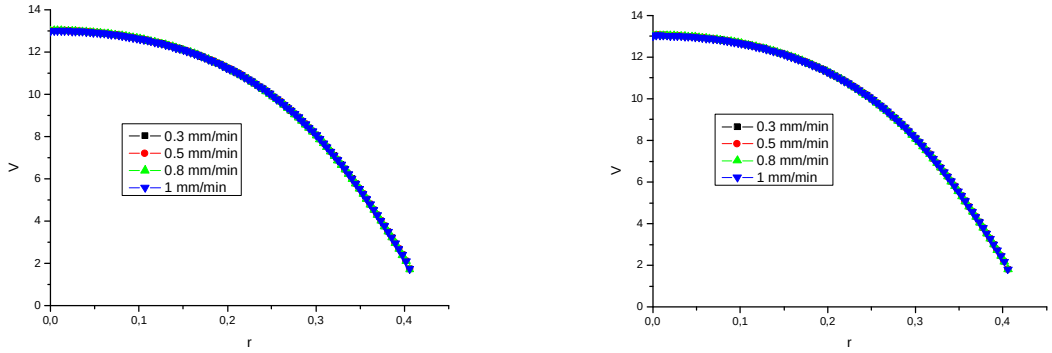


Figure 4.A.8 : Représentation de la vitesse axiale selon l'axe radial.

D'après les courbes représentées ci-dessus, nous remarquons que la vitesse axiale est grande plus de dix fois la vitesse du tirage et ça au centre de la zone fondue et nous notons que lorsque les particules fluides se déplacent vers la surface libre leur vitesse diminue au ménisque où les particules glissent avec une vitesse de croissance.

4(A)-4-4 Effet d'angle de croissance sur la hauteur du ménisque :

La stabilité de la zone fondue est liée aussi à la hauteur du ménisque **[9]** qui est principalement, dépendante de la position verticale du germe cristallin (l'interface solide-liquide). La hauteur du ménisque est donnée par l'équation :

$$H = R_2 \cos(\emptyset_0)\left[\cos h^{-1}\left(\frac{R_1}{R_2 cos(\emptyset_0)}\right) - \cos h^{-1}\left(\frac{1}{\cos(\emptyset_0)}\right)\right] \qquad (4.1)$$

C'est une relation théorique entre des paramètres fondamentaux incluent dans la méthode µ-PD, qui sont :

R_1 : Rayon du bas creuset.

R_2 : Rayon de fibre.

Le paramètre principal qui a un rôle et un effet sur la hauteur du ménisque, est l'angle formé par le ménisque et l'axe de croissance (z). Cet angle doit prendre la valeur de l'angle de croissance pour obtenir la stabilité, chaque matériau possède un constant ou bien un angle caractéristique appelé « L'angle de croissance ». Les figures ci-dessous nous montrent que le changement de ce dernier conduit à un changement de la hauteur du ménisque :

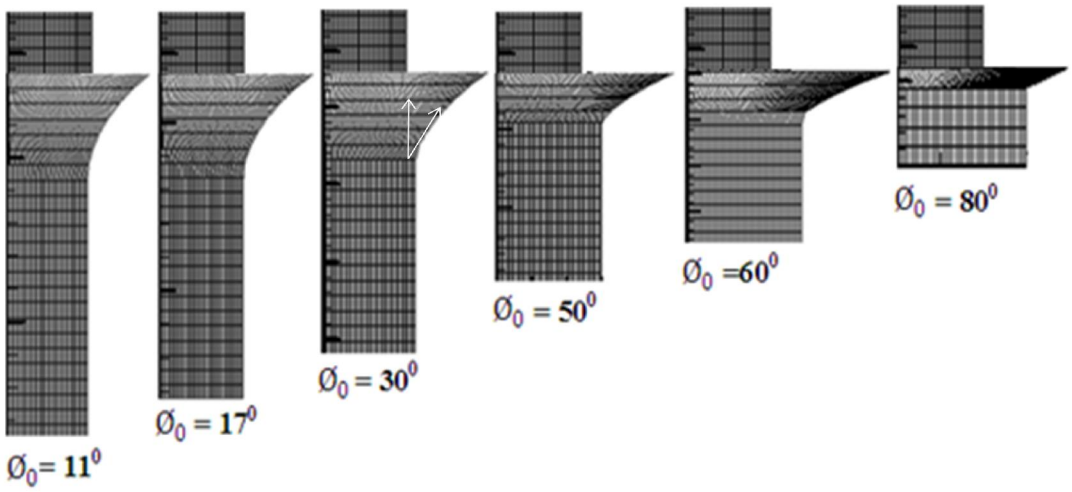


Figure 4.A.9 : La variation de la hauteur de la zone fondue en fonction d'angle de croissance.

On remarque que la hauteur de la zone fondue diminue quand l'angle de croissance augmente, donc il y a une proportionnalité inverse entre ces deux, c.-à-d. le matériau qui possède un grand angle de croissance a une petite hauteur de sa zone fondue. Donc comme résultat la hauteur de la zone fondue affecte sur le diamètre de la fibre cristalline tirée.

4(A)-5 Effet du nombre de Marangoni :

4(A)-5-2 Pour les grandes valeurs du nombre de Marangoni

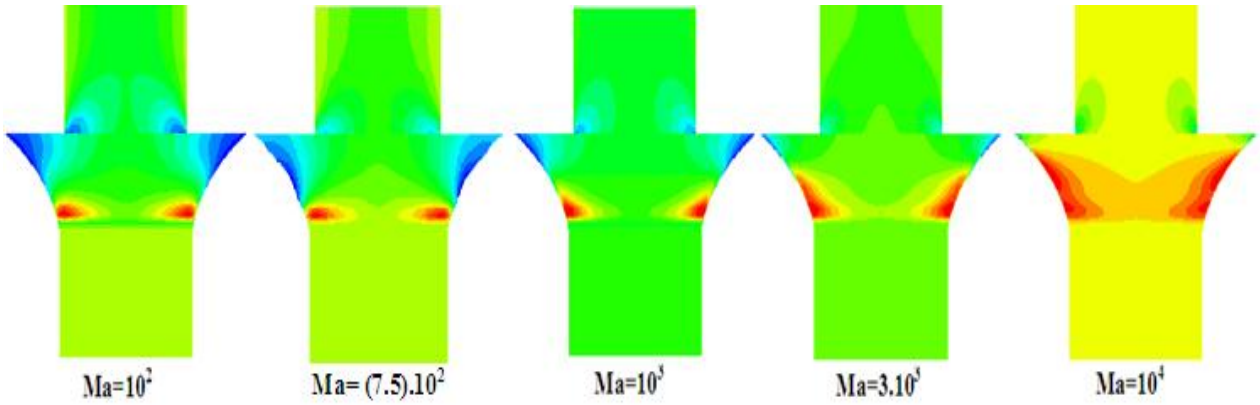


Figure 4.A.10: Représentation de la convection axiale de Marangoni avec différentes valeurs de nombre de Marangoni.

Dans la figure ***4.A.10*** nous illustrons la convection axiale de Marangoni dans la zone fondue, cette convection due au gradient thermique appliqué sur la surface libre. D'après cette illustration nous remarquons que quand le nombre de Marangoni augmente, les particules fluides passent dans une grande agitation (mouvement d'agitation). Nous citons aussi que

dans cette étude la convection de Marangoni est dominante que la convection de flottabilité à cause des dimensions physiques faibles **[9, 11,64]**. Le nombre de Marangoni est plus grande que Rayleigh qu'est le rapport entre l'échelle de flottabilité et l'échelle de diffusion, notre cas est équivalent au nombre de Marangoni d'une valeur $(7.7).10^2$, par contre le nombre de Rayleigh a une petite valeur (4.44), donc le rapport entre les deux nombres Marangoni et Rayleigh égale à 10^2, donc l'effet de Marangoni est plus fort que l'effet de la flottabilité.

