



HAL
open science

Modélisation 3d par éléments finis de la macroségrégation lors de la solidification d'alliages binaires

Sylvain Gouttebroze

► **To cite this version:**

Sylvain Gouttebroze. Modélisation 3d par éléments finis de la macroségrégation lors de la solidification d'alliages binaires. Sciences de l'ingénieur [physics]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2005. Français. NNT : 2005ENMP1400 . pastel-00001885

HAL Id: pastel-00001885

<https://pastel.hal.science/pastel-00001885>

Submitted on 27 Feb 2007

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

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

REMERCIEMENTS

Au cours de cette thèse, beaucoup de personnes ont apporté leur soutien à ce travail. En premier lieu, je voudrais remercier l'Ecole des Mines de Paris pour m'avoir accueilli au sein du CEMEF. Ce travail n'aurait pas été possible sans le soutien de différents partenaires industriels que je remercie. De plus les réunions de suivi du projet ont permis d'ancrer cette thèse dans un contexte industriel.

Je voudrais aussi remercier mes deux directeurs de thèse Hervé Combeau et Michel Bellet pour leur disponibilité et leur encadrement. Je remercie aussi les membres du jury, Madame Poitault et Messieurs Gobin, Médale et Rappaz, pour avoir accepté de s'investir dans la lecture de ce manuscrit. Un grand merci aussi à Victor Fachinotti pour toutes ses explications, son aide et son amitié.

Ce travail a été facilité par tout le personnel du CEMEF qui m'a permis de travailler dans de bonnes conditions, merci donc à Marie-Françoise, Sylvie, Manu et tous les autres, ainsi que mes différents collègues de bureau.

Enfin mes plus chaleureux remerciements vont à mes amis rencontrés au cours de cette thèse : Élise, Cédric, Carole, Olivier, Audrey, Fabrice et JL. Ils m'auront permis de surmonter les difficultés rencontrées durant ces trois années. Grâce à eux cette thèse aura été une aventure passionnante et enrichissante.

Pour finir, mes pensées vont à ma famille qui m'a toujours encouragé dans mes études et à mes amis québécois Pierre-Philippe, Pierre-Célestin, Raphaël et Lison.

RÉSUMÉ

Cette thèse a pour objectif d'étudier la modélisation et la résolution numérique de la macroségrégation pendant la solidification de lingots d'alliages métalliques binaires. La macroségrégation est une hétérogénéité de la concentration en éléments d'alliages à l'échelle du lingot. Ces changements de concentration affectent de manière importante les propriétés mécaniques et chimiques du matériau. Il est donc essentiel de pouvoir prédire ces hétérogénéités pour assurer la qualité des lingots.

Après avoir décrit le contexte tant industriel que bibliographique de ce travail, nous préciserons les différents modèles implémentés dans le code de calcul THERCAST, un logiciel de solidification développé au CEMEF. La description des équations macroscopiques employées sera suivie d'une discussion sur la manière de valider notre modélisation de la macroségrégation. Nous aborderons ensuite la théorie du remaillage adaptatif et nous décrirons les éléments essentiels de la stratégie de remaillage développée dans le cadre de cette thèse. Ces modèles seront enfin appliqués à la simulation de la solidification de plusieurs lingots. La validation se fera sur un lingot de petite taille par comparaison avec des résultats expérimentaux et des simulations avec d'autres logiciels. Ensuite nous analyserons en détail les prédictions de THERCAST sur un lingot plan, un lingot 3D similaire à un lingot industriel et finalement un lingot plus petit qui nous permettra une étude numérique plus complète.

Les limitations de notre modélisation et les phénomènes qu'elle a permis de mettre en évidence seront enfin discutés et permettront de définir quelques orientations intéressantes pour poursuivre cette étude de la macroségrégation.

Mots-clés : solidification, macroségrégation, éléments finis 3D, remaillage adaptatif

ABSTRACT

This thesis aims at studying the modeling and the numerical resolution of macrosegregation during ingot solidification of binary metallic alloys. Macro-segregation is an heterogeneity of solute concentration at the ingot scale. This solute segregation modifies drastically the mechanical and chemical properties. So it is essential to predict such heterogeneities to ensure the product quality.

After describing the industrial context and a review of the current research in this field, the models implemented in THERCAST (the solidification software developed at CEMEF) are presented. The set of macroscopic equations is followed by a discussion on the validation of macrosegregation software. Then, the theory of remeshing and our adaptive anisotropic remeshing strategy are explained. These developments are applied to the simulation of different ingots. The first one, a small ingot, is used to validate our code by comparison with experimental results and numerical results from other codes. Then a deeper analysis of THERCAST simulations is made on a large 2D ingot, a 3D ingot similar to an industrial case and an intermediate ingot for more complete numerical studies.

The models limitations and the phenomena identified during this study are finally discussed and will permit to define interesting orientations to continue this work on macrosegregation.

Keywords: solidification, macrosegregation, 3D finite elements, adaptive remeshing

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|--|-----|
| Remerciements..... | i |
| Résumé..... | iii |
| Abstract..... | iii |
| Liste des symboles | vii |
| CHAPITRE 1 Introduction générale de la fonderie et de la macroségrégation..... | 1 |
| 1.1 La fonderie et la coulée de lingots..... | 2 |
| 1.2 Les défauts et la macroségrégation sur les lingots industriels..... | 6 |
| 1.3 Simulation de la macroségrégation, état de la recherche..... | 10 |
| 1.4 Contexte et objectifs de l'étude | 30 |
| CHAPITRE 2 Modélisation et résolution numérique..... | 35 |
| 2.1 Problématique de la validation | 36 |
| 2.2 Modélisation de la solidification : principales hypothèses..... | 44 |
| 2.3 Résolution de la mécanique..... | 45 |
| 2.4 Résolution de la thermique..... | 59 |
| 2.5 Résolution de la ségrégation..... | 70 |
| 2.6 Résolution couplée des équations..... | 73 |
| CHAPITRE 3 Adaptation de maillage pour la macroségrégation..... | 75 |
| 3.1 Définitions générales concernant les maillages..... | 76 |
| 3.2 Problématique du remaillage en solidification avec macroségrégation | 83 |
| 3.3 Génération d'une métrique adaptée..... | 87 |
| 3.4 Stratégie de remaillage | 106 |
| 3.5 Amélioration de la stratégie de remaillage..... | 110 |
| 3.6 Paramétrisation automatique du remaillage | 115 |
| 3.7 Application de la stratégie de remaillage | 126 |
| CHAPITRE 4 Simulation de la macroségrégation sur différents lingots | 129 |
| 4.1 Application aux cas tests expérimentaux de Hebditch-Hunt..... | 130 |
| 4.2 Application de l'approche pseudo-2D sur un lingot Fe-0.38%C | 147 |
| 4.3 Application sur un lingot benchmark 3D pour un alliage Fe-0.38%C | 158 |
| 4.4 Analyse de la solidification sur un lingot 3D cylindrique avec moule..... | 170 |
| CHAPITRE 5 Conclusions et perspectives..... | 181 |
| 5.1 Conclusions principales..... | 182 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 5.2 | Prédiction de la thermique..... | 183 |
| 5.3 | Evolution de l'écoulement..... | 184 |
| 5.4 | Macroségrégation et remaillage..... | 185 |
| 5.5 | Perspectives | 186 |
| | Annexe A : Analyse du choc thermique en début de solidification..... | 193 |
| | Annexe B : Analyse détaillée du lingot benchmark et comparaison de résultats après 180s de solidification..... | 207 |
| | Annexe C : Etude de l'écoulement sur le lingot intermédiaire pour différentes configurations de maillage et de géométrie | 217 |
| | Annexe D : Analyse du début de solidification du lingot lsmr (Lingot Simplifié avec Moule et Réfractaire)..... | 233 |
| | Références..... | 245 |

