

CHAPITRE 4

Résolution numérique du problèmes couple métallurgique - thermique



4.1. Introduction

4.2. Intégration temporelle du problème thermique linéaire

4.2.1. Les schémas d'intégration

4.2.2. Stabilité des schémas

4.2.3. Précision des schémas a et b

4.2.4. Choix d'un schéma d'intégration du problème thermique linéaire

4.3. Intégration des problèmes thermiques non linéaires

4.3.1. Système à 1 DDL

4.3.2. Système à plusieurs DDL

4.3.3. Choix du schéma d'intégration

4.4. Prise en compte des changements de phase

4.4.1. Introduction

4.4.2. Description des méthodes à maillage fixe

4.4.2.1. Approche différences finies

4.4.2.2. Approche éléments finis (bibliographie)

4.5. Description du code Lagamine (partie thermique-métallurgique)

4.5.1. Introduction

4.5.2. Introduction et vérification des données

4.5.3. Le programme Lagamine (thermique-métallurgique)

4.5.4. Précisions sur l'élément PL8TM

4.5.5. Stratégie de calcul et méthode de résolution

4.1. INTRODUCTION

Le modèle mathématique décrit au chapitre 3 met en jeu plusieurs sources de non linéarités :

- les caractéristiques thermiques du solide, telles que la conductivité et la capacité calorifique dépendent de la température et de l'état structural du solide (loi du mélange, formule 3.19),
- l'échange de chaleur par rayonnement à la surface du solide est régi par une loi non linéaire,
- la chaleur latente dégagée au cours des transformations structurales lors du refroidissement constitue une source interne de chaleur qui est forcément discontinue dans le temps.

Les changements de phase métallurgique se produisent sur un intervalle de température éventuellement très faible (en particulier la transformation austénite-martensite). Si l'on veut obtenir une simulation numérique précise, il est donc indispensable d'étudier soigneusement les schémas d'intégration temporelle des équations du modèle mathématique afin d'effectuer un choix bien adapté au problème qui nous intéresse.

Une partie importante (§ 4.2 et 4.3) de ce chapitre sera donc consacrée à une étude bibliographique des schémas numériques d'intégration temporelle de problèmes thermiques et de leur stabilité. On examinera aussi dans quelle mesure ils conviennent pour le couplage métallurgique-thermique et comment ils peuvent s'insérer dans le schéma général de résolution adopté dans le code LAGAMINE.

Enfin, le paragraphe 4.4 précisera les schémas numériques retenus et mettra en évidence les développements particuliers qui se sont avérés nécessaires.

Avant d'entrer dans le vif du sujet, il convient de faire quelques observations préliminaires.

On a en vue un couplage total non seulement des aspects métallurgiques et thermiques, mais également mécaniques (chapitre 5). On sera donc amené à développer des éléments finis dans lesquels le champ de températures et le champ de déplacements seront simultanément présents (chapitre 6). Ce sont les très fortes interactions entre les phénomènes métallurgiques, thermiques et mécaniques qui ont dicté ce choix et nous ont fait rejeter les approches où l'on étudie alternativement les phénomènes thermiques et mécaniques dans des algorithmes séparés (FOR 23, CP24, CP25).

Or, la formulation la plus classique des problèmes mécaniques a recours à des schémas

d'intégration temporelle à un seul pas de temps. C'est une telle approche qui est implantée dans le code LAGAMINE.

Pour l'analyse métallurgique-thermique, nous avons donc aussi choisi à priori de nous limiter à des schémas à un seul pas de temps afin de garantir un couplage plus aisé avec les phénomènes mécaniques.

D'autre part, ce couplage pose deux problèmes supplémentaires si le solide subit de grandes déformations :

- celui de l'objectivité des équations du modèle mathématique métallurgique-thermique,
- celui de l'intégration temporelle dans un domaine de forme variable.

Rappelons que le principe d'objectivité exprime que toute loi constitutive doit satisfaire l'invariance vis-à-vis d'un mouvement de corps rigide.

Considérons un point matériel X subissant un déplacement de corps rigide :

$$\underline{x}'(X) = \underline{Q} \cdot \underline{x}(X) + \underline{C}$$

où \underline{x} = coordonnées dans la configuration initiale γ

\underline{x}' = coordonnées dans la configuration γ' après déplacement de corps rigide

\underline{Q} = tenseur de rotation qui vérifie $\underline{Q} \underline{Q}^T = \underline{I}$ (tenseur unité)

\underline{C} = vecteur de translation.

Les variables reliées au point X dans la configuration initiale sont du type :

- scalaire : T (température), \dot{T} (dérivée de la température) ...
- vecteur : \underline{q}_k (flux conductif), ...
- tenseur : $\underline{\sigma}$ (contrainte), $\underline{\varepsilon}$ (déformation), ...

Ces mêmes variables seront affectées d'une apostrophe ' lorsqu'elles sont exprimées dans la configuration obtenue après déplacement rigide γ' . Les relations suivantes sont obtenues :

- scalaire : $T = T'$; $\dot{T} = \dot{T}'$; $k = k'$; ...
- vecteur : $\underline{q}' = \underline{Q} \underline{q}$; ...
- tenseur : $\underline{\sigma}' = \underline{Q} \underline{\sigma} \underline{Q}^T$, $\underline{\varepsilon}' = \underline{Q} \underline{\varepsilon} \underline{Q}^T$.

On vérifie sans peine que la loi de FOURIER isotrope est objective :

- configuration γ : $\underline{q}_k = k \nabla T$
- configuration γ' : $\underline{q}'_k = \underline{Q} \underline{q} = \underline{Q} k \nabla T = k \underline{Q} \underline{Q}^{-1} \underline{\nabla}' T = k' \underline{\nabla}' T'$.

Par ailleurs, le flux capacitif q_c et le flux dû au changement de phase q_{tr} sont des scalaires ; ils ne sont donc pas affectés par un déplacement de corps rigide. Il en est de même pour les paramètres décrivant les cinétiques de transformation de phase, les lois métallurgiques sont donc objectives.

L'objectivité des équations du modèle mathématique métallurgique thermique étant vérifiée, considérons le problème de l'intégration temporelle de l'équilibre thermique dans un domaine de forme variable. La prise en compte de la variation de la géométrie entraînerait l'utilisation de points de GAUSS dans l'espace temps comme pour l'intégration spatiale. Afin de ne pas accroître exagérément les temps de calcul, nous avons préféré intégrer les équations d'équilibre thermique dans le temps comme pour un solide immobile dont la configuration spatiale considérée est toujours la configuration finale du pas de temps. Cette intégration s'obtient donc par extension du schéma d'intégration temporelle relatif à un solide immobile, avec mise à jour à chaque pas des coordonnées, et des paramètres qui en dépendent.

On peut justifier cette approche par le fait que même si les déformations totales du solide étudié sont grandes, les changements de géométrie qui surviennent au cours d'un pas de temps restent faibles. Dans un même esprit, nous admettrons que les schémas d'intégration décrits dans un cadre de petites déformations, ainsi que leurs conditions de stabilité restent valables en cas d'analyse thermique mécanique couplée avec grandes déformations.

Cette remarque nous permet donc de développer la suite de ce chapitre dans un cadre de petites déformations où la géométrie reste fixe au cours d'un pas de temps. On évite ainsi le lourd formalisme des grandes déformations.

NB. CORMAN (EF5) a vérifié la conservation du caractère objectif des lois thermiques dans la modélisation par éléments finis et dans l'intégration temporelle du code LAGAMINE. La comparaison des résultats obtenus par ce code pour un écoulement de chaleur dans un solide immobile et pour le même écoulement dans un solide en rotation a donné entière satisfaction.