4(A)-5-3 Pour les petites valeurs du nombre de Marangoni

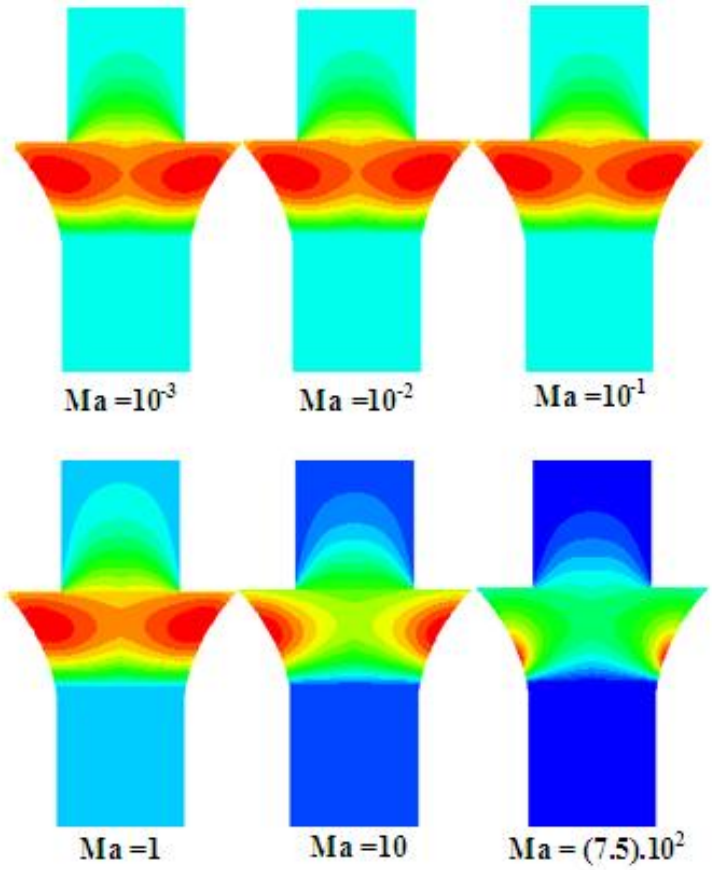


Figure 4.A.11 : Illustration de la convection radiale de Marangoni.

Les résultats illustrés ci-dessus montrent la convection radiale dans la zone fondue, nous remarquons que les particules fluides se déplacent vers la surface libre avec une grande vitesse et ça due à la faible valeur du coefficient de la force des tensions superficielles (coefficient température-tension-surface), nous observons que lorsque le nombre de Marangoni augmente la convection radiale être faible d'autre coté nous observons qu'il y a une valeur critique du nombre de Marangoni à partir de la valeur 10^{-1}. En comparaissant entre les deux types de la convection axiale et radiale nous remarquons que la convection axiale est

forte lorsque la convection radiale est faible, une remarque importante qu'elles sont présente au même temps quand Marangoni prend la valeur 10^2.

4(A)-6 Etude de la forme de l'interface liquide-solide :

La figure présentée ci-dessous illustre le transfert thermique dans le domaine d'étude qui nous donne une information sur la forme de l'interface liquide solide :

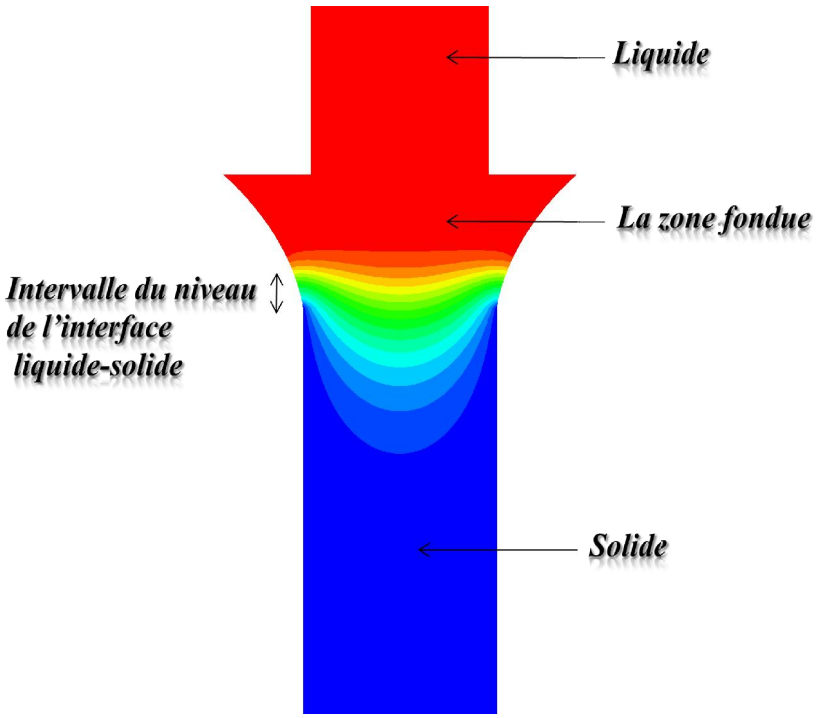


Figure 4.A.12 : Représentation de transfert thermique.

La forme de l'interface liquide/solide est déterminée principalement par le transfert de chaleur dans le système de la croissance **[45].** D'après cette figure, nous observons que l'interface liquide/solide a une forme convexe dépassée dans la fonte de croissance. Ce résultat obtenu est très important par ce que nous avons trouvé une forme convexe de l'interface liquide/solide et ceci est conformée l'observation expérimentale **[11].**

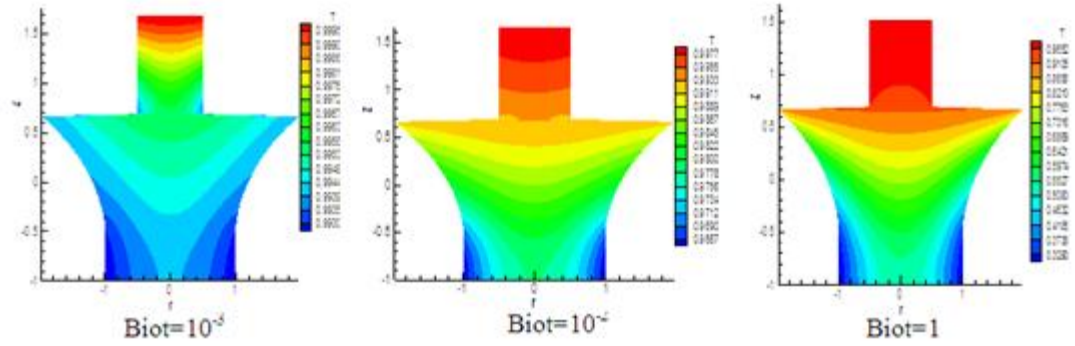
4(A)-7 Effet des nombres adimentionnels :

4(A)-7-1 Effet du nombre de Biot :

Le nombre de Biot est définit comme le rapport entre le coefficient de transfert thermique à la paroi par la Conductance thermique interne, aussi on peut dire qu'il est le rapport entre la convection et la conduction.

Ces figures présentent les contours du champ thermique, pour différentes valeurs du nombre de Biot :

4(A)-7-1-1 Pour les petites valeurs du nombre de Biot :



4(A)-7-1-2 Pour les grandes valeurs du nombre de Biot :

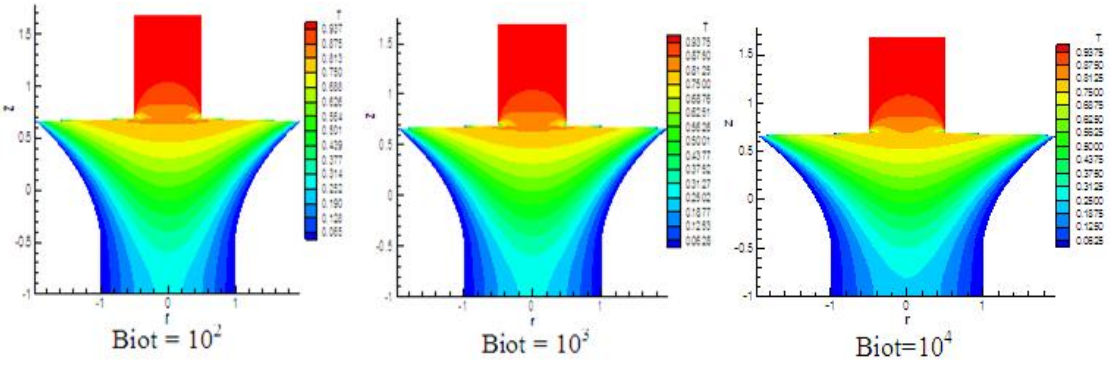


Figure 4.A.13 : L'effet du nombre de Biot.