LISTE DES SYMBOLES

Alphabet latin

| | |
|-----------|---|
| c | Concentration moyenne (wt%, pourcentage massique) |
| c_p | Capacité calorifique massique ($J\ kg^{-1}\ K^{-1}$) |
| D | Coefficient de diffusion ($m^2\ s^{-1}$) |
| DAS | Espacement interdendritique (Dendrite Arm Spacing) |
| dV_z | Variation locale moyennée de la vitesse ($m\ s^{-1}$) |
| f | Fraction massique (-) |
| g | Fraction volumique (-) |
| h | Enthalpie massique ($J\ kg^{-1}$) |
| h | Coefficient d'échange thermique ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$) |
| h | Taille de maille (m) |
| H | Enthalpie volumique ($J\ m^{-3}$) |
| k | Constante du modèle de Kozeny-Carman |
| K | Perméabilité (m^2) |
| K | Simplexe (tétraèdre en 3D) |
| k_p | Coefficient de partage (-) |
| m | Pente de la courbe de liquidus ($K\ wt\%^{-1}$) |
| M | Métrieque |
| N | Fonction d'interpolation d'un élément |
| P | Pression (Pa) |
| \dot{Q} | Flux de chaleur ($W\ s^{-1}$) |
| S_0 | Surface de l'interface solide-liquide par unité de volume (m^2) |
| T | Température (K) |
| V | Vitesse ($m\ s^{-1}$) |
| w | Fonction test pour la forme faible de l'équation mécanique |

Alphabet grec

| | |
|--------------------|---|
| α | Diffusivité thermique ($m^2\ s^{-1}$) |
| β_c | Coefficient de dilatation solutale ($wt\%^{-1}$) |
| β_T | Coefficient de dilatation thermique (K^{-1}) |
| Δh_{ls} | Chaleur latente de fusion massique ($J\ kg^{-1}$) |
| δ | Épaisseur de couche limite (m) |
| ε | Coefficient de diffusion ($m^2\ s^{-1}$) |
| κ | Conductivité thermique ($W\ m^{-1}\ K^{-1}$) |
| λ_1 | Espacement interdendritique primaire (m) |
| λ_2 | Espacement interdendritique secondaire (m) |
| μ | Viscosité dynamique (Pa s) |
| Ω | Domaine spatial |
| $\partial\Omega_r$ | Surface refroidie du domaine Ω |
| ρ | masse volumique ($kg\ m^{-3}$) |
| τ_h | Maillage |
| τ_{LSIC} | Coefficient de stabilisation LSIC (-) |

| | |
|----------------------|---------------------------------------|
| τ_{PSPG} | Coefficient de stabilisation PSPG (-) |
| τ_r | Triangulation |
| τ_{SUPG} | Coefficient de stabilisation SUPG (-) |
| φ | Fonction test |

Indices

| | |
|------|--|
| 0 | Valeur de référence ou valeur initiale |
| adv | Valeur relative à la convection |
| b | Valeur reliée à la bulle de l'élément P1+/P1 |
| c | Solutal |
| diff | Valeur relative à la diffusion |
| elt | Valeur pour l'élément (ex : au centre de l'élément pour la vitesse) |
| eut | Valeur à l'eutectique |
| ext | Valeur pour une partie extérieure au domaine (ex : température de l'air) |
| f | Fusion |
| h | Solution éléments finis |
| l | Liquide |
| liq | Valeur au liquidus |
| ls | Transformation liquide-solide |
| m | Valeur moyenne du mélange solide-liquide |
| s | Solide |
| sol | Valeur au solidus |
| T | Thermique |
| ts | Choc thermique (thermal shock) |

Exposants

| | |
|---------------|---|
| 0 | Valeur au pas de temps précédent |
| eff | Valeur effective |
| t | Valeur au temps t soit à l'incrément précédent |
| t+ Δt | Valeur au temps t+ Δt soit à l'incrément en cours de calcul |
| * | Valeur à l'interface solide/liquide |

Chapitre 1 Introduction générale de la fonderie et de la macroségrégation

| | | |
|------------|--|----|
| Chapitre 1 | Introduction générale de la fonderie et de la macroségrégation..... | 1 |
| 1.1. | La fonderie et la coulée de lingots | 2 |
| 1.1.1. | Présentation du procédé de fonderie | 2 |
| 1.1.2. | Domaines d'utilisation de la fonderie | 3 |
| 1.1.3. | Coulée de lingots | 4 |
| 1.2. | Les défauts et la macroségrégation sur les lingots industriels | 6 |
| 1.2.1. | Présentation des différents défauts | 6 |
| 1.2.2. | Exemple d'un cas industriel : lingot O3t3..... | 7 |
| 1.3. | Simulation de la macroségrégation, état de la recherche | 10 |
| 1.3.1. | Présentation de la solidification dendritique colonnaire d'un alliage binaire .. | 10 |
| 1.3.2. | Les modèles macroscopiques | 12 |
| 1.3.3. | Les paramètres des modèles | 17 |
| 1.3.4. | Modèles de couplage T-g _s -c ₁ | 24 |
| 1.3.5. | Etat de l'art de la simulation et applications | 28 |
| 1.4. | Contexte et objectifs de l'étude | 30 |
| 1.4.1. | Contexte de l'étude et partenaires industriels | 30 |
| 1.4.2. | Objectifs de l'étude | 32 |

