

## DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **23 octobre 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur Mohammed YAGHI**

Titre de la thèse : Modélisation par Champ de Phase de la Solidification de l'eau :  
Une Approche Hamiltonienne à Port

### Résumé



Cette thèse présente une étude sur la modélisation, la formulation par le formalisme des Systèmes Hamiltoniens à ports et la discrétisation des processus de solidification dont l'interface est supposée diffuse et est modélisée par l'approche des champs de phase. Ses travaux traitent en détail de la solidification de l'eau dans le contexte de fournir des modèles numériques adaptés à la simulation, à la conception et au contrôle de procédés de purification de l'eau. Le premier chapitre rappelle d'abord de manière synthétique les modèles physiques de systèmes biphasique et de leur interface. Il présente ensuite en détail l'approche des champs de phase pour la modélisation des interfaces diffuses ainsi que le modèle thermodynamique du système biphasique. Puis il rappelle le modèle dynamique de la solidification d'une espèce, en particulier de l'eau, comme un système de deux équations d'évolution, l'équation d'Allen-Cahn et l'équation de bilan d'énergie. Ces modèles sont basés sur les propriétés thermodynamiques employant l'entropie totale comme potentiel thermodynamique. Dans le deuxième chapitre, après le rappel de la définition de systèmes hamiltoniens dissipatifs à port frontière, on rappelle que l'on peut formuler l'équation d'Allen-Cahn ainsi que le modèle de solidification complet sous cette forme, en augmentant les variables d'état avec le gradient de la variable de champ de phase. Puis l'on montre que les relations thermodynamiques issues des données sont exprimées en termes de variables intensives et mènent à une formulation hamiltonienne à port implicite. Le dernier chapitre se concentre sur la discrétisation préservant la structure du processus de solidification en utilisant la Méthode des Éléments Finis Partitionnés. Cela garantit que le modèle discrétisé conserve des propriétés clés telles que la conservation de l'énergie et la passivité. Le chapitre développe les formulations faibles, les projections et les hamiltoniens discrets pour l'équation de la chaleur et l'équation d'Allen-Cahn, puis développe la discrétisation du modèle de solidification complet. La principale contribution de ce chapitre réside dans la méthodologie de discrétisation appliquée au modèle Port Hamiltonien

implicite du processus de solidification en utilisant l'entropie comme fonction génératrice. Globalement, cette thèse propose une approche pour la modélisation, la simulation et le contrôle des processus de solidification en utilisant le cadre Hamiltoniens à ports. Les résultats posent une base complète pour de futures recherches et développements dans les systèmes à paramètres distribués avec interfaces mobiles, en particulier pour les applications en ingénierie environnementale et chimique.

**Mots-clés :** Systèmes à paramètres distribués, Interfaces mobiles, Systèmes hamiltoniens à port, Processus de solidification, Champ de phase