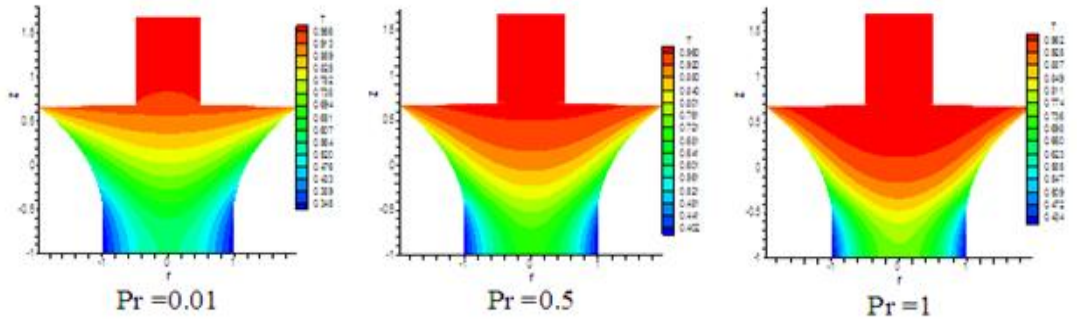
Les figures ci-dessus montrent que pour les petites valeurs du nombre de Biot, il ya une proportionnalité entre l'augmentation du nombre de Biot et l'évolution de la température, ça d'un coté et de l'autre coté nous remarquons que pour les grandes valeurs du nombre de Biot il n'y a pas un changement dans le champ thermique, et comme il est monté ci-dessus à partir de la valeur 10^2 il n'y a pas un développement dans la température c.-à-d. Biot $=10^2$ c'est une valeur critique, dans ce cas la convection est dominante.

Pour ce cas la résistance à l'écoulement est faible ou bien on peut dire que le transfert de chaleur est faible.

4(A)-7-2 Effet du nombre de Prandtl :

On peut définir le nombre du Prandtl comme un rapport entre la diffusion thermique et la diffusion de la quantité de mouvement, c.-à-d. le rapport de vitesses au diffusivité thermique. Dans ces schémas on voit l'effet du nombre de Prandtl sur le champ thermique en changeant les valeurs du ce dernier (le nombre du Prandtl).

4(A)-7-2-1 Pour les petites valeurs du nombre de Prandtl :



4(A)-7-2-2 Pour les grandes valeurs du nombre de Prandtl :

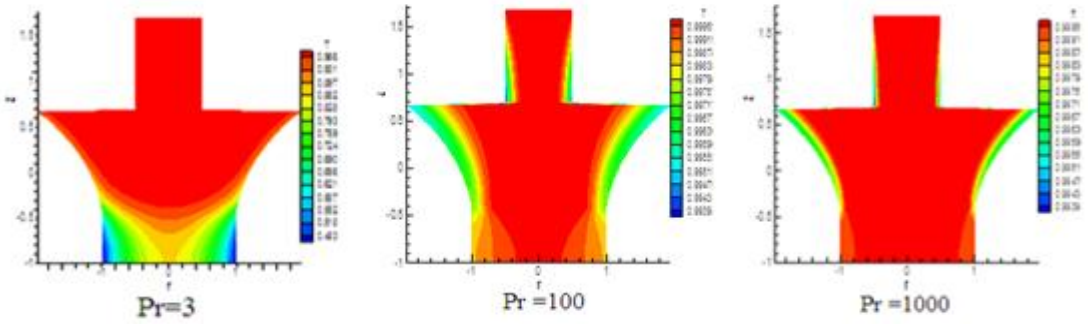


Figure 4.A.14 : L'effet du nombre de Prandtl sur le transfert thermique.

D'après ces figures illustratives, nous notons qu'il y a un effet explicite sur le transfert thermique, tel qu'il y a une proportionnalité entre l'augmentation du nombre de Prandtl et le champ thermique, tel que la diffusion thermique est forte pour les grandes valeurs de Prandtl.

Chapitre 4 : Deuxième partie

Dans cette partie on présente les résultats qu'on a obtenus en utilisant un code de calcul « Fluent 6.2.12 » dans le but d'étudier l'effet de la géométrie pour deux méthode de croissance différentes, la micro Pulling-Down et Czochralski. La simulation a été effectuée pour examiner le champ de la température, la fraction du liquide et les lignes du courant. En plus de la convection normale (convection flottable), l'effet de la convection conduit par les tensions superficielles sur la surface libre apparait dans le modèle (convection de Marangoni). La convection forte dans le liquide peut mener à une interface convexe dans le cristal, ce qu'est en accord avec les résultats expérimentaux.

4(B)-1 Présentation du Fluent

L'utilisation de logicielles pour résoudre différents problèmes physiques est de nos jours très pratiqué. Dans la plus part de ces problèmes surtout les couplés à la mécanique des fluides, de transfert de chaleur, rayonnement…etc. *Fluent* est un logiciel ou bien un code de calcul pour traiter ces types de phénomènes, soit en 2D ou en 3D, quelque soit la géométrie simple ou compliquée, avec des mailles structurées et non structurées et divers types des éléments triangulaire, quadrilatérale, ou hexaédrique **[81]**. La création de la géométrie et la division du domaine d'étude se fait par le mailleur «*Gambit*».

La conservation est une propriété très importante c'est pour cela, la simulation par Fluent est basée sur un schéma qui réalise cette propriété, donc ce code utilise la méthode des volumes finis qui consiste en trois étapes cités dans le troisième chapitre qui sont :

- La division du domaine d'étude en utilisant un maillage du calcul par le mailleur « *Gambit* ».
- L'intégration sur les volumes de control des équations qui régissent l'écoulement
- La linéarisation du système des équations.

4(B)-1-1 Gambit

Gambit est un logiciel utilisé pour définir le modèle d'étude et créer la géométrie (surface ou volume) avec différentes coordonnées (dimensions), après la détermination de la géométrie nous faisons le maillage de cette dernière.

4(B)-2 Les conditions aux limites

Les conditions aux limites bien définies, sont très intéressantes pour trouver une solution exacte avec une convergence rapide. Pour la simulation par *Fluent,* ces conditions sont des exigences critiques pour une réalisation correcte de la solution.

Gambit nous permet de définir le types des conditions physiques aux limites du domaine à savoir si les lignes (en 2 dimensions) ou les faces (en 3 dimensions) sont des entrées, des sorties de fluide, des surfaces libres, des axes de symétries, des murs…

Dans ce logiciel du maillage (Le mailleur *Gambit*), on ne définit que la nature ou le type des conditions aux limites, les valeurs de ces conditions (vitesses, températures, …) seront définir dans *Fluent*.

4(B)-3 Le maillage

Le maillage montré dans la figure ci-dessous, illustre le domaine d'étude maillé uniformément (mailles structurées). On a cité dans la première partie de ce chapitre que le raffinement du maillage n'a pas un effet sur les résultats obtenus, la même remarque dans cette présente partie.