1.1. La fonderie et la coulée de lingots

1.1.1. Présentation du procédé de fonderie

« La fonderie peut apparaître comme une technique de fabrication très simple, universellement connue, utilisée depuis des millénaires et qui consiste à « fondre un alliage et le couler dans un moule reproduisant la forme de la pièce à obtenir ». Le processus industriel se révèle beaucoup plus complexe; il s'agit en effet de fabriquer des pièces répondant à des critères bien définis, avec des cahiers des charges rigoureux, dans une gamme étendue d'alliages différents à qui l'on demande des performances de plus en plus élevées et fiables, dans des gammes de masse allant de quelques grammes à plusieurs dizaines ou centaines de tonnes, avec des précisions dimensionnelles toujours serrées, des états de surface les meilleurs possibles, des formes complexes pour intégrer le maximum de fonctions et avec des cadences de production allant de la pièce unitaire à plusieurs milliers de pièces par jour dans des conditions les plus économiques possibles. »

P. Cuénin, *Technique de fabrication – Généralités*, Technique de l'ingénieur M3-510

Cette rapide présentation de la fonderie montre bien l'étendue des applications et aussi la complexité d'une étude scientifique de ce procédé très général. Ainsi, dans cette introduction, nous essayerons, en décrivant le procédé et les phénomènes physiques entrant en jeu, de mieux cerner la spécificité de la coulée de lingot dans le domaine de la fonderie.

Descriptif d'un procédé de fonderie

Le procédé classique de fonderie est constitué de cinq étapes principales :

- fabrication des parties du moule
- élaboration des alliages dans les appareils de fusion
- coulée du métal dans les moules
- refroidissement de la pièce dans le moule après coulée
- refroidissement final de la pièce

Chacune de ces étapes est un domaine d'étude à part entière avec ses problèmes techniques et ses contraintes économiques (très importantes dans ce domaine hautement concurrentiel).

La Figure 1-1 montre l'ensemble des étapes intervenant dans le procédé, en montrant en particulier les récupérations de matière intervenant tout au long du procédé ainsi que les étapes de finition.

Dans cette étude, seulement une étape du procédé sera traitée. En effet, nous nous limiterons à l'analyse de l'étape de refroidissement de la pièce dans le moule. Ainsi l'étape de remplissage ne sera pas étudiée et l'on considérera que le moule est initialement plein de métal liquide à une température homogène. Toutefois cet état initial peut aussi provenir des résultats d'un logiciel de remplissage de moules.

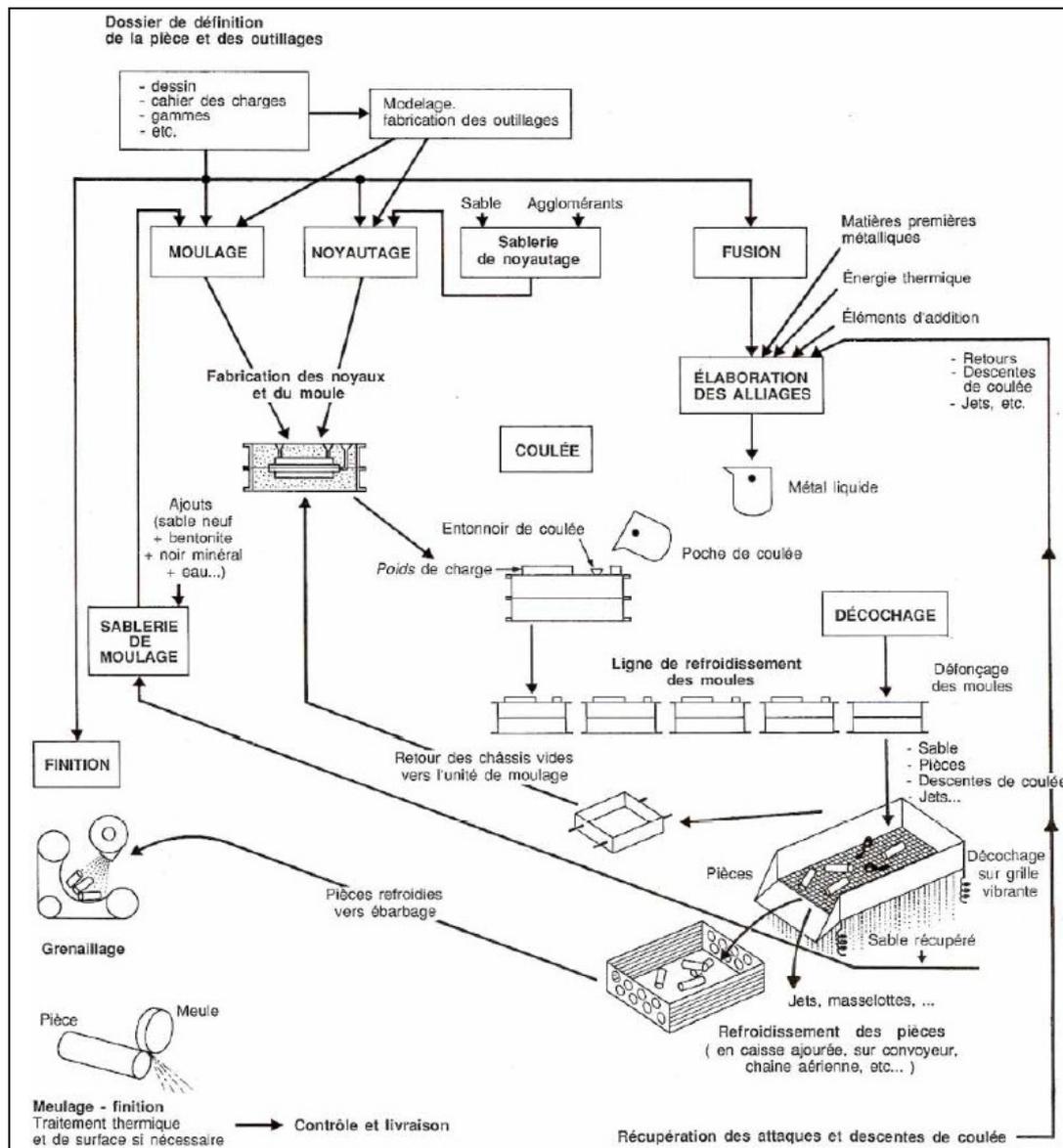
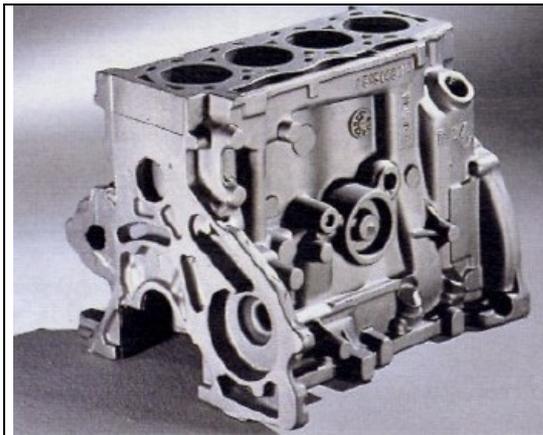