4.2. INTEGRATION TEMPORELLE DU PROBLEME THERMIQUE LINEAIRE

4.2.1. Les schémas d'intégration.

La notation \dot{X} sera couramment utilisée dans ce chapitre, elle concerne la dérivée par rapport au temps de la variable X .

L'équation d'équilibre thermique a été rappelée au chapitre 3 (3.15). Sous sa forme

discrétisée dans l'espace, on a :

$$\underline{\mathbf{K}} \underline{\mathbf{T}} + \underline{\mathbf{C}} \dot{\underline{\mathbf{T}}} + \underline{\mathbf{F}} = 0 \quad (4.1. = 3.21)$$

Dans les développements qui suivent, nous supposons toujours que $\underline{\mathbf{C}}$ est une matrice symétrique définie positive et $\underline{\mathbf{K}}$ une matrice symétrique définie semi-positive.

Soit un pas de temps Δt , utilisé pour passer de l'instant t_n à l'instant t_{n+1} .

Comment déterminer les températures nodales $\underline{\mathbf{T}}_{n+1}$ à l'instant t_{n+1} connaissant leurs valeurs $\underline{\mathbf{T}}_n$ à l'instant t_n en respectant au mieux l'équilibre thermique (3.15) ?

On peut distinguer quatre types d'approche :

a. l'expression de l'équilibre thermique en un instant privilégié du pas en tenant compte d'hypothèses sur l'évolution de la température et ou de sa dérivée au cours du pas (TNL 2)

Soit le coefficient θ appartenant à l'intervalle $[0,1]$ tel que toute valeur indiquée θ concerne le temps t_θ :

$$t_\theta = (1 - \theta) t_n + \theta t_{n+1} \quad (4.2.)$$

1. Schéma du trapèze généralisé (STG).

Les hypothèses concernent uniquement la dérivée de la température au temps t_θ :

$$\dot{\underline{\mathbf{T}}}_\theta = \frac{1}{\Delta t} (\underline{\mathbf{T}}_{n+1} - \underline{\mathbf{T}}_n) = (1 - \theta) \dot{\underline{\mathbf{T}}}_n + \theta \dot{\underline{\mathbf{T}}}_{n+1} \quad (4.3.)$$

En exprimant l'équilibre en début et en fin du pas et en utilisant (4.3), on obtient le système suivant :

$$[\underline{\mathbf{C}} + \theta \Delta t \underline{\mathbf{K}}] \underline{\mathbf{T}}_{n+1} = [\underline{\mathbf{C}} - (1 - \theta) \Delta t \underline{\mathbf{K}}] \underline{\mathbf{T}}_n - (1 - \theta) \Delta t \underline{\mathbf{F}}_n - \theta \Delta t \underline{\mathbf{F}}_{n+1} \quad (4.4.)$$

2. Schéma du point milieu généralisé (SMG).

Les hypothèses concernant la température et sa dérivée au temps t_θ :

$$\dot{\underline{\mathbf{T}}}_\theta = \frac{1}{\Delta t} (\underline{\mathbf{T}}_{n+1} - \underline{\mathbf{T}}_n) \quad \text{et} \quad \underline{\mathbf{T}}_\theta = (1 - \theta) \underline{\mathbf{T}}_n + \theta \underline{\mathbf{T}}_{n+1} \quad (4.5.)$$

En exprimant l'équilibre au temps t_θ , on obtient le système suivant :

$$[\underline{C} + \theta \Delta t \underline{K}] \underline{T}_{n+1} = [\underline{C} - (1 - \theta) \Delta t \underline{K}] \underline{T}_n - \underline{F}_\theta \quad (4.6.)$$

On réalise immédiatement que les deux schémas SMG et STG sont confondus si le terme \underline{F} évolue linéairement en fonction du temps.

b. l'expression d'un équilibre moyen par l'application de la méthode des résidus pondérés sur l'espace temporel (TL1).

Dans l'optique d'un élément fini discrétisant la variable temps, le coefficient θ devient une coordonnée temporelle non dimensionnelle :

$$\theta = \frac{t - t_n}{t_{n+1} - t_n} = \frac{t - t_n}{\Delta t} \text{ avec } t \in [t_n, t_{n+1}] \text{ et } \theta \in [0, 1] \quad (4.7.)$$

Considérons les fonctions d'interpolation linéaires de l'espace temps :

$$N_n = 1 - \theta \quad N_{n+1} = \theta \quad (4.8.)$$

Leurs dérivées par rapport à t valent :

$$\dot{N}_n = \frac{-1}{\Delta t} \quad \dot{N}_{n+1} = \frac{1}{\Delta t} \quad (4.9.)$$

Dans un élément fini linéaire "*temporel*", la température et sa dérivée sont obtenues par les relations :

$$\begin{aligned} \underline{T}(\theta) &= N_n \underline{T}_n + N_{n+1} \underline{T}_{n+1} = (1 - \theta) \underline{T}_n + \theta \underline{T}_{n+1} \\ \dot{\underline{T}}(\theta) &= \dot{N}_n \underline{T}_n + \dot{N}_{n+1} \underline{T}_{n+1} = \frac{\underline{T}_{n+1} - \underline{T}_n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (4.10.)$$

Au cours d'un pas, on vérifie la relation d'équilibre (4.1) pondérée par la fonction $W(\theta)$:

$$\int_0^1 W(\theta) [\underline{K} \underline{T}(\theta) + \underline{C} \dot{\underline{T}}(\theta) + \underline{F}(\theta)] d\theta = 0 \quad (4.11.)$$

Si l'on adopte $W(\theta)$ fonction de DIRAC en θ égal 1, on retrouve le schéma SMG (4.6).

La méthode proposée est cependant plus générale puisque de nombreux choix de $W(\theta)$ sont possibles.

Par exemple, le choix b décrit par la figure 4.1 restitue notamment le schéma de GALERKIN

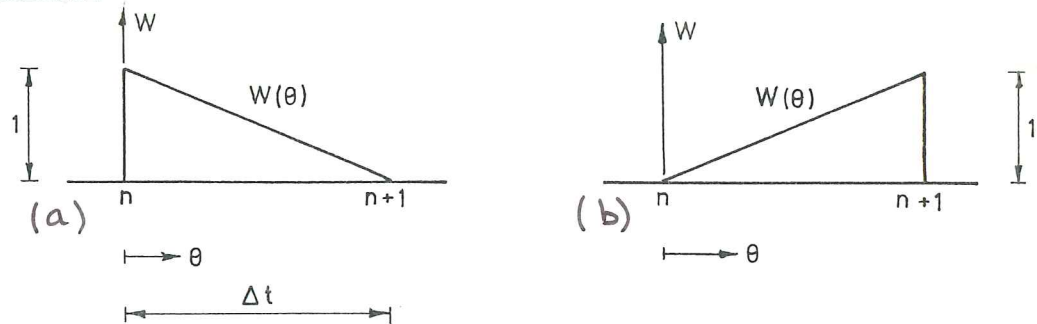


Figure 4.1. - Choix possibles de la fonction de pondération $W(\theta)$, le cas b restitue le schéma d'intégration temporelle de GALERKIN

ZIENKIEWICZ propose quant à lui une fonction $W(\theta) = 1$ (figure 4.2).