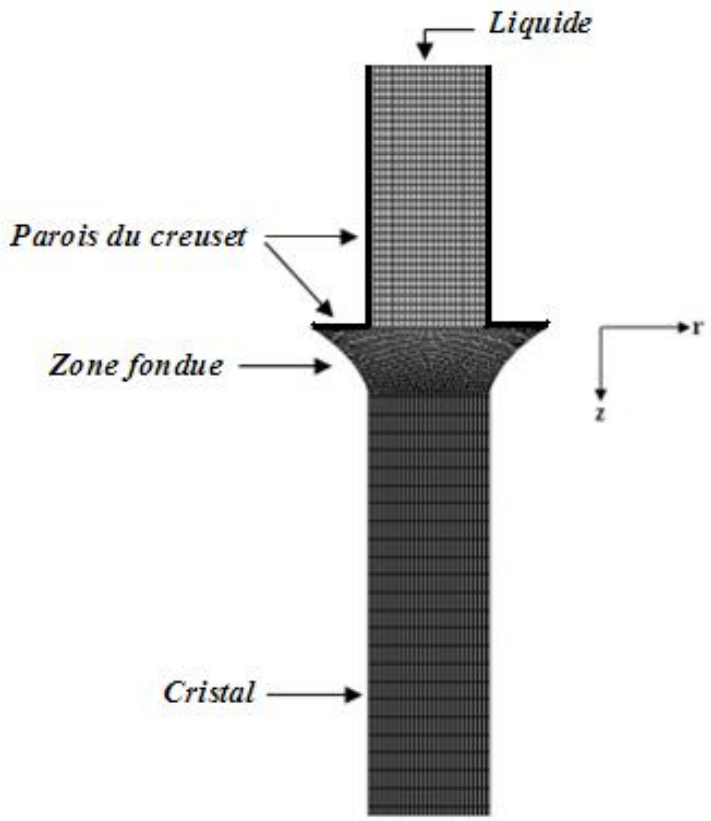


Figure 4.B.1 : Présentation du maillage.

Dans cette partie, nous étudions le processus de croissance de deux techniques, la micro Pulling-Down et celle de Czochralski en utilisant un code du calcul *Fluent 6.2.12.* Pour un problème d'écoulement d'un fluide comportant la solidification, le modèle de la solidification dans *Fluent* peut être employé pour modeler le procédé du tirage des cristaux et des fibres. Dans ce cas où la vitesse de traction ne change pas au-dessus du domaine, pendant le processus de la croissance, cette approche est employée dans cette étude.

Puisque les deux techniques précitées possèdent deux géométries différentes, nous voulons voir l'effet de la géométrie sur le transfert thermique qui traduit effectivement la forme de l'interface liquide/solide **[45]**, aussi nous présentons la fraction du liquide et les lignes du courant dans la zone fondue pour les deux géométries.

4(B)-4 Le champ thermique

Les figures illustrées ci-dessous présentent le transfert thermique dans le domaine d'étude pour les deux méthodes précitées :

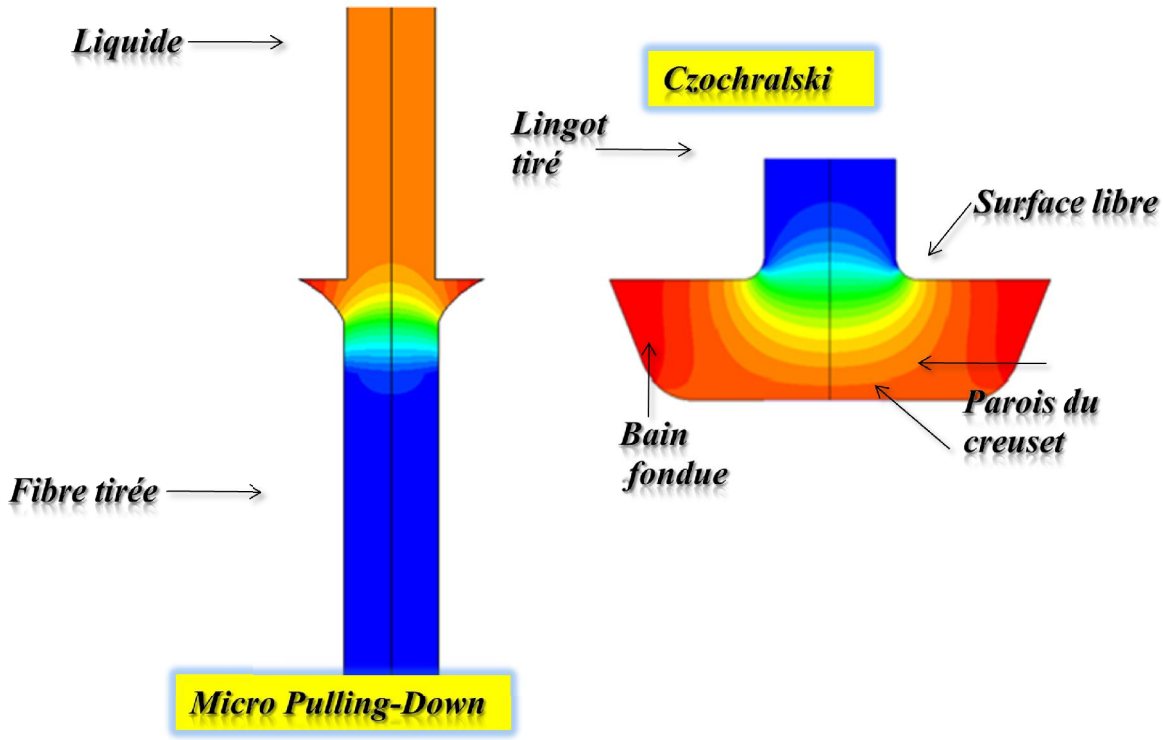


Figure 4.B.2 : Présentation du transfert thermique pour la technique micro Pulling-Down et celle de Czochralski.

Les résultats expérimentaux montrent que l'interface liquide - solide prend une forme convexe **[11]**, on veut confirmer ce résultat en utilisant ce logiciel. Dans les figures ci-dessus nous montrons le champ de la température dans le domaine d'étude des deux techniques, la technique de micro Pulling-Down et la technique de Czochralski.

Le champ de la température montre le gradient dans la température des zones chaudes (le fluide) aux zones plus froides (solide). D'après les deux figures, on voit que la géométrie qui possède des grandes dimensions (Czochralski) a une forme d'interface plus convexe que la forme d'interface pour la méthode micro Pulling-Down.

4(B)-5 Présentation du liquide et du solide dans le domaine d'étude

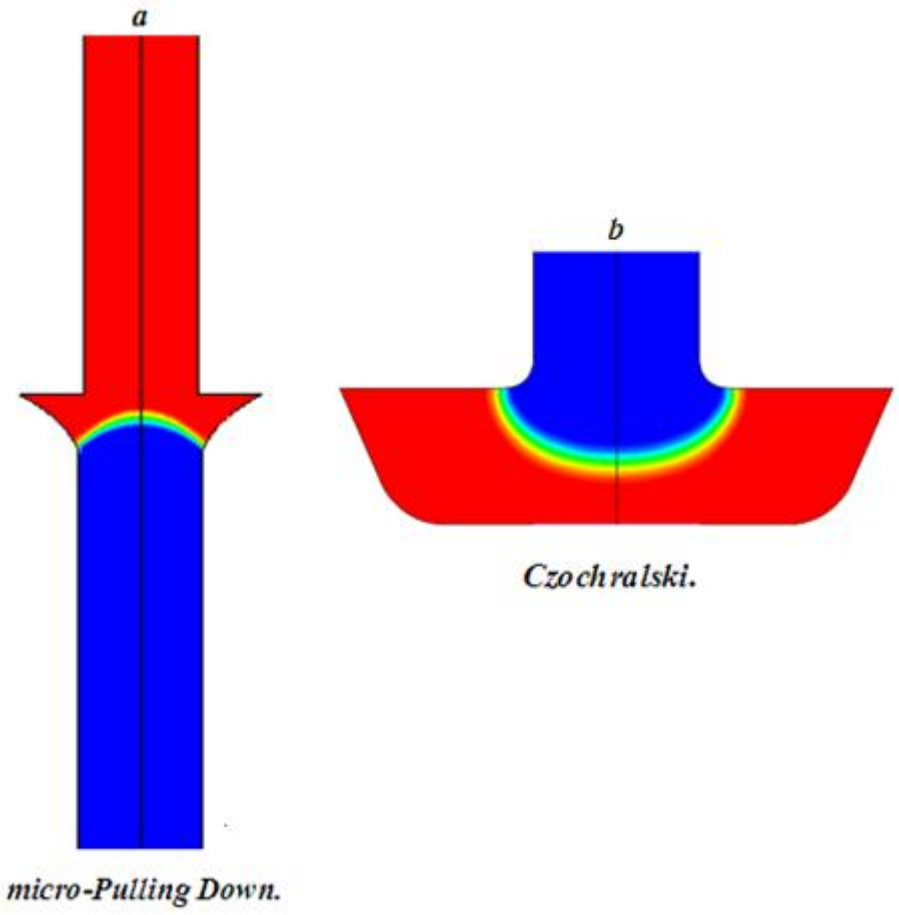


Figure 4.B.3.a : Fraction du liquide pour la méthode micro-Pulling down.
Figure 4.B.3.b : Fraction du liquide pour la méthode Czcochralski.