Figure 1-1 : Schéma de principe de la fabrication de pièces de fonderie. P. Cuénin, *Technique de fabrication – Généralités, Technique de l'ingénieur M3-510*

1.1.2. Domaines d'utilisation de la fonderie

La polyvalence du procédé de fonderie a conduit à un grand nombre d'applications que nous diviserons en deux catégories : la fabrication de pièces finies et la production de produits semi-finis. On peut ranger dans la première catégorie l'ensemble des applications conduisant à la production de pièces complexes ne nécessitant plus que des étapes de finition ou d'assemblage. La deuxième catégorie regroupe à l'inverse soit la coulée de pièce requérant une mise en forme très importante soit la coulée de lingots pour obtenir des nuances d'alliages très particulières.

La Figure 1-2 illustre deux pièces coulées de forme assez complexe et à des échelles complètement différentes.



Carter de cylindre en fonte (Fonderie du Poitou)



Cage de laminoir en acier (Industeel Creusot)

Figure 1-2 : Illustration de pièces coulées. P. Cuénin, *Industrie de la fonderie, Technique de l'ingénieur M3-500*

Pour la première catégorie la difficulté provient principalement de l'étape de remplissage, étant donné la complexité de la forme de la pièce. D'autre part, les pièces ainsi créées sont généralement de petite taille et peu massives. A contrario, les produits de la deuxième catégorie sont généralement massifs voire très massifs dans le cas des lingots, les processus physiques entrant en jeu au cours de la solidification sont alors d'un autre ordre. La convection dans le bain liquide devient importante et la solidification complète est longue, ce qui conduit à des transports plus importants et à un changement des processus de solidification et donc à la formation de structures cristallines différentes.

Choix de l'étude de la coulée de lingots

Cette différence fondamentale des processus de solidification entre les pièces complexes et les pièces massives comme les lingots, nous conduit donc à choisir la solidification en lingots pour notre étude. En effet le fait de négliger l'étape de remplissage dans le cas des pièces complexes est totalement inacceptable alors que dans le cas des lingots, on peut considérer qu'il s'agit d'une première approximation négligeant la solidification de la première peau intervenant lors du remplissage des lingots. Toutefois dans certains cas lors du remplissage de lingot une portion supérieure à 20% de la masse peut se solidifier en fonction de la vitesse de remplissage. Si la formation de cette couche solidifiée est importante à simuler, ce cas est moins critique que pour le remplissage de formes complexes et notre approximation reste encore utile.

1.1.3. Coulée de lingots

La coulée en lingots est une application assez particulière de la fonderie car si historiquement elle était utilisée pour l'obtention de la majorité des alliages, elle a depuis longtemps été supplantée par la coulée continue qui présente des avantages d'automatisation, de qualité des produits et surtout de productivité très importants. Toutefois la mise en place d'une production par coulée continue nécessite des investissements très importants qui ne sont économiquement viables que dans le cas de production de tonnage très important. Ainsi pour les marchés plus restreints le choix de la coulée en lingots peut être économiquement avantageux.

Les éléments de moules présents lors de la coulée d'un lingot sont schématisés sur la Figure 1-3. La lingotière est la partie principale qui permettra le refroidissement du métal liquide. Elle repose éventuellement sur une base plus ou moins isolante selon les besoins. L'alimentation en liquide peut aussi être réalisée par la base dans le cas de coulée en source. En effet deux types généraux de remplissage sont adoptés dans la coulée de lingots : la coulée en source et la coulée au jet (ou en chute) dont une variante est la coulée au panier. Dans la coulée en source, le remplissage est effectué par le bas à travers des canaux d'alimentation. Dans la coulée en panier, le remplissage est effectué en vidant un baquet de métal liquide guidé éventuellement par une quenouille qui permet de régulariser la pression ferrostatique, donc la vitesse, et aussi d'assurer le centrage du jet. Les avantages et les inconvénients de ces deux techniques sont résumés dans le Tableau 1-1.

Un autre élément essentiel dans le design d'un lingot est le choix du masselottage. En effet la partie supérieure du lingot, appelée masselotte, va servir à conserver une poche de métal liquide qui permettra d'alimenter le reste du lingot lors de la solidification. D'autre part, étant donné que cette zone est bien isolée, elle se solidifiera en dernier et concentrera donc la majorité de la macroségrégation positive, par l'enrichissement progressif du bain liquide comme nous le verrons par la suite. C'est aussi dans cette zone que se concentrent des défauts tels que porosité et retassure.

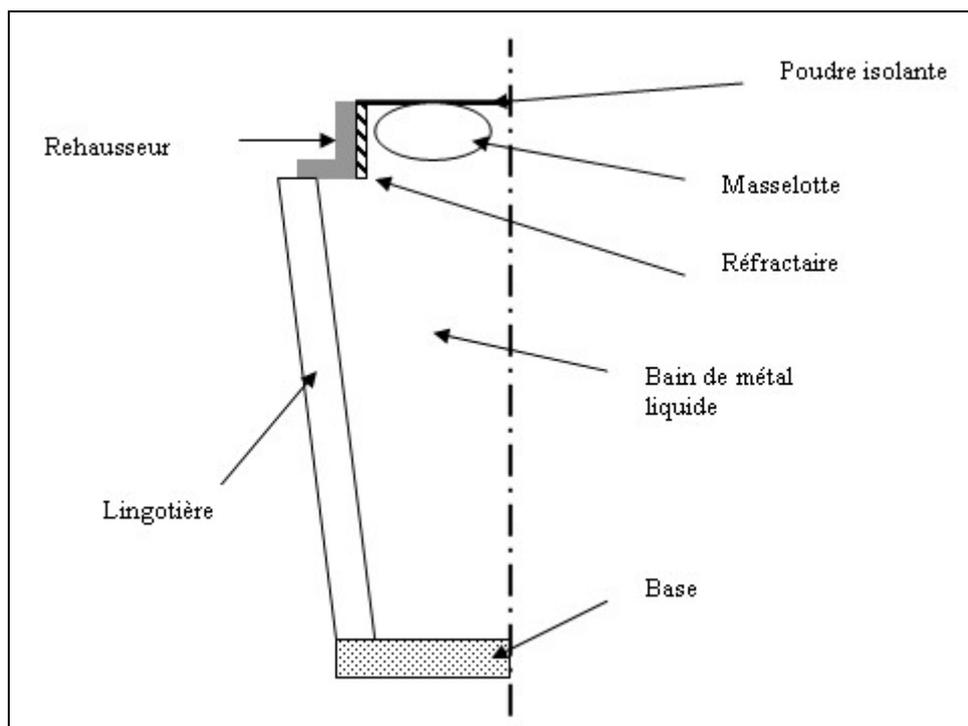


Figure 1-3 : Schéma général d'un lingot et des moules

Tableau 1-1 : Avantages et inconvénients de la coulée au jet et de la coulée en source. J. Duflot, *Technique de fabrication – Lingots. Lingotières, Technique de l'ingénieur M7-800*