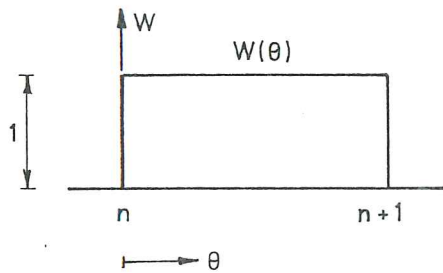


Figure 4.2. - fonction de pondération $W(\theta)$ proposée par ZIENKIEWICZ

Afin de retrouver un système d'équations comparable à ceux définis pour les schémas SMG et STG (4.6, 4.4), on pose :

$$\theta^* = \int_0^1 W\theta \, d\theta / \int_0^1 W \, d\theta \quad \theta^* \in [0, 1] \quad (4.12.a)$$

$$\bar{E} = \int_0^1 W E \, d\theta / \int_0^1 W \, d\theta \quad (4.12.b)$$

Et l'on obtient :

$$(\underline{C} + \theta^* \Delta t \underline{K}) \underline{T}_{n+1} = [C - (1 - \theta^*) \Delta t \underline{K}] \underline{T}_n + \bar{E} \quad (4.13.)$$

On observe que la différence avec les schémas présentés en (a) réside dans l'utilisation d'une moyenne pondérée sur le temps du terme \underline{E} .

c. Utilisation d'une procédure des moindres carrés (TL1).

Si l'on adopte la méthode (b) avec $W(\theta) = 1$ (hypothèse de ZIENKIEWICZ), l'équilibre est respecté *en moyenne* au cours du pas. Il existe donc une erreur $\underline{e}(\theta)$ traduisant le flux hors d'équilibre :

$$\underline{e}(\theta) = \underline{K} \underline{T}(\theta) + \underline{C} \dot{\underline{T}}(\theta) + \underline{F}(\theta) \neq \underline{0} \quad (4.14.)$$

La fonction π définie ci-après constitue une mesure de cette erreur :

$$\pi = \int_0^1 \underline{e}(\theta)^T \underline{e}(\theta) d\theta \quad (4.15.)$$

Par minimisation de π par rapport à \underline{T}_{n+1} , on obtient :

$$\begin{aligned} & [\underline{C}^T \underline{C}/\Delta t + (\underline{K}^T \underline{C} + \underline{C}^T \underline{K})/2 + \underline{K}^T \underline{K} \Delta t/3] \underline{T}_{n+1} + \\ & [-\underline{C}^T \underline{C}/\Delta t - (\underline{K}^T \underline{C} - \underline{C}^T \underline{K})/2 + \underline{K}^T \underline{K} \Delta t/6] \underline{T}_n \\ & + \underline{K}^T \int_0^1 \underline{F} \theta d\theta / \Delta t^2 + \underline{C}^T \int_0^1 \underline{F} d\theta / \Delta t = 0 \end{aligned} \quad (4.16.)$$

Ce schéma donne des résultats très précis mais, il entraîne des temps de calculs trop importants pour être d'usage pratique. Nous ne le retiendrons donc pas.

d. Utilisation de la solution exacte.

Le système à résoudre (4.1) peut se mettre sous la forme d'une équation différentielle :

$$\dot{\underline{T}}(t) = -\underline{C}^{-1} \underline{K} \underline{T}(t) - \underline{C}^{-1} \underline{F}(t) \quad \text{avec} \quad \underline{T}(0) = \underline{T}_0 \quad (4.17.)$$

La solution classique de cette équation vaut :

$$\underline{T}(t) = e^{-\underline{C}^{-1} \underline{K} t} \underline{T}_0 + \int_0^t e^{-\underline{C}^{-1} \underline{K}(t-s)} (-\underline{C}^{-1} \underline{F}(s)) ds \quad (4.18.)$$

On peut relier la solution au temps t_{n+1} à celle du temps t_n :

$$\underline{T}_{n+1} = e^{-\underline{C}^{-1} \underline{K} \Delta t} \left[\underline{T}_n + e^{-\underline{C}^{-1} \underline{K} t} \int_t^{t+\Delta t} e^{-\underline{C}^{-1} \underline{K} s} (-\underline{C}^{-1} \underline{F}(s)) ds \right] \quad (4.19.)$$

L'utilisation pratique de cette formule implique que les matrices exponentielles soient calculées de façon approchée (TL5). Quant au terme $\underline{F}(t)$, il est généralement pris linéaire entre t_n et t_{n+1} .

Selon l'approximation des matrices exponentielles retenues, on peut obtenir un grand nombre de schémas d'intégration. Citons-en trois :

$$\bullet \left(\underline{C} - \frac{\underline{K} \Delta t}{2} \right) \underline{T}_{n+1} = \left(\underline{C} + \frac{\underline{K} \Delta t}{2} \right) \underline{T}_n + (\underline{E}_n + \underline{E}_{n+1}) \frac{\Delta t}{2} \quad (4.20.a)$$

$$\bullet \left(\underline{C} - \frac{2 \underline{K} \Delta t}{3} + \frac{\underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{K} \Delta t^2}{6} \right) \underline{T}_{n+1} = \left(\underline{C} + \underline{K} \frac{\Delta t}{3} \right) \underline{T}_n + (\underline{E}_n + \underline{E}_{n+1}) \frac{\Delta t}{2} - \underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{E}_{n+1} \frac{\Delta t^2}{6} \quad (4.20.b)$$

$$\bullet \left(\underline{C} - \frac{\underline{K} \Delta t}{2} + \frac{\underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{K} \Delta t^2}{12} \right) \underline{T}_{n+1} = \left(\underline{C} + \underline{K} \frac{\Delta t}{2} + \frac{\underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{K} \Delta t^2}{12} \right) \underline{T}_n + (\underline{E}_n + \underline{E}_{n+1}) \frac{\Delta t}{2} - \underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{E}_{n+1} \frac{\Delta t^2}{6} \quad (4.20.c)$$

Le schéma (4.20.a) est en fait le schéma classique de CRANK NICOLSON que l'on obtient également à partir de la méthode SMG avec $\theta = 1/2$.

Si l'on utilise la méthode du gradient conjugué pour résoudre le système, la présence du terme $\underline{K} \underline{C}^{-1} \underline{K}$ dans (4.20.b et c) ne pose pas de problème (TNL 6). Par contre pour les méthodes de résolution plus classiques, ce terme engendre des difficultés et augmente le temps de résolution. La méthode du gradient conjugué n'étant pas disponible dans le code LAGAMINE, nous n'étudierons pas en détail les schémas (4.20b et c) proposés par PADE même s'ils sont plus précis que les schémas des méthodes **a** et **b**.

HOGGE (TL 5) suggère l'application d'une autre méthode. Il réalise une décomposition modale du système de taille N (4.17) et transforme ensuite son système en N équations différentielles du premier ordre (procédé classique présenté en 2.3). Une résolution exacte des équations découplées est alors possible. Cette méthode s'appelle la méthode des opérateurs modaux

4.2.2. Stabilité des schémas.

Pour les raisons expliquées ci-dessus, nous analyserons uniquement les schémas **a** et **b**. Nous considérons le cas d'un système homogène de taille N dont les matrices K et C sont symétriques définies positives :

$$\underline{K}_{ij} T_j + C_{ij} \dot{T}_j = 0 \quad i, j = 1, N \quad (4.21.)$$

Les trois schémas STG (4.4), SMG (4.6) et **b** (4.13) sont alors confondus. Les valeurs propres et les vecteurs propres du système d'équations (4.21) sont définis par la relation :

$$(\underline{K} - \alpha_i^2 \underline{C}) \underline{x}_i = 0 \quad 0 \leq \alpha_1^2 \leq \alpha_2^2 \leq \alpha_3^2 \leq \dots \leq \alpha_N^2 \quad (4.22.)$$

où \underline{x}_i = vecteur propre et α_i^2 = valeur propre.