Le mouvement du liquide incompressible dans la zone fondue, conduit par des gradients de la température et de concentration. En particulier l'effet de la température joue un grand rôle dans le mouvement du liquide, tel que quand la température augmente, la vitesse des particules fluides augmente. Donc la fraction du liquide dépend par le champ thermique, tel que la partie rouge montre le liquide fondu et la région bleue montre le solide.

4(B)-6 La densité

Dans la figure suivante nous représentons le champ massique (la densité du liquide et du solide) :

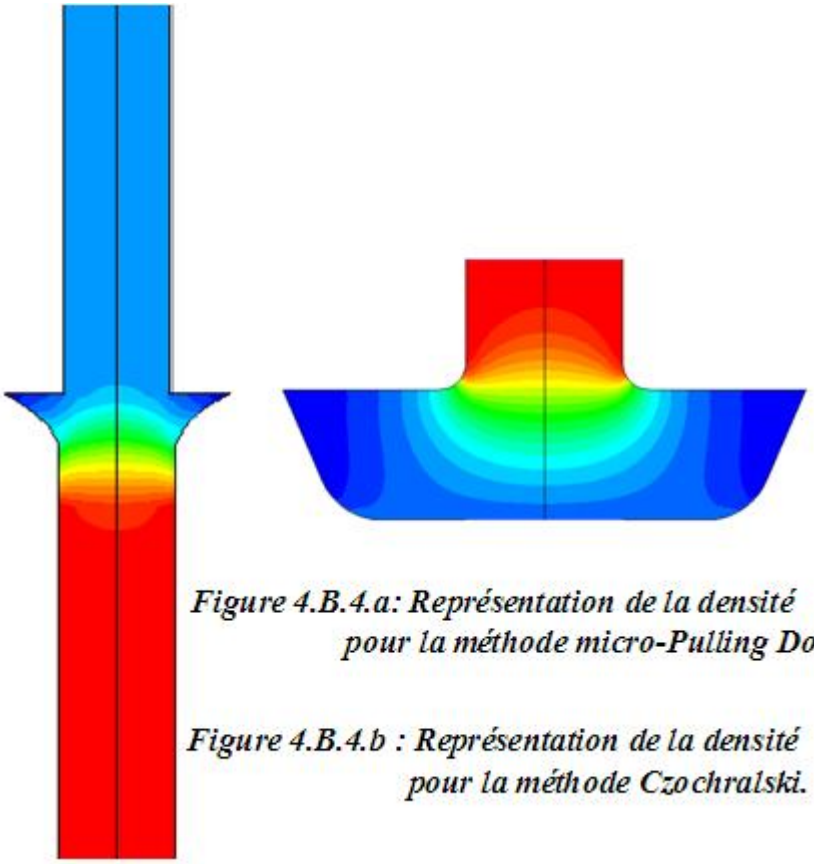


Figure 4.B.4.a: Représentation de la densité pour la méthode micro-Pulling Down.

Figure 4.B.4.b : Représentation de la densité pour la méthode Czochralski.

Puisque la densité est proportionnelle inversement avec la température, c.-à-d. quand la température d'un fluide augmente sa densité diminue, et quand sa température diminue la densité augmente (le mouvement des particules diminue). C'est pour cela le champ massique appariaient inversement que le champ thermique.

4(B)-7 Etude de l'effet de la gravité sur l'interface liquide/solide

Dans cette partie nous étudions l'effet de la gravité sur le transfert thermique pour la méthode de la micro Pulling Down, en changeant les valeurs de force de la gravité.

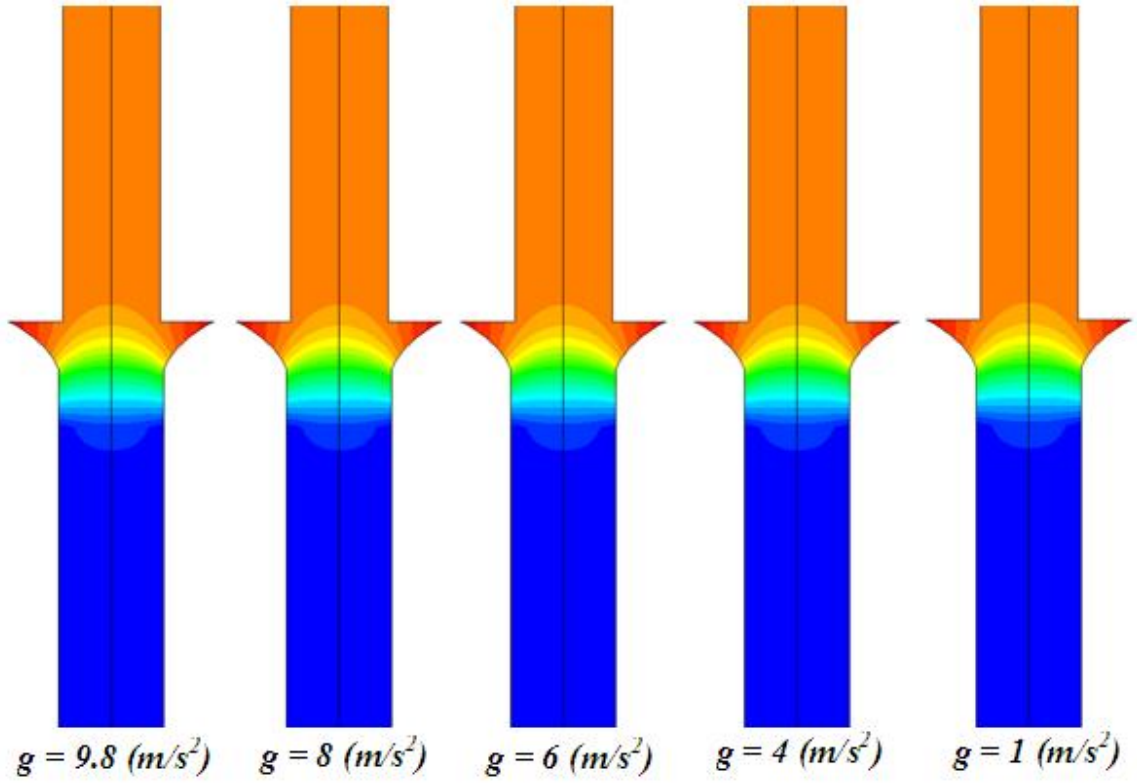


Figure 4.B.5: Effet de la gravité sur le transfert thermique.

Les figures illustrées ci-dessus nous montrent qu'il n'ya pas une relation entre le champ gravitationnel et le champ thermique, d'une autre manière la gravité ne change plus dans la forme de l'interface liquide solide même si sa valeur est assez petite. La même chose pour le sens du champ de la gravité, comme il est montré ci-dessous ; en comparaison entre les deux figures, on remarque que le tirage dans les deux sens ne change pas la forme convexe de l'interface.

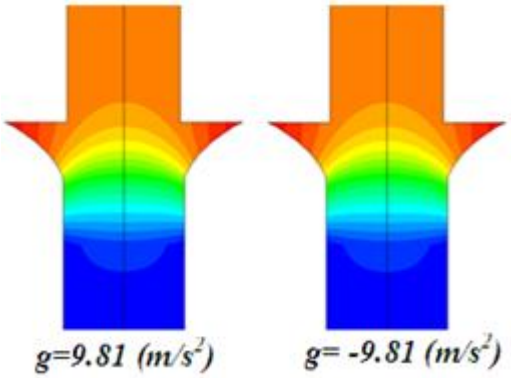


Figure 4.B.5.1: Effet de la gravité sur le transfert thermique.