| Coulée au jet | Coulée en source |
|--|---|
| Avantages | |
| <ul style="list-style-type: none"> ● Température moins élevée. ● Moins d'attaques des réfractaires. ● Réactions de désoxydation plus complètes dans les effervescents. ● Moins de complications techniques. ● Moins chère (main d'œuvre, réfractaire, pertes de métal dans la mère et les canaux, température au four). ● Meilleure mise au mille. | <ul style="list-style-type: none"> ● Diminue la vitesse de montée en lingotière, d'où des soufflures d'effervescence plus éloignées de la peau. ● Moins de risques de criques. ● Meilleur état de surface. ● Moins sévère pour les lingotières. ● Permet la coulée simultanée de nombreux petits lingots ou la diminution du temps total de coulée. |
| Inconvénients | |
| <ul style="list-style-type: none"> ● Éclaboussures en pied donnant des surfaces moins belles. ● Brûlures des lingotières étroites par mauvais centrage. ● Attaque et érosion des bases avec recarburation possible par le carbone de la fonte de la base. ● Collage sur les bases, nettoyage des produits plus important (criques et défauts de pied) qui peut varier du simple au double. | <ul style="list-style-type: none"> ● Températures plus élevées au four (+20C). ● Plus chère (main d'œuvre, réfractaire, métal perdu dans la mère et les canaux). ● Inclusions supplémentaires (attaques des réfractaires et emprisonnement des croûtes noyées, d'où davantage d'inclusions silicatées en pied). ● Soufflures (humidité des canaux, condensation sur les lingotières froides). |

1.2. Les défauts et la macroségrégation sur les lingots industriels

La qualité en fonderie est un élément essentiel dans la coulée de lingots. Toute erreur sur ces pièces pouvant peser plusieurs dizaines de tonnes conduit à des pertes très importantes. En effet les dépenses de non-qualité, qui regroupent toutes les non-conformités de fabrication (moules cassés ou déformés, pièces non conformes, rebuts de pièces, masselottage ...), peuvent atteindre des pourcentages significatifs du chiffre d'affaire (jusqu'à 5 à 6%). La qualité est aussi une garantie de la satisfaction du client qui est essentielle dans ce secteur très concurrentiel. Il est donc très important de déterminer l'origine des défauts et de contrôler au maximum leur apparition et leur gravité.

1.2.1. Présentation des différents défauts

En dehors de leurs propriétés physiques (densité, résistance, dureté, ...) les alliages moulés présentent des propriétés de fonderie qu'il est important de connaître pour améliorer la qualité des produits fabriqués. Ces propriétés sont :

- la coulabilité : propriété à remplir complètement l'empreinte du moule

- la formation de la structure
- le retrait : différence de dimensions entre l’empreinte du moule et la pièce solidifiée
- les retassures : creux à la surface de la pièce ou cavités à l’intérieur de la pièce
- les ségrégations : hétérogénéité chimique entre différents points de la pièce
- les criques : ruptures ou déchirures du métal
- les soufflures : cavités ou trous résultant de la présence de bulles dans l’alliage pendant la solidification

Les cinq derniers points représentent des sources de défaut pour la pièce finale. Parmi eux, la ségrégation tient une place particulière du fait qu’elle se produit pour des raisons diverses qui conduisent à des types de ségrégations variés aussi bien en amplitude qu’en échelle. Ce type de défaut pouvant apparaître à trois ordres de grandeurs différents : aux échelles microscopiques, mésoscopiques et macroscopiques.

D’autre part, la ségrégation induit aussi des modifications très importantes des propriétés mécaniques et chimiques de l’alliage. Il est donc essentiel de contrôler ce phénomène. Il est cependant particulièrement complexe et il est difficile de prédire les effets de modifications des paramètres du process comme la hauteur de la masselotte, la forme du moule, etc. La simulation numérique permet alors d’étudier plus aisément et à moindre coût de tel changement de manière à optimiser le process. Toutefois les modèles actuels ne permettent pas de simuler l’ensemble des phénomènes se produisant au cours de la solidification et donc des choix doivent être faits pour se concentrer sur la simulation de certains aspects de la solidification. Nous verrons par la suite que dans cette étude nous nous limiterons à l’analyse de la solidification dendritique colonnaire.

1.2.2. Exemple d’un cas industriel : lingot O3t3

Pour illustrer le type de pièces étudiées, prenons l’exemple d’un lingot instrumenté de la société Aubert et Duval, et analysé par Hans *et al.* [HANS, 2002]. Une partie des capteurs installés sur la pièce est présentée sur la Figure 1-4.



Figure 1-4 : Détail de l’instrumentation du lingot O3t3 de Aubert et Duval [HANS, 2002]

Cette courte étude permet de montrer les limites du modèle que nous allons utiliser par la suite ainsi par exemple notre modélisation ne prendra pas en compte la microstructure et utilisera une valeur constante pour l'espaceur interdendritique alors que l'on observe des variations importantes de celui-ci comme le montre la Figure 1-5.

D'autre part, l'utilisation d'un modèle de macroségrégation, très similaire à celui présenté ici, dans le code de calcul volumes finis 2D SOLID, montre des similitudes mais aussi des écarts dans les courbes de ségrégation (Figure 1-6). En particulier l'effet de la zone équiaxe qui n'est pas simulée est très important dans la zone de ségrégation négative située au centre du lingot dans sa partie inférieure.

A travers cet exemple, nous pouvons identifier certains points importants. En premier lieu, la macroségrégation positive est largement concentrée dans la masselotte en haut de la pièce. Globalement la variation maximale de la concentration relative est de l'ordre de 35%. Avec une telle variation de concentration les propriétés du matériau sont fortement modifiées et la masselotte a donc pour but de concentrer ces fortes variations en dehors de la zone utile de la pièce. Cette portion sera en effet coupée et refondue pour être réutilisée par la suite. L'autre caractéristique importante est la variation de la concentration le long de l'axe de la pièce. Cette zone subit un enrichissement ou un appauvrissement selon que l'on considère la simulation ou l'expérience.