Les vecteurs propres sont orthogonaux, et on choisit la normalisation suivante :

$$\underline{x}_i^T \underline{C} \underline{x}_j = \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \underline{x}_i^T \underline{K} \underline{x}_j = \alpha_i^2 \delta_{ij} \quad (4.23.)$$

Ils constituent une base pour tout vecteur \underline{T} :

$$\underline{T}(t) = v_i(t) \underline{x}_i \quad \text{et} \quad \dot{\underline{T}}(t) = \dot{v}_i(t) \underline{x}_i \quad i = 1, N \quad (4.24.)$$

En tenant compte des équations (4.23.) et (4.24.), on transforme facilement le système d'équations (4.21.), en N équations découplées :

$$\alpha_i^2 v_i(t) + \dot{v}_i(t) = 0 \quad i = 1, N \quad (\text{pas de somme sur } i) \quad (4.25.)$$

Dans la suite, nous traiterons uniquement l'équation générale :

$$\dot{v}(t) + \alpha^2 v(t) = 0 \quad (4.26.)$$

sans oublier que α peut prendre toutes les valeurs propres $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ du système. La solution de cette équation est connue, elle vaut :

$$v(t) = v(0) e^{-\alpha^2 t} \quad (4.27.)$$

Pour les schémas à un pas étudiés, on relie la valeur inconnues v_{n+1} au temps t_{n+1} à la valeur connue v_n au temps t_n par un facteur d'amplification A :

$$v_{n+1} = A v_n \text{ avec } A_{\text{exact}} = e^{-\alpha^2 \Delta t} \text{ valeur exacte} \quad (4.28.)$$

L'application successive de cette relation donne

$$v_{n+k} = A^k v_n \quad (4.29.)$$

Par un passage à la limite, on trouve que $|A|$ doit être inférieur à l'unité :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} v(0) e^{-\alpha^2 t} = 0 \text{ voir (4.27.)}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} v_{n+k} = \lim_{k \rightarrow \infty} A^k v_n = 0 \text{ voir (4.29.)}$$

L'application de ces développements aux schémas d'intégration STG (4.4), SMG (4.6) et b (4.13) donne le facteur d'amplification unique suivant :

$$A = \frac{1 - (1 - \theta) \Delta t \alpha^2}{1 + \theta \Delta t \alpha^2} \quad (4.30.)$$

La condition $|A| < 1$ fournit la limite de stabilité suivante :

$$\Delta t < \frac{2}{(1 - 2\theta) \alpha^2} \quad (4.31.)$$

Soit un pas de temps illimité pour un coefficient $\theta \geq 1/2$.

Dans une analyse par éléments finis, le théorème de FRIED-IRONS assure la propriété suivante :

$$\begin{array}{l} \alpha^2 \text{ maximum du système représentant} \\ \text{l'équilibre du solide étudié} \end{array} \leq \begin{array}{l} \alpha^2 \text{ maximum de tous les éléments} \\ \text{finis constituant le solide} \end{array} \quad (4.32.)$$

Par conséquent, pour un coefficient θ inférieur à $1/2$, on a la condition de stabilité :

$$\Delta t \leq \frac{2}{(1 - 2\theta) \alpha_{\text{maximum des éléments}}^2} \quad (4.33.)$$

La figure suivante résume la valeur du facteur d'amplification pour différents choix de θ .

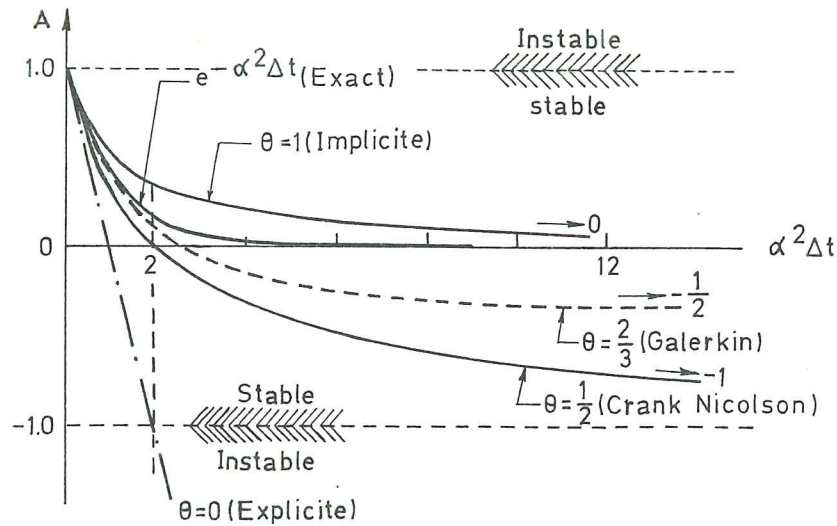


Figure 4.3. - Variation du facteur d'amplification avec $\alpha^2 \Delta t$ pour différents schémas d'intégration (d'après TL 1).

4.2.3. Précision des schémas a et b.

- *Présence d'oscillations.*

Dès que le facteur d'amplification est négatif, des oscillations vont apparaître puisque A^k sera tour à tour positif et négatif au cours des pas successifs. En annulant le facteur d'amplification (4.30), on obtiendra donc la taille maximale du pas de temps Δt pour éviter les oscillations soit :

$$\Delta t_{\text{osc}} \alpha^2 = \frac{1}{1 - \theta} \quad (4.34.)$$

Soit $\Delta t_{\text{osc}} \alpha^2 = 1$ pour $\theta = 0$ schéma explicite

$\Delta t_{\text{osc}} \alpha^2 = 2$ pour $\theta = 1/2$ schéma de CRANK NICOLSON

$\Delta t_{\text{osc}} \alpha^2 = 3$ pour $\theta = 2/3$ schéma de GALERKIN

$\Delta t_{\text{osc}} \alpha^2 = \infty$ pour $\theta = 1$ schéma implicite

En conclusion, plus le caractère implicite ($\theta \rightarrow 1$) est important, moins le pas de temps est limité si l'on désire éviter les oscillations, ce qui est impératif pour le couplage mécanique élasto-plastique.

Par ailleurs, divers moyens de filtrage permettent de remédier à cet inconvénient lorsque Δt est supérieur à Δt_{osc} (TL 2, TL 8).

• **Ordre de précision des schémas.**

Pour le cas d'un système homogène, la comparaison des facteurs d'amplification exact et approché fournit de suite l'ordre de précision par rapport au pas de temps Δt .

$$A_{\text{exact}} = e^{-\alpha^2 \Delta t} = 1 - \alpha^2 \Delta t + \frac{1}{2} (\alpha^2 \Delta t)^2 - \frac{1}{6} (\alpha^2 \Delta t)^3 + \dots \quad (4.35.a)$$

$$A = \frac{1 - (1-\theta) \alpha^2 \Delta t}{1 + \theta \Delta t \alpha^2} = 1 - \alpha^2 \Delta t + \theta (\alpha^2 \Delta t)^2 - \theta^2 (\alpha^2 \Delta t)^3 + \dots \quad (4.35.b)$$

Seul le schéma de CRANK NICOLSON ($\theta = 1/2$) est précis à l'ordre 2 ; les autres valeurs de θ conduisent à un schéma précis au premier ordre.