4(B)-8 Les lignes de courant

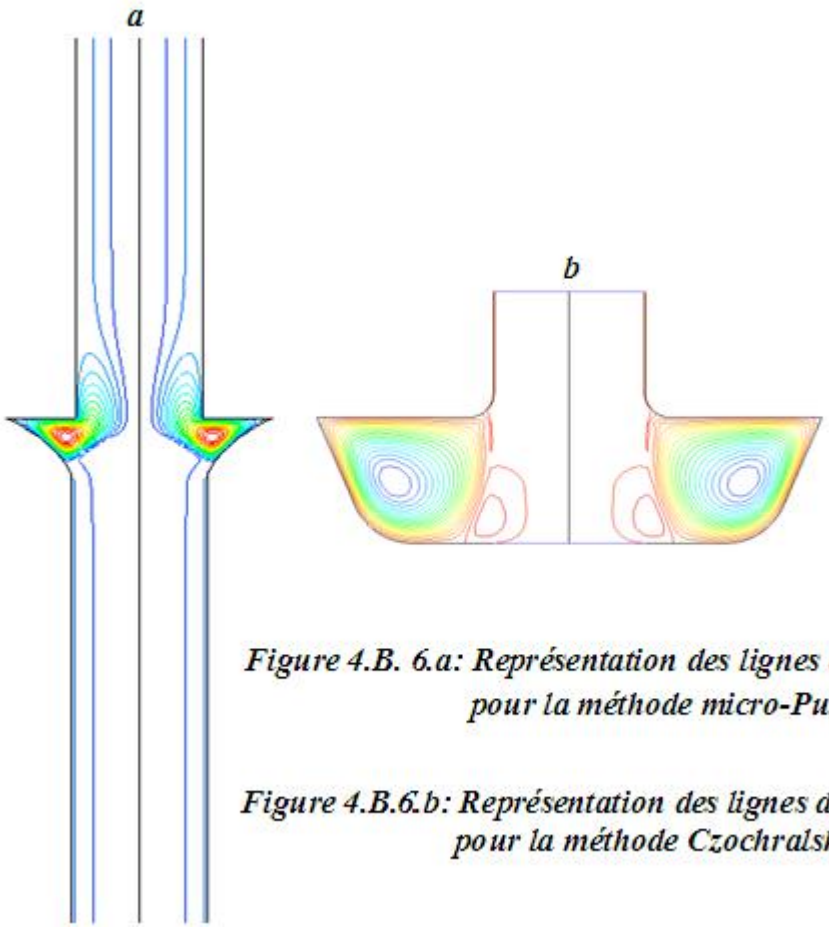


Figure 4.B. 6.a: Représentation des lignes du courant pour la méthode micro-Pulling Down.

Figure 4.B.6.b: Représentation des lignes du courant pour la méthode Czochralski.

Comme il est représenté sur les schémas ci dessus, le liquide commence à circuler dans un grand remous, conduit par la convection de Marangoni qu'est provoquée principalement par le chauffage. La surface libre du liquide est soumise à un fort gradient thermique ce qui crée un écoulement Marangoni déroulant dans le plan ce qu'on appelle convection de Marangoni. Cet écoulement transporte une partie considérable d'énergie fournie par les particules fluides, ce qui compense le bilent énergétique (les tensions superficielles).

Nous observons que pour la technique de Czochralski il ya un déroulement des particules fluides prés des parois et de la surface libre ce qui représente un inconvénient pour ce processus ce qu'on appelle le problème de ségrégation (non homogénéité chimique), par contre nous notons explicitement que la géométrie de la technique micro Pulling Down joue un rôle d'éviter le problème de ségrégation vers les périphéries et ca est bien montré sur la figure ***4.B.6.a*** , tel que nous n'observons pas un mouvement prés de la surface libre et les parois et ca due des dimensions de cette géométrie de micro Pulling Down.

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons établie un modèle bidimensionnel axisymétrique en coordonnés cylindriques pour la simulation de la croissance des fibres monocristallines de saphir dopé au titane à l'aide de la méthode de micro-pulling down. Notre étude est basée sur la méthode des volumes finis. Cette étude montre que la distribution radiale du titane augmente avec la vitesse du tirage. Par contre la température du creuset n'a pas d'effet considérable sur la distribution des dopants.

Un résultat important est le fait que la géométrie du problème et la vitesse du tirage dans le cas de la méthode micro pulling down favorise le rassemblement des impuretés dans le centre de la fibre et évite le problème de ségrégation vers les périphéries. Ce que montre l'avantage de cette technique par rapport aux autres méthodes de croissances. Nos résultats montrent aussi que la distribution axiale de la concentration du titane est aussi uniforme.

De plus nous avons constaté que la convection de Marangoni est dominante sur la convection de flottabilité car les dimensions du domaine physique sont faibles, nous avons constaté aussi que la forme de l'interface liquide-solide est convexe, ce résultat conformé l'observation expérimentale.

D'un autre coté nous avons réalisé une étude comparative entre deux méthodes de croissance différentes, qui sont la micro Pulling Down et celle de Czochralski pour étudier l'effet de la géométrie sur la forme de l'interface liquide solide; aussi pour voir les lignes de courant dans la zone fondue de ces deux techniques. D'après la comparaison entre les résultats obtenus, la gravité et le sens de cette dernière n'ont pas d'effet sur le transfert thermique donc n'affectent pas sur la forme de l'interface.

Les Références

[1] C. W. Lan, D. T. Yang. Dynamic simulation of the vertical zone-melting crystal growth. International Journal of Heat and Mass Transfer 41(1998) 4351-4357.

[2] W.C.WINEGARD. Introduction a la solidification des métaux. DUNOD.Paris 1971.

[3] A. Karek, K. Lebbou, M. Diaf, A. Brenier, G. Boulon. Yb^{3+} - doped $NaBi(WO_4)_2$ fibre single crystals grown by the micro-pulling down technique and emission spectroscopic characterization. Materials Research Bulletin 42 (2007) 532–543.

[4] Patricia Dery. Étude de la croissance des grains à l'aide d'un appareil de mesure électrique. L'université du Québec à Chicoutimi. Aout 2001.

[5] Johnson ES. Liquid encapsulated floating zone melting of GaAs . J Crystal Growth. 1975; 30:249-56.

[6] Henry RL, Nordquist PER, Gorman RJ, Qadri SB. Growth of (100) GaAs by vertical zone melting. J Crystal Growth. 1995; 109:228-33.

[7] Yip, VFS, Chang CE, Wilcox WR. Heat and mass transfer in the traveling heater method of crystal growth. J Crystal Growth. 1975; 29:69-74.

[8] Boeck T, Rudolph P. The influence of thermal diffusion on the traveling heater method in a diffusion controlled growth system. J Crystal Growth 1986; 79: 105-9.

[9] T. Fukada, P.Rudolph,S.Uda(Eds.).Fiber Crystal Growth from the melt. Springer.August 2003.

[10] Pierre Papon. Jaucqes Leblond .Physique des transitions de phases.
Paul.H.E.Meijer.Mai1999.

[11] H. S. Fang, Z. W. Yan, and E. D. Bourret-Courchesne. Numerical Study of the Micro-Pulling-Down Process for Sapphire Fiber Crystal Growth. DOI: 10.1021/cg101021t .2011. CRYSTAL GROWTH & DESIGN Article. Vol. 11, 121 129.

[12] Patrick Bousquet-Melou .Modélisation Macroscopique et Simulation Numérique de La Solidification Des Mélanges Binaires. Paris. December 2000.

[13] Ahmed DJIMILI. Etude Numérique De La Solidification Des Matériaux Binaires.2003.

[14] Lacmann, Herden, Mayer, Kinetics of nucleation and Cristal growth, chem. Eng.Technology 22, 1999.