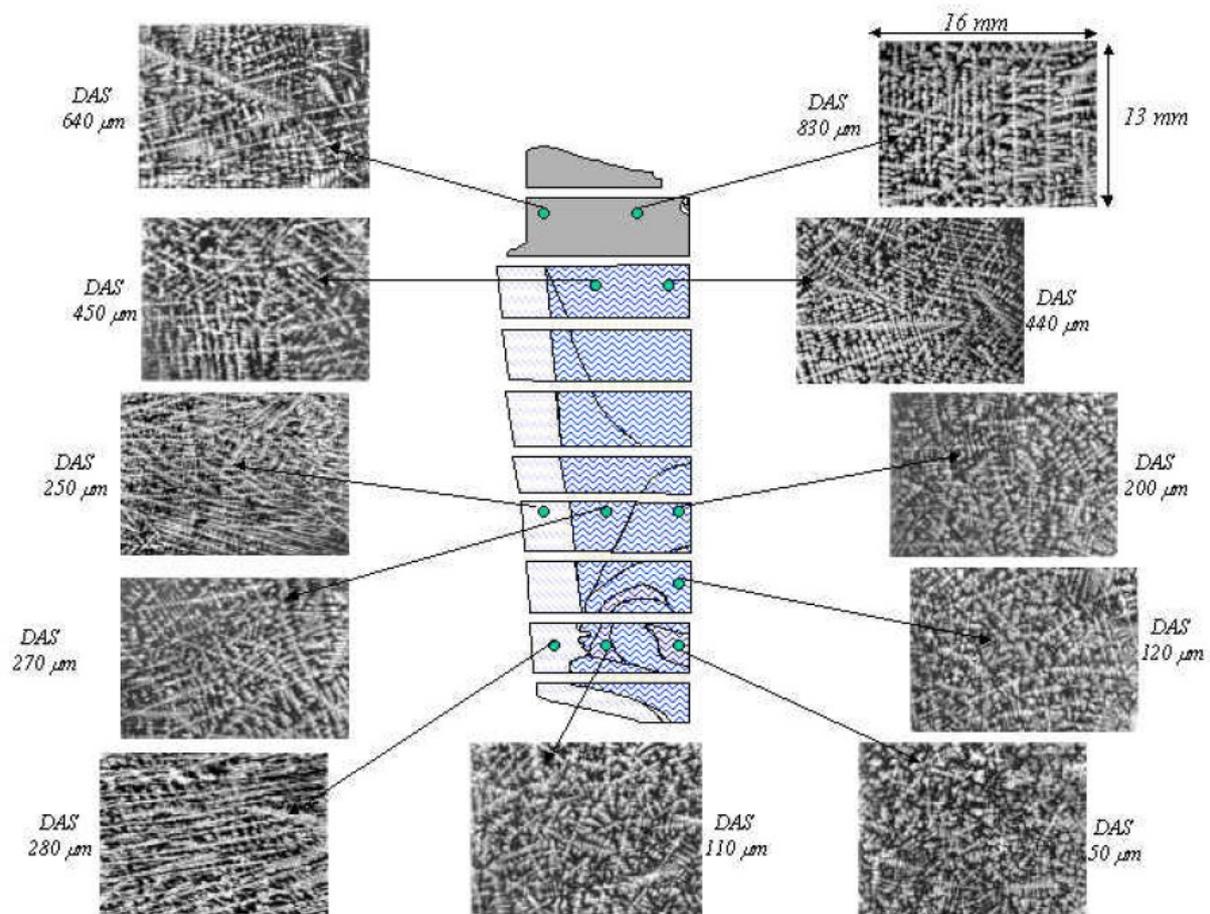


Figure 1-5 : Microstructure dans le lingot et espaceur interdendritique (zone blanche solidification colonnaire, zone bleue solidification équiaxe) [HANS, 2002]

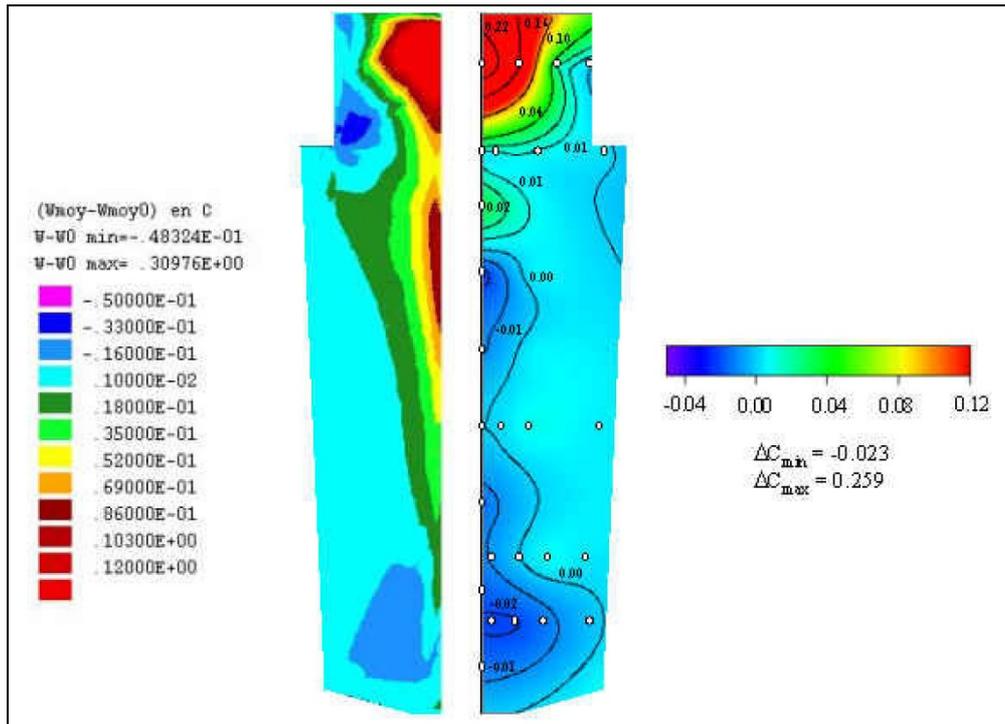


Figure 1-6 : Distribution de la macroségrégation en carbone pour le lingot O3t3 (à gauche SOLID, à droite résultats expérimentaux interpolés) [HANS, 2002]

L'aspect axisymétrique renforçant l'écoulement au centre le calcul sera donc assez sensible dans cette zone. En particulier en 3D où l'on simule en général des sections de la pièce, la représentation d'une zone angulaire comme celle-ci pourra poser des problèmes.