Poussée plus loin, cette comparaison permet une classification plus précise des schémas par l'étude des taux de décroissances obtenus (fig. 4.4.) :

$$A_{\text{exact}} = e^{-a^2 \Delta t} \quad \text{voir (4.28.)}$$

$$A = e^{-a^2(\theta) \Delta t} \quad \text{avec} \quad a^2(\theta) = \frac{1}{\Delta t} \ln \left(\frac{1 + \theta \Delta t \alpha^2}{1 - (1-\theta) \alpha^2 \Delta t} \right) \quad \text{voir (4.30.)}$$

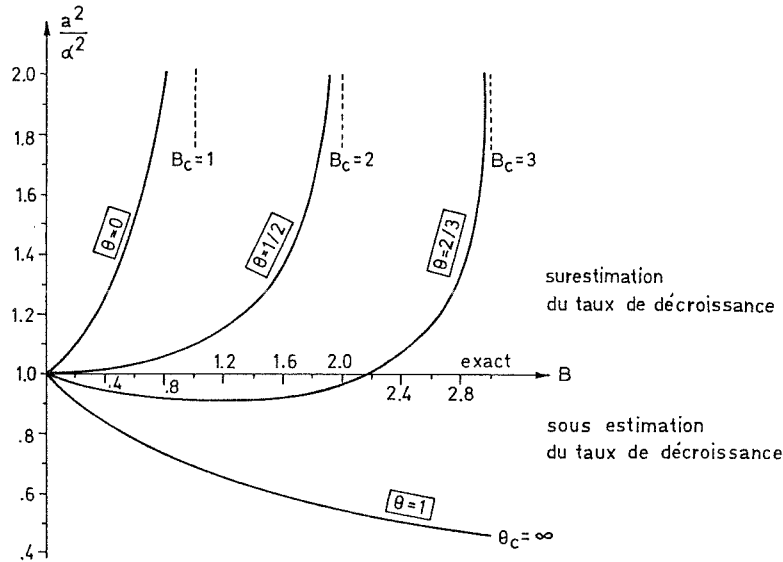


Figure 4.4.
Comparaison du taux de décroissance pour différents schémas (d'après TL 5)

$$B = \alpha^2 \Delta t \quad ; \quad B_c = \frac{1}{1-\theta} \quad ; \quad \frac{a^2}{\alpha^2} = \frac{1}{B} \ln \left(\frac{1 + \theta B}{1 - B(1-\theta)} \right)$$

On voit ainsi que le schéma de GALERKIN ($\theta = 2/3$) est le plus précis pour des pas de temps modérés.

4.2.4. Choix d'un schéma d'intégration du problème thermique linéaire.

En pratique, les problèmes qui nous intéressent atteignent rapidement un grand nombre de degrés de liberté, et nous ne pouvons considérer les méthodes coûteuses en temps CPU même si elles permettent d'atteindre une grande précision. Nous excluons donc les méthodes basées sur les moindres carrés, les formules de PADE (4.20 b et 4.20 c) ainsi que les opérateurs modaux de HOGGE (TL 5).

Par ailleurs, la possibilité d'utiliser des grands pas est essentielle pour nos problèmes qui couvrent un espace de temps important. Par conséquent nous éliminons les schémas dont la stabilité est conditionnée par la taille du pas.

Les schémas du type équilibre instantané (méthode a du paragraphe 4.2) ont été abondamment étudiées (section TL de la bibliographie). Seuls les schémas à caractère implicite ($\theta \geq 1/2$) sont inconditionnellement stables (voir § 4.3). Pour les classer, on analyse leur précision (voir § 4.4) et les résultats d'exemples numériques traités pour différentes valeurs de θ (TL 1, TL 2, TL 5, TL 6, TL 7). Les caractéristiques suivantes peuvent être retenues :

$\theta = 1/2$ Schéma de CRANCK NICOLSON

- précision du second ordre pour de petits pas de temps,
- oscillations d'autant plus fortes que les conditions aux limites varient brusquement (mauvaise réponse à court terme),
- utilisation optimum pour les problèmes où les modes de hautes fréquences ne sont pas importants.

$\theta = 1/2$ + méthode anti-oscillante (TL 2)

- résultats excellents mais la méthode anti-oscillante utilise souvent une moyenne entre la solution de 2 pas successifs, ce n'est donc plus à proprement parler une méthode à un pas.

$\theta = 2/3$ Schéma de GALERKIN

- meilleure réponse "*à moyen terme*", soit pour des phénomènes de période moyenne (précision supérieure à $\theta = 1/2$ à moyen terme (figure 4.4))

$\theta = 1$ Schéma implicite

- minimise l'erreur due à la linéarisation du terme de charge (TL 5)
- évite les oscillations même pour les grands pas

- précision : d'après les exemples traités dans les références TL 2, TL 5, ce schéma se place avant le schéma de CRANK NICOLSON et après celui de GALERKIN.

Les schémas du type ZIENKIEWICZ (méthode **b** du § 4.2) se différencient des schémas précédents par l'utilisation d'une moyenne pondérée du terme de charge . La référence (TL 8) compare ces deux types d'approche pour différentes valeurs égale de θ (méthode **a**, formule 4.4 ou 4.6) et de θ^* (méthode **b**, formule 4.13).

La fonction de pondération choisie est évidemment différente d'une fonction de DIRAC afin de ne pas retrouver les schémas de la méthode **a**.

Les trois cas analysés ($\theta = 1/2 ; 2/3 ; 0,878$) traitent le cas d'une modification brusque du terme de charge \underline{F} . Ils montrent une réduction des oscillations et une augmentation de la précision grâce à la méthode de ZIENKIEWICZ.

En conclusion, nous préconisons l'usage de la méthode de ZIENKIEWICZ avec un θ^* compris entre $2/3$ et 1 .

Remarque.

On a parlé ci-dessus des oscillations temporelles, il faut aussi prendre en compte les oscillations spatiales (TL 4).

Suite à une variation des conditions de frontière, le phénomène se propage à l'intérieur du solide, et détermine une profondeur de pénétration. Si les mailles ont une taille supérieure à cette profondeur aux premiers instants, on obtiendra des oscillations spatiales de la température.

Dans notre recherche des contraintes résiduelles, les oscillations numériques doivent être évités afin de ne pas obtenir de plastification artificielle.

Deux remèdes sont possibles :

- augmenter le pas de temps Δt (ce qui a pour effet de lisser la solution mais alors, le début du phénomène n'est pas bien représenté),
- définir un maillage fin près des frontières attaquées par la perturbation.

Ces solutions peuvent à leur tour provoquer des oscillations temporelles puisque diminuer la taille des éléments entraîne une diminution importante (au carré) de la taille du pas de temps provoquant les oscillations ...

Cette remarque nous conforte donc dans l'utilisation de schémas d'intégration temporels à caractère implicite, pour lesquels ces oscillations temporelles n'existent pas ($\theta^* = 1$) où apparaissent pour des pas de temps importants ($\theta^* = 2/3$).

4.3. INTEGRATION DES PROBLEMES THERMIQUES NON LINEAIRES

4.3.1. Système à 1 DDL.

L'analyse d'un système à un degré de liberté sans terme de charge fournit une première approche :

$$\dot{T} + \alpha^2 (T) T = 0 \quad (4.36.)$$

En comparant ce cas particulier au système d'équations thermiques (4.1), on voit que les matrices \underline{K} et \underline{C} sont réduites à une dimension et que le terme de charge \underline{F} est nul.

$$\underline{K} = \alpha^2 (T) \quad \underline{C} = 1 \quad \underline{F} = 0 \quad (4.37.)$$

L'équation (4.36) est très proche de l'équation (4.26) déjà traitée pour le cas linéaire. Nous définissons à nouveau le facteur d'amplification A limité à 1 afin d'assurer la stabilité.

$$T_{n+1} = A_{n,n+1} T_n \quad |A_{n,n+1}| < 1 \quad (4.38.)$$

Dans le cadre d'une analyse non linéaire, nous allons voir que les facteurs d'amplification des schémas SMG et STG ne sont plus confondus (TNL1, TNL2). L'importance du choix de la variable linéarisée et de l'instant où l'on exprime l'équilibre est donc mise en évidence.