[15] Benahmed Benabdallah Nadia. Propriétés physiques des semi-conducteurs
(Si monocristallin et Ge) et Simulation des cellules solaires à base de Si et SiGe.
Tlemcen-2006.

[16] Charles Kittel. Physique de l'état solide. Dunod, Paris ,1998.ISBN 2 10 003267 4. Ystal G.

[17] Marina Marchenko. C. R. Mécanique 335 (2007) 315–322.

[18] M. Patrick Roux. Modélisation de La Solidification Colonnaire et Equiaxe De Mélanges Binaires. Paris. December 2000.

[19] J.F.SACADURA. Coordonnateur .Initiation au transfert thermique. Edition TEC & DOC. Paris. ISBN : 2-85206-618-1. (2000).

[20] Sébastien Candel. Mécanique des fluides. Cours. 2e *Éditiion. DUNOD, Paris, 1995.*

[21] Jie Liu, Wen-Qiang Lu. Numerical investigation of non-isothermal phase change phenomena in vertical Bridgman crystal growth. International Journal of Heat and Mass Transfer 52 (2009) 124–132.

[22] A. Laidoune, H. Lahrach, Y. Kagamitani, K. Lebbou, F. Carrillo, C. Goutaudier et 0. Tillement. Croissance de fibres polycristallines de composition eutectique $AL_2O_3 - Y_3AL_5O_{12}$ *pour renforcement de composite. J.Phys. IV. France 113(2004) 129 -134.*

[23] A. Laidoune. Croissance cristalline de fibres de saphir non dopées et dopées titane par la technique de la micro-pulling down et tirage par la méthode LHPG de fibres eutectiques appartenant au système Al_2O_3*-*ZrO_2 *–*Y_2O_3 *. A la recherche de fibres multifonctionnelles.A. Laidoune.Université de Batna(2010).*

[24]. A.Laidoune, K.Lebbou, D.Bahloul, M.Smadi, M.Zereg. Yttria stabilized Al_2O_3*–*ZrO_2 *eutectic crystal fibers grown by the laser heated pedestal growth (LHPG) method. Optical Materials 32 (2010) 731–734.*

[25] A. Nehari, A. Laidoune, M. Khetib, L. Grosvalet , A. Brenier , G. Panczer , G. Godfroy , S. Labor , K. Lebbou . Fibers and square sapphire shaped single crystals grown from the melt and optical characterization. Optical Materials 34 (2011) 365–367

[26] C. W. Lan, C. C. Liu, and C. M. Hsu. An Adaptive Finite Volume Method for Incompressible Heat Flow Problems in Solidification. Journal of Computational Physics 178, 464–497 (2002).

[27] Dale A.andersen, Retchard H.Pletcher.Computational fluideds mécanics and heat transfer. John C.Tannehill, Second Edition. ISBN 1-56032-046-X

[28] Adrian Bejan. HEAT TRANSFER HANDBOOK. 2003. JOHN WILEY & SONS, INC.

[29] I.Ch. Avetissov, A.P.Sadovskii, E.A.Sukhanova, E.V.Zharikov, A.I.Belogorokhov, B.N.Levonovich. Czochralski crystal growth assisted by axial vibrational control technique. J. Crystal Growth (2009), doi:10.1016/j.jcrysgro.2009.10.014.

[30] HARIZ ABDELKADER KHALED .La convection mixte dans un espace annulaire entre deux cylindres concentriques. Université de Mentouri. Constantine.2008.

[31] M. Spiesser, Jan Czochralski. La méthode du tirage des cristaux, Bulletin GFCC (Mai 1999).

[32] A.Hautcoeur, L.Buffard, A.Eberhardt. Utilisation de monocristaux sous forme de fil pour la réalisation de pièces mécanique. Institut Supérieur de Génie Mécanique Productique, Université de Metz, Lie du Saulcy 57045 METZ Cedex 1, France.

[33] J.C.Brice "Crystal Growth process", 295 pp, (Blackie Halsted press) 1986.

[34] T.H. Maiman, Nature 187 (1960) 493.

[35] B. Cockayne, J.G. Plant et R.A. Clay, J. Cryst. Growth 54 (1981) 407.

[36] R.F. Belt, R.C. Puttbach et D.A. Lepore, Crystal growth and perfection of large Czochalski Nd:YAG single crystals, J. Cryst. Growth 13/14 (1972) 268.

[37] Jean-Marc Huré. Méthodes Numériques. Ecole doctorale d'Ile-de-France. Universités Paris 7 et 11 - Observatoire de Paris. DEA Astrophysique & Méthodes associées -2002/2003.

[38] Pascal Viot. Méthodes d'analyse numérique. Cours du DEA "Modélisation Dynamique et Statistique des Systèmes Complexes". Laboratoire de Physique Théorique des Liquides, Boite 121, 4, Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05. 2 décembre 2002.

[39] D.Sangla, N.Aubry, A.Nehari, A.Brenier, O.Tillement, K.Lebbou , F.Balembois, P.Georges, D. Perrodin, J.Didierjean, J.M.Fourmigue .Yb-doped Lu3Al5O12 fibers single crystals grown under stationary stable state for laser application. Journal of Crystal Growth 312 (2009) 125–130.

[40] Gilbert Mouthon, Pierre Ravussin. Introduction aux lasers. Ecole Nationale Vétérinaire d'Alfort. Mars 2006

[41] R. Schirmaier, D. Meiser (Dokumentationsbüro D. Meiser). J. Mertens, K. Schweier, S. Pabot (HÜTTINGER Elektronik). Générateurs De Puissance Pour La Production Des Monocristaux. © HÜTTINGER Elektronik GmbH + Co. KG. Mars 2003.

[42] Philippe MARTY and Laurent MARTIN WITKOWSKI1. Contrôle de la convection Marangoni thermique. Laboratoire LEGI, BP 53 X, F-38041 Grenoble cedex. 20 Mai 1999

[43] L.F. Johnson et K. Nassau, Proc. IRE 49 (1961) 1704.

[44] A.Raufeisen, M.Breuer, T.Botsch, A.Delgado. Transient 3D simulation of Czochralski Crystal growth considering diameter variations. Journal of Crystal Growth 311 (2009) 695–697.

[45] Chung-Wei Lu, Jyh-ChenChen , Chien-HungChen , Chun-HungChen , Wen-ChingHsu , Che-Ming Liu. Effects of RF coil position on the transport processes during the stages of sapphire Czochralski crystal growth. Journal of Crystal Growth 312 (2010) 1074–1079

[46] BOUKDHIR Nabil, DAMAK Kamel, AYADI Abdelmoneim, MARTINE Meireles. Contribution Numérique À L'étude Des Écoulements Laminaires Incompressibles Dans Un Tube Poreux Avec Transfert De Masse Parietal. ISBN 2-910239-66-7, Ed. SFGP, Paris, France. 2005.

[47] Dreeben, A. B.; Kim, K. M.; Schujko, A. J. Cryst. Growth 1980, 50 (1), 126–132.

[48] C. Stelian. Oscillations of the longitudinal solutal profile in Bridgman. Growth of doped crystals. Journal of Crystal Growth 310 (2008) 1482–1486.

[49] Julien Didierjean. Développement de systèmes laser à fibres cristallines. Équipe Lasers Solides et Applications. Laboratoire Charles Fabry de l'Institut d'OptiqueCampus Polytechnique,RD 128, 91127 Palaiseau. oct 2011.

[50] D. Sangla, I. Martial, Xavier Délen, F. Balembois, P. Georges. Fibres cristallines dopées à l'ytterbium. DGA REI « Newmat » 2009-2012.

[51] Jean-Marie Fourmigue, François Balembois, Kheirréddine Lebbou. Procédé de fabrication de fibres monocristallines. Référence IN81. 2008.

[52] Tsuguo Fukuda, Advances IN materials Research 8, (2007).

[53] K.Lebbou, Mater Research Bull 35, 1277, (2000).

[54]I. Martial · D. Sangla · N. Aubry · J. Didierjean · D. Perrodin · F. Balembois · K. Lebbou · A. Brenier · P. Georges · O. Tillement · J.-M. Fourmigué. Lasers à fibres cristallines dopées Nd et Yb : point sur les avancées récentes. (2009).