En conclusion, cet exemple de lingot instrumenté a permis de montrer la complexité du phénomène à partir de l'analyse des microstructures ce qui affecte de manière importante la macroségrégation. Ainsi notre modèle ne pourra sans doute pas reproduire les mesures expérimentales sur les lingots mais il a pour but d'être un outil de compréhension de la solidification et aussi d'analyse pour l'optimisation de certains paramètres. Cette étude n'est en effet qu'un premier pas vers une meilleure modélisation de la solidification et de la macroségrégation mais d'importantes étapes resteront encore à franchir.

L'intérêt d'un code de calcul 3D est aussi notable dans ce type de simulation puisque pour réaliser le calcul avec SOLID, il a été nécessaire de rendre la pièce octogonale axisymétrique ce qui conduit à certaines approximations.

Cet exemple d'étude de solidification d'un lingot industriel montre bien l'intérêt de la simulation pour les fondeurs. Ainsi le développement d'un outil de simulation permettant à terme de prédire à la fois les déformations mécaniques et aussi la macroségrégation est particulièrement pertinent dans le contexte de la fonderie de lingots massifs, ce qui constitue l'objectif principal de cette étude. Ce champ d'étude a d'ailleurs été largement abordé dans la littérature scientifique ces dernières années.

1.3. Simulation de la macroségrégation, état de la recherche

Pour finir l'introduction de la macroségrégation, nous allons faire un tour d'horizon des différents modèles qui sont utilisés et de quelques points clés de ce type de simulation. La bibliographie sur la solidification des métaux est très riche et beaucoup d'aspects ont été étudiés. Au cours de cette description générale nous essayerons de nous limiter aux aspects les plus importants pour la simulation de la macroségrégation.

1.3.1. Présentation de la solidification dendritique colonnaire d'un alliage binaire

Lors de la solidification d'un alliage, le changement de phase se produit dans un intervalle de température. Sur certaines isothermes, la phase solide et la phase liquide sont donc présentes à l'échelle macroscopique, cette nouvelle zone est appelée zone pâteuse du fait que ce milieu ne se comporte ni comme un solide ni comme un liquide.

Présentation de la zone pâteuse et formation de structure

Cette zone pâteuse est généralement représentée comme un milieu poreux car la complexité des structures qui s'y forment ne permet généralement pas une représentation directe. Cela est tout au moins le cas pour les alliages métalliques qui en général forment des structures dendritiques. A partir de germes à la paroi, on voit alors croître des formations dendritiques à la forme très complexes avec des bras secondaires et tertiaires. La Figure 1-7 illustre ce type structure. On appelle ces formations de la solidification dendritique colonnaire du fait que la croissance globale des dendrites est quasiment unidirectionnelle par opposition aux grains équiaxes qui ont plusieurs directions de croissance (cf. Figure 1-7). Généralement les deux types de solidification existent simultanément mais pour des raisons de simplicité ce projet ne traite que de la croissance colonnaire.

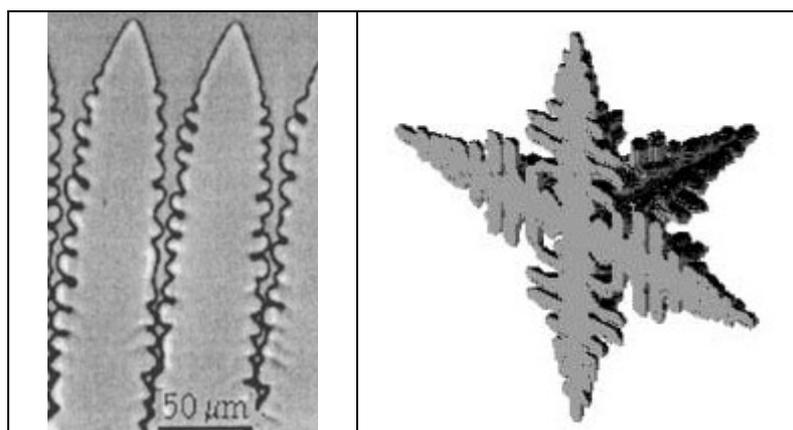


Figure 1-7 : Illustration de croissance de dendrite colonnaire (à gauche [AKAMATSU, 1995]) et équiaxe (à droite, résultat de simulation [BROWN, 2002])

Etant donné la forme de ces dendrites, l'écoulement à travers une telle structure est nécessairement difficile à simuler directement. L'approximation par un milieu poreux permet

de séparer l'aspect microscopique et macroscopique par l'ajout d'un terme de Darcy dans les équations de conservation de la quantité de mouvement. La valeur de la perméabilité ainsi introduite peut être déterminée suivant plusieurs modèles comme nous le verrons par la suite. Cependant on peut déjà remarquer que sa valeur diminue très rapidement avec la fraction de liquide à mesure que la solidification bloque l'écoulement qui devient de plus en plus tortueux et est donc fortement freiné. Cette structure conduit donc à un écoulement qui ne sera effectif que dans les premières épaisseurs de la zone pâteuse. D'autre part, cette structure permet aussi une grande surface de contact entre le liquide et le solide.

Solidification et ségrégation

L'interface entre les deux phases est supposée à l'équilibre thermodynamique et on utilise donc le diagramme de phase pour prédire les proportions de phase et les concentrations correspondantes. Deux approches sont employées la première consiste à linéariser les courbes pour simplifier le problème et permettre un calcul aisé des variables, la deuxième introduit généralement une base de données externes qui permet de déduire directement les valeurs. Cependant cette méthode nécessite des bases de données coûteuses mais elle est plus précise et permet aussi d'étudier directement les alliages multi-constitués. Notre étude étant centrée sur les alliages binaires, nous avons choisi la méthode la plus simple et la plus directe par les diagrammes de phase linéarisés. L'exemple présenté à la Figure 1-8 donne une première compréhension de la ségrégation qui se produit lors de la solidification. En effet on voit qu'à une température donnée un alliage à la composition initiale c voit se former un solide de composition c_s très inférieur à c alors que la concentration dans le liquide augmente par le rejet du soluté. Ainsi à l'interface se forme une ségrégation du soluté entre la phase liquide et la phase solide. Ce phénomène qui se produit à l'échelle microscopique à la surface de la dendrite va conduire à la macroségrégation à l'échelle du lingot. Ce changement d'échelle est principalement du dans le cas des lingots à l'entraînement par le fluide de ce surplus de soluté dans le reste du domaine. En effet un écoulement important se forme dans le lingot lors de la solidification. La ségrégation peut aussi être produite par d'autres phénomènes comme une déformation mécanique, le mouvement des grains, ...