Schéma STG.

Puisque l'équilibre est exprimé en début et en fin de pas, les matrices \underline{C} et \underline{K} considérées sont celles correspondant aux températures T_n et T_{n+1} . La formule (4.4) adaptée au cas d'un système à 1 DDL non linéaire donne :

$$[1 + \theta \Delta t \alpha^2 (T_{n+1})] T_{n+1} = [1 - (1-\theta) \Delta t \alpha^2 (T_n)] T_n \quad (4.39.)$$

Soit le facteur d'amplification :

$$A_{n,n+1} = \frac{1 - (1 - \theta) \Delta t \alpha_n^2}{1 + \theta \Delta t \alpha_{n+1}^2} \text{ avec } \alpha_n = \alpha (T_n) \text{ et } \alpha_{n+1} = \alpha (T_{n+1}) \quad (4.40.)$$

La vérification de la condition $|A_{n,n+1}| < 1$ entraîne les conclusions suivantes :

- si $\alpha_{n+1}^2 \geq \frac{1-\theta}{\theta} \alpha_n^2$, le pas de temps peut être quelconque, la stabilité du schéma est assurée
- si $\alpha_{n+1}^2 < \frac{1-\theta}{\theta} \alpha_n^2$, le schéma sera stable si le pas de temps vérifie la condition

$$\Delta t \leq \frac{2}{(1 - \theta) \alpha_n^2 - \theta \alpha_{n+1}^2}$$

Schéma SMG.

L'équilibre est exprimé en t_θ , et l'adaptation de la formule (4.6) donne :

$$[1 + \theta \Delta t \alpha_{n+\theta}^2] T_{n+1} = [1 - (1 - \theta) \Delta t \alpha_{n+\theta}^2] T_n \quad (4.41.)$$

avec $\alpha_{n+\theta}^2 = \alpha^2 (T_{n+\theta})$

Le facteur d'amplification vaut :

$$\frac{1 - (1 - \theta) \Delta t \alpha_{n+\theta}^2}{1 + \theta \Delta t \alpha_{n+\theta}^2} \quad (4.42.)$$

La condition de stabilité $|A_{n,n+1}| < 1$ est toujours vérifiée si $\theta \geq 1/2$.

Dans le cas de $\theta < 1/2$, le pas de temps est limité à :

$$\Delta t \leq \frac{2}{(1 - 2\theta) \alpha_{n+\theta}^2} \quad (4.43.)$$

Au vu de cette première approche, le schéma SMG est plus attirant puisqu'il conserve sa condition de stabilité des cas linéaires contrairement au schéma STG.

Lorsqu'on se place dans des zones de stabilité conditionnelle, le choix du pas de temps n'est pas simple puisque les coefficients α^2 dépendent de la température, ils sont donc inconnus a priori et variables dans le domaine étudié.

4.3.2. Système à plusieurs DDL.

HUGHES (TNL 1) a démontré que les résultats de l'analyse du problème à un seul degré de liberté ne se transposaient pas systématiquement aux problèmes plus importants dans le cas de l'analyse non linéaire.

En effet, considérons le cas d'un système de N équations non linéaires dont les matrices \underline{K} et \underline{C} sont toujours symétriques définies positives. A tout instant, on peut définir les vecteurs propres et valeurs propres correspondant au système exprimant l'équilibre thermique.

Le schéma SMG fait intervenir l'équilibre en un seul instant et par conséquent un seul ensemble de valeurs propres et de vecteurs propres. La méthode appliquée au § 4.2.2. pour passer à N équations découplées peut donc être utilisée.

Par contre, le schéma STG utilise l'équilibre en début et en fin de pas, il correspond à une formulation "hybride" contenant des valeurs propres et vecteurs propres relatifs aux matrices \underline{K} et \underline{C} définies aux températures de début et de fin de pas. La transformation du système en N équations découplées est impossible.

Par conséquent, les conditions de stabilité définies pour le schéma STG pour une seule équation ne sont pas transposables au cas d'un système de N équations.

En réalité, un critère global adapté aux systèmes non linéaires à plusieurs DDL démontre la stabilité du schéma STG dans les mêmes conditions qu'en analyse linéaire.

HUGHES (TNL 4) en 1977 et HOGGE (TNL 5) en 1978, ont en effet établi, pour une équation homogène de matrice \underline{C} constante, le critère suivant :

$$\underline{T}_{n+1}^T \underline{C} \underline{T}_{n+1} \leq \underline{T}_0^T (\underline{C} + 2 \theta \Delta t \underline{K}_0 + \Delta t^2 \underline{K}_0 \underline{C}^{-1} \underline{K}_0) \underline{T}_0 \quad (4.44.a)$$

$$\text{si } 2 + (2 \theta - 1) \Delta t (\alpha^i)_{\max}^2 \geq 0 \quad (4.44.b)$$

avec • l'indice o indiquant les conditions initiales définies en $t = 0$

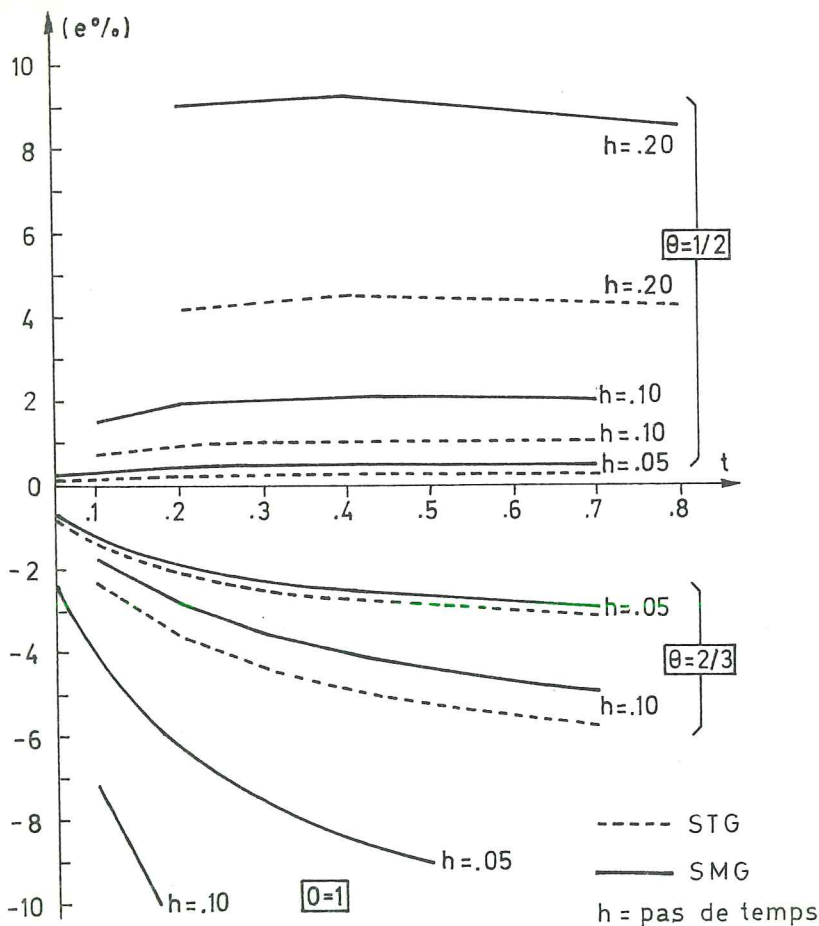
- $(\alpha^i)_{\max}$ la valeur propre maximale correspondant au système en $t = t_n$.