[55] N. Aubry, J. Didierjean, D. Perrodin, J.-M. Fourmigué. Fibres cristallines dopées à l'ytterbium. DGA REI. Newmat . Brevet EP1966856. (2009).

[56] Hariz Abdelkader Khaled. La convection mixte dans un espace annulaire entre deux cylindres concentriques. 2008.

[57] P.H. Haumesser, Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie, "Elaboration par croissance Czochralski, caractérisation spéctroscopique et propriétés laser de monocristaux dopés par l'Ytterbium", 2000.

[58] Laidoune. Abdallah. Croissance de fibres monocristallines par le technique laser heated pesdestal growth (LHPG) pour des applications spécifiques [compositions eutectique].2005.

[59] Sébastien Forget. Optique des lasers & faisceaux gaussiens. Université Paris Nord/13.

[60] J. Carbonnet - M. Roques. Mecanique Des Fluides. Académie de Nancy-Metz.

[61]A.Fick,On liquid diffusion,Philos. Mog., Vol. 4. No. 10, 1855. pp. 30-39 ; reprinted in J.Membrane Science. 100, 1995. pp 33-38.

[62] Suhas V. Patankar. Numerical Heat transfer and Fluid Flow. Cenerg 02-330. Ecole Des Mines De Paris.

***[**63**]** *Josué Mora Acosta. Numerical algorithms for three dimentional computational fluid dynamic problems. Terrassa 2001.*

***[**64**]** *C.W. Lan, S. Uda, T. Fukuda. Theoretical analysis of the micro-pulling-down process for Ge_xSi_{1-x} fiber crystal growth. Journal of Crystal Growth 193 (1998) 552Ð562. June 1998.*

***[**65**]** *Loan. C. Popa. Modélisation numérique du transfert thermique. Méthode des volumes finis. 2002.*

***[**66**]** *A.Yoshikawa, B.M.Epelbaum, T.Fukuda, K.Suzuki, Y.Waku, Jpn.J.Appl.Phys, 38,55-58(1999).*

***[**67**]** *B. M. Epelbaum, A. Yoshikawa, K. Shimamura, T. Fukuda, K. Suzuki, Y. Waku, J. Cryst. Growth, 198/199,471-475 (1999).*

***[**68**]** *J.H.Lee, A.Yoshikawa, K.Lebbou, H.Kaiden, T.Fukuda, D.H.Yoon and Y.Waku, J.Crystal Growth 231, 179-185(2001).*

***[**69**]** *Jong Ho Lee, Akira Yoshikawa, Tsuguo Fukuda, Yoshiharu Waku, J. Crystal Growth 231 (2001)115-120.*

***[**70**]** *J.H. Lee, A. Yoshikawa, Y. Murayama, Y. Waku, S. Hanada , T. Fukuda, J. Eur. Ceram. Soc. 25 (2005) 1411–1417.*

[71] H. K. VERSTEEG and W. MALALASEKERA. An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method. New York. Longman Group Ltd 1995

[72] A.M. Fox. Atomic and Laser Physics.

[73] DELAGNES Jean-Christophe – RIVIERE Nicolas. Génération d'impulsions ultracourtes Université Paul Sabatier Toulouse III.2001.

[74] Nubling R., Harrington J, Optical properties of singele crystal sapphire fibers Applied Optics, Vol. 36, No.24, (1997).

[75] Walter Koechner. Michael Bass. Solid-State Lasers. 2003 Springer-Verlag New York.

[76] J. Czochralski, Z. Physik Chem. 92 (1918) 219.

[77] A. Verneuil, Annales de Chimie et de Physique 8e série III (1904), 20.

[78] D. Elwell et H.J. Scheel, Crystal growth from high-temperature solutions, New York Academic Press (1975).

[79] Yoshikawa, A. Nikl, M. Boulon, G. Fukuda, T. Opt. Mater. 2007, 30 (1), 6–10.

[80] W.J. Lee, Y.C.Lee, H.H.Jo, Y.H.Park. Effect of crucible geometry on melt convection and interface shape during Kyropoulos growth of sapphire single crystal. Journal of Crystal Growth 324 (2011) 248–254.

[81] DJOUIMAA Sihem. Simulation de l'écoulement transsonique turbulent autour d'une aube de turbine. Université de Batna. (2007).

Résumé

Dans ce travail nous avons étudié la solidification des fibres monocristalline de saphir dopé au titane à l'aide de la technique de croissance micro-pulling down (μ-PD). Notre travail est concentré sur les propriétés de la zone liquide. Le cristal de saphir dopé au titane possède beaucoup d'application dans le domaine des lasers et des cristaux pour l'optoélectronique. Dans cette étude nous avons établi un modèle numérique, bidimensionnel en coordonnées cylindriques avec une configuration axisymétrique pour un fluide Newtonien et incompressible, d'un écoulement laminaire en se basant sur les équations qui sont principalement celles des dérivées des lois de conservations physiques. L'écoulement, le transfert thermique et le transfert massique sont modélisés par les équations différentielles aux dérivées partielles de conservation de la masse, de quantité du mouvement, de l'énergie et des espèces. Ce problème qui tient compte du couplage convection-diffusion est discrétisé en utilisant la méthode des volumes finis. Notre modèle donne des résultats qui concordent avec les données expérimentales. Nous avons pu montrer que la méthode de μ-PD peu rassembler les conditions nécessaires pour l'optimisation de la distribution de la concentration des dopants pour augmenter le couplage entre l'onde laser et les ions du dopant afin de donner la plus haute puissance lumineuse possible en sortie du laser. Nous avons aussi trouvé que la convection de Marangoni est plus dominante sur la flottabilité.

Abstract

In this work we have studied the solidification of crystalline fibers of titanium doped sapphire drawn by the micro-pulling down (μ-PD) growing technique. Our study emphasizes on the physical properties of the melt zone. The crystals of sapphire have many applications in lasers and in optoelectronics. In this study we established a numerical, two-dimensional model in cylindrical co-ordinates with an axisymmetric configuration for a Newtonian and incompressible fluid, of a laminar flow based on the equations which are mainly those of derived from of the physical conservation laws. The flow, the thermal transfer and the mass transfer are modeled by the differential equations of conservation of the mass, of quantity of the movement, energy and the species. This problem, which takes into account the convection-diffusion coupling, is discretized using the Finite Volumes Method (FVM). Our model is in good agreement with experimental results. We have been able to show that the μ-PD method can gather the necessary conditions for optimization of the dopants concentration distribution for increasing the coupling between the laser wave and the ions of the doping agent in order to give the highest possible luminous power at the output of the laser. We found that, in the melt, Marangoni convection is dominant, and the buoyancy convection is negligible.

ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة تصلب ألياف السفير(Saphir) محقون بالتيتان (Titane) وذالك باستعمال طريقة السحب نحو الأسفل micro-pulling down (μ-PD) . عملنا ارتكز على خصائص المنطقة المنصهرة. بلور السفير المحقون بالتيتان له الكثير من التطبيقات في مجال الليزر و الاكترونييات. في هذه الدراسة قمنا با نشاء نموذج ثنائي البعد في الإحداثيات الاسطوانية لمائع نيوتوني غير قابل للانضغاط مع جريان غير مضطرب, وذالك بالتركيز على المعادلات المشتقة من قوانين الانحفاظ الفيزيائية. الجريان, التحول الحراري و المادي , ترجم بمعادلات تفاضلية ذات مشتقات جزئية لإنحفاظ الكتلة, كمية الحركة, الطاقة, المادة. لحل إشكالية تداخل الانتقال والحمل استعملنا طريقة الحجوم المتناهية. نموذجنا أعطى نتائج تتوافق مع المعطيات التجريبية. استطعنا إثبات أن طريقة μ-PD قادرة على جمع الشروط اللازمة لزيادة التداخل بين موجة الليزر وايونات المحقون من اجل إعطاء اكبر استطاعة مضيئة ممكنة عند مخرج الليزر.وجدنا أيضا أن حمل مارانغوني (Marangoni) يطغى على ظاهرة الطفو.

Résumé