Cette inégalité fournit la garantie d'une solution bornée (stable) sous une condition (4.44b) analogue à la condition (4.31) de l'analyse linéaire. Ce critère appliqué au schéma SMG confirme le résultat obtenu ci-dessus (4.43), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{n+1}^T \mathbf{C} \mathbf{T}_{n+1} &\leq \mathbf{T}_0^T \mathbf{C} \mathbf{T}_0 & (4.45.) \\ \text{si } 2 + (2\theta - 1) \Delta t (\alpha^i)_{n+\theta}^2 &\geq 0 \\ &\text{max} \end{aligned}$$

4.3.3. Choix du schéma d'intégration.

En conclusion, l'analyse de la stabilité ne met pas en évidence un schéma typiquement supérieur aux autres. A partir d'un exemple (fig. 4.5), HOGGE montre que le schéma SMG est plus précis que le schéma STG. Il recommande la valeur de $\theta = 2/3$ afin d'éviter les oscillations de la réponse à court terme sans perdre trop de précision.



équation étudiée : $\dot{T} + (1 + 0,03 T) T = 0$
 e = pourcentage d'erreur entre la solution exacte et les résultats numériques

Figure 4.5.

Comparaison de la précision de différents schémas d'intégration (d'après TNL 3).

L'exemple relatif au changement de phase traité au § 4.5.5 confirme la précision du schéma de GALERKIN ($\theta = 2/3$).

4.4. PRISE EN COMPTE DES CHANGEMENTS DE PHASE

4.4.1. Introduction.

La bibliographie relative aux changements de phase est relativement étendue car de nombreux problèmes pratiques sont concernés. Citons par exemple :

- la solidification d'un métal :
 - le procédé de coulée continue dans les aciéries (TCP 13) et les industries de l'aluminium (CP 26)
 - le processus de refroidissement en fonderie à modèle perdu (TCP 10)
 - la fabrication par solidification dirigée de composants aérospatiaux effilés en super alliages (TCP 10)
 - l'étude détaillée des soudures (CP4),
- la simulation des traitements thermiques (trempe, revenu) d'une pièce métallique telle que le matériau présente plusieurs phases solides (voir chapitre 3),
- la congélation de l'eau, libre ou dans un sol (TCP 12, TCP 13, TCP 8),
- la fusion de combustible nucléaire,
- les changements de phases suite à des réactions chimiques dans un matériau (corrosion, ...),
- les problèmes d'ablation ou de creusement de tunnel, "*changement de phase*" extrême puisque le matériau disparaît.

Les solutions analytiques disponibles traitent des problèmes très simplifiés : conduction unidimensionnelle, géométrie semi-infinie, conditions de frontières élémentaires, ... Elle ne permettent pas la résolution des problèmes cités ci-dessus.

Les méthodes expérimentales sont généralement coûteuses en temps et en argent et elles sont le plus souvent imprécises. On comprend dès lors la motivation de réaliser des simulations numériques. Le choix des éléments finis permet une grande liberté quant aux problèmes géométriques traités et aux conditions aux limites représentées.

Nous pouvons distinguer deux grands types d'approche dans les simulations

numériques : méthodes à maillage fixe ou à maillage variable. Nous ne traiterons ici que les premières. En effet, une approche à maillage variable implique l'existence au départ d'éléments de chaque phase en présence. Le déplacement des noeuds frontières entre les phases est déterminé par la résolution des équations d'équilibre thermique et le mouvement des autres noeuds en découle d'une manière ou d'une autre selon la méthode.

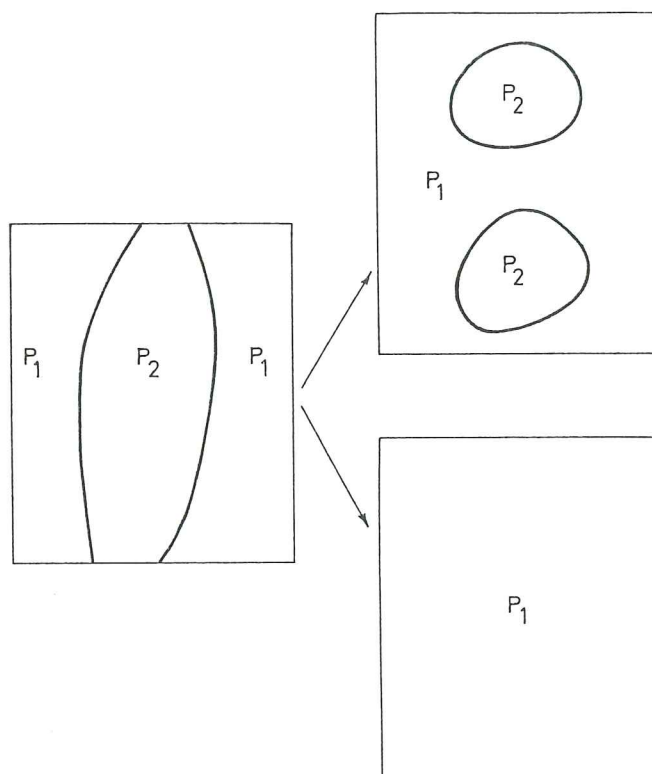


Figure 4.6.- Cas difficiles pour les méthodes à maillage variable.

Cette méthode présente donc des difficultés lorsque il y a apparition et disparition de certaines phases, ou lorsque la ligne de front se scinde en plusieurs morceaux. Elle est ardue à utiliser si plus de 2 phases sont en présence. Dans l'étude du refroidissement d'une pièce métallique, tous ces problèmes sont présents et il est donc inutile d'étudier cette voie.

4.4.2. Description des méthodes à maillage fixe.

4.4.2.1. Approche différences finies.

SZEKELY en 1968, MEYER en 1970 et ATTHEY en 1974 (TCP 14) furent sans doute les premiers à proposer des méthodes numériques pour résoudre le problème de changement de phase. Tous trois employaient une méthode aux différences finies basée sur l'enthalpie H avec schéma explicite pour SZEKELY et ATTHEY et implicite pour MEYER.

L'équation unidimensionnelle qu'ils essayaient de résoudre est la suivante :

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \phi(T) \quad (4.46.)$$

où le terme $\phi(T)$ traduit la présence d'une "source" ou d'un "puits" de chaleur dans la zone de changement de phase. Présentons la solution proposée par ATTHEY :

$$(H_{n+1})_i = (H_n)_i + \frac{k \Delta t}{\rho (\Delta x)^2} [(T_n)_{i-1} - 2(T_n)_i + (T_n)_{i+1}] + \frac{\Delta t}{\rho} \phi[(T_n)_i] \quad (4.47.)$$

- où
- les indices $n, n + 1$ définissent l'instant t_n ou t_{n+1}
 - les indices $i, i - 1, i + 1$ définissent les points concernés
 - Δx est la distance constante entre deux points.

L'étude réalisée en 1979 par VOLLER, CROSS et WALTON (TCP 14) montre que cette équation restitue les méthodes de SZEKELY et MEYER pour un choix adéquat de la fonction $\phi(T)$.

Cet article démontre par ailleurs que ce type de méthode n'est stable que pour certains choix d'un paramètre ε qui étend la température de changement de phase T_m à une zone de température $[T_m - \varepsilon, T_m + \varepsilon]$. Un mauvais choix de ε conduit à négliger le changement de phase, ou le plus souvent fournit une histoire des températures constituée d'une série de plateaux. Ces problèmes de fiabilité de la solution peuvent être évités si la température initiale correspond à la température T_m de changement de phase, mais on perd alors toute la flexibilité de la méthode.

Depuis, les développements concernant la méthode aux différences finies se sont poursuivis (VOLLER et CROSS - 1971 -, BELL - 1982 -, WHITE - 1983 - ...) et des problèmes réels ont été abordés. Vous trouverez un historique plus complet dans la référence (TCP 2).

4.4.2.2. Approche éléments finis (bibliographie).

Tournons-nous à présent vers la **méthode des éléments finis**, qui constitue notre cadre de travail.

Nous distinguons 4 types de méthodes :

- a. la méthode directe,
- b. la méthode enthalpique,
- c. les méthodes cherchant à respecter l'enthalpie de transformation
- d. les méthodes où l'inconnue n'est pas la température.

a. La méthode directe.

Cette méthode consiste à introduire la chaleur spécifique *effective* dans l'équation de conduction de la chaleur, qui s'écrit en l'absence de source :

$$\partial_i (k \partial_i T) = \rho c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} \quad i = 1, 3 \quad (4.48.)$$

où k est le coefficient de conductivité isotrope du milieu, éventuellement fonction de la température. Le changement de phase se traduit alors par une augmentation importante de la capacité calorifique ρc comme le montre la figure 4.7.

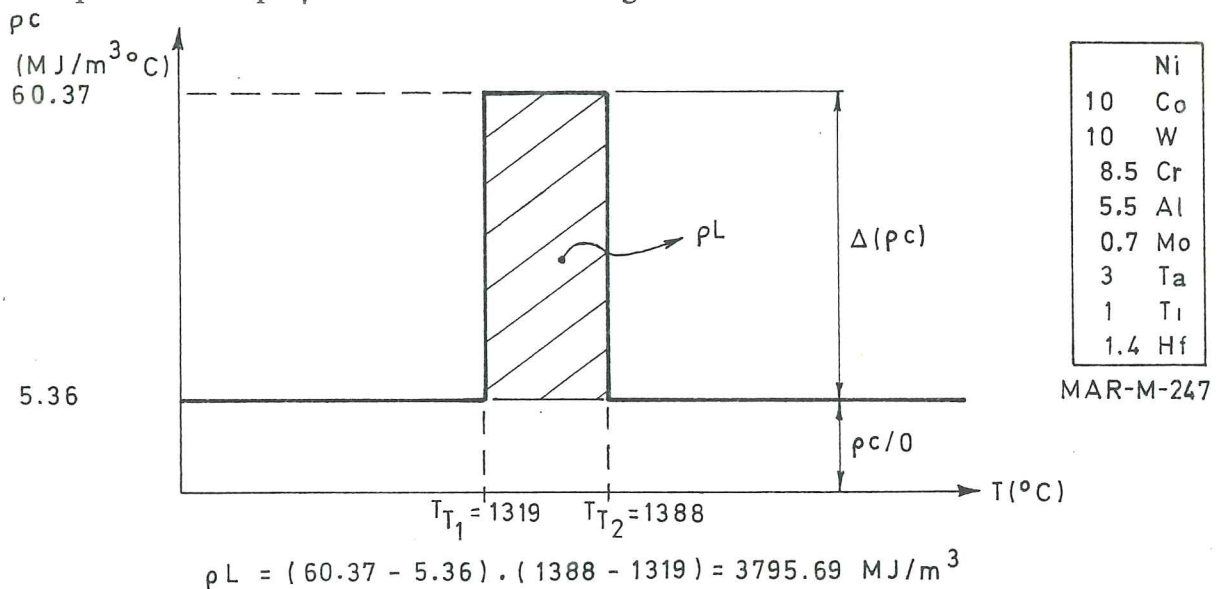


Figure 4.7.- Capacité calorifique de l'alliage MAR - M - 247.

Cette méthode très simple à introduire dans un code d'éléments finis ne peut malheureusement pas convenir pour tous les types de matériaux. En effet, lorsque la zone de température de changement de phase $[T_{T_1}, T_{T_2}]$ diminue, le pas de temps doit être fortement restreint pour assurer la sensibilité du modèle au changement de phase.

Pour les corps purs, où la transition est instantanée et pour les alliages dont la chaleur spécifique effective varie de façon complexe avec la température, une telle méthode ne peut plus être envisagée.

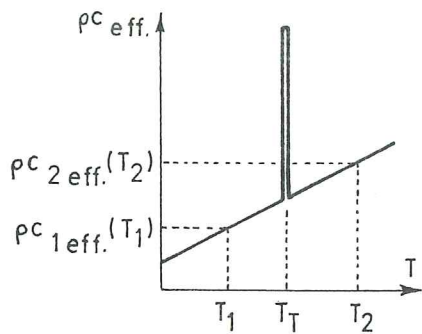


Figure 4.8.- Capacité calorifique d'un corps pur subissant une transformation

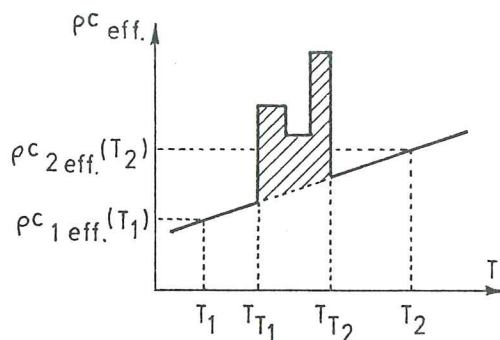


Figure 4.9.- Capacité calorifique d'un alliage subissant une transformation

b. La méthode enthalpique.

Pour résoudre ce problème, COMINI et al (TCP 8) introduisent en 1974 la **formulation enthalpique** devenue classique de nos jours. Cette méthode consiste à introduire l'enthalpie H du matériau en fonction de la température au lieu de la capacité calorifique ρc .

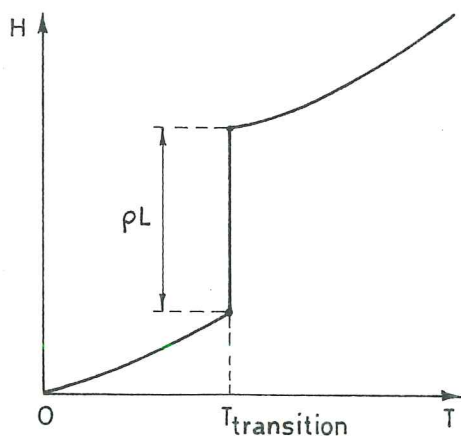


Figure 4.10.- Enthalpie d'un corps pur subissant une transformation

(L = chaleur latente de transformation).

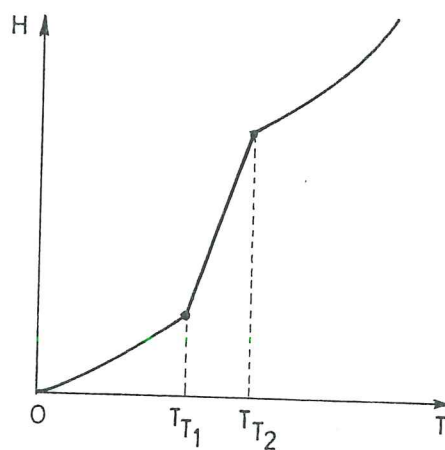


Figure 4.11.- Enthalpie d'un alliage subissant une transformation

A partir de l'enthalpie, on déduit une valeur moyenne du coefficient ρc . La façon de procéder pour obtenir cette moyenne a évolué avec le temps :