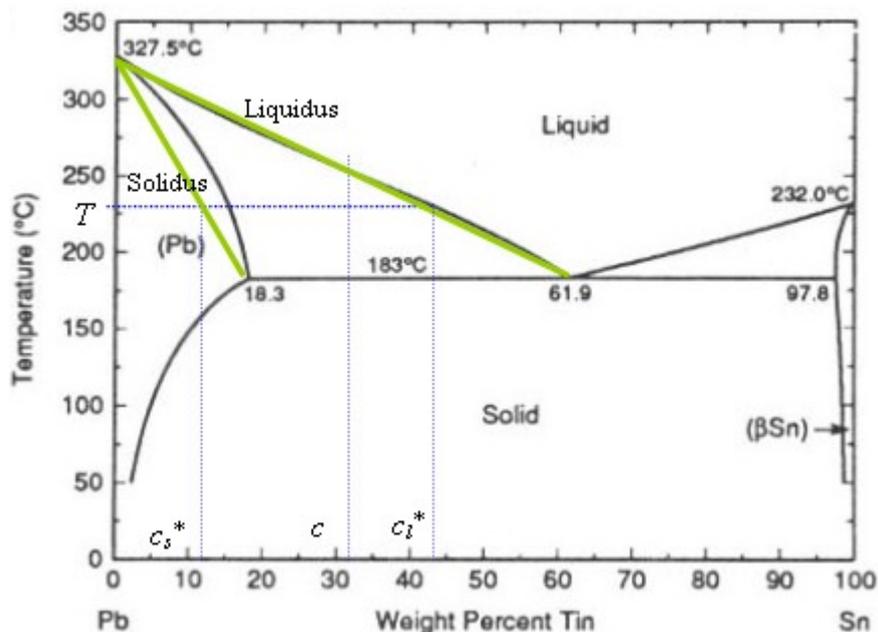


Figure 1-8 : Diagramme de phase de l'alliage plomb - étain (linéarisation en vert)

Convection thermo-solutale

La formation de cet écoulement est produite par deux forces différentes. La première est due au refroidissement qui engendre des gradients thermiques dans la phase liquide générant de la convection naturelle car la densité augmente lorsque la température diminue. La deuxième force est produite par la ségrégation. En effet la densité du soluté est différente de la densité de la base de l'alliage. Les zones enrichies seront donc soit plus denses soit moins denses. Cet effet est principalement sensible dans la zone où les gradients thermiques sont faibles par rapport aux gradients solutaux. La Figure 1-9 montre ainsi l'inversion de l'écoulement qui peut se produire suivant la densité du soluté. Ainsi la résolution de la macroségrégation impose un couplage avec la résolution de la mécanique.

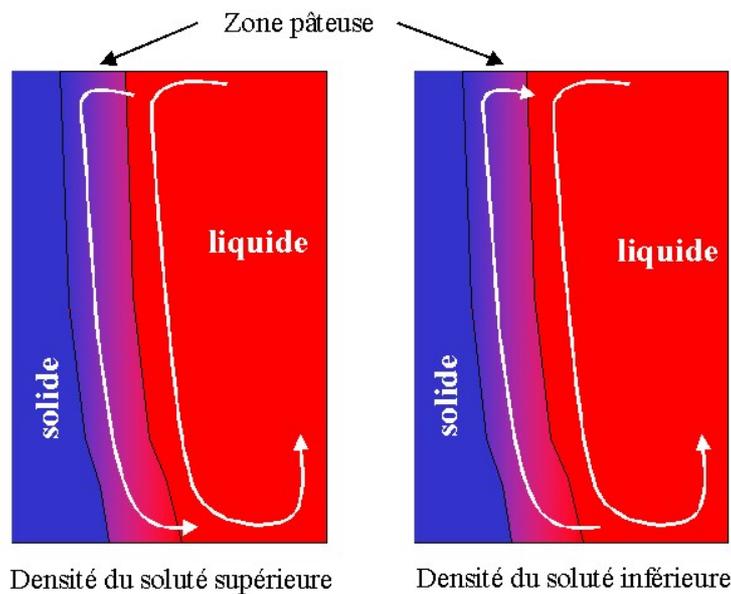


Figure 1-9 : Ecoulement thermo-solutal durant la solidification, effet de la densité du soluté

1.3.2. Les modèles macroscopiques

La modélisation de la solidification s'effectue principalement à l'échelle macroscopique, au moins pour avoir une idée générale du processus. Les premières études se sont naturellement portées sur la solidification des substances pures avec une interface plane. Le traitement dans les zones liquide et solide peut alors être différencié et la résolution se faisait dans chacun des milieux avec un couplage à l'interface [JURIC, 1996]. Au cours du calcul, il est donc nécessaire de connaître précisément la position et la forme de l'interface. Lorsque l'on est ensuite passé aux alliages binaires en particulier au cas de solidification dendritique, il est devenu irréaliste de chercher à connaître constamment la forme et la position de l'interface à l'échelle macroscopique, qui est extrêmement complexe. C'est pourquoi des modèles macroscopiques s'appliquant à l'ensemble du domaine ont commencé à être développés en particulier par Bennon et Incropera [BENNON, 1987] ou Voller *et al.* [VOLLER, 1989]. Ce type de modèle est devenu le standard de la modélisation de la solidification, il est scindé en deux branches, d'une part le modèle continuum initialement développé par Bennon et Incropera, basé sur les lois de mélange et d'autre part le modèle moyenné développé par Ni et Beckermann [NI, 1991], basé sur la technique des prises de

moyenne volumique. Ces deux méthodes vont être présentées ainsi que les hypothèses couramment utilisées.

Modèle basé sur la loi de mélange

Les équations sont établies à partir des principes suivants de la théorie des mélanges :

- les composants du mélange peuvent être vus comme des sous-systèmes, si les interactions sont traitées correctement.
- toutes les propriétés du mélange sont des conséquences mathématiques des propriétés de ses composants.
- le mélange est gouverné par des équations similaires à celles gouvernant les composants individuellement.

Ces principes supposent une substance inerte ce qui n'est pas le cas dans les changements de phase, il est donc nécessaire de traiter spécifiquement ce cas ce qui conduit à ajouter des relations supplémentaires. Dans leurs premiers articles Bennon et Incropera ont introduit des termes de manière plus intuitive que rigoureuse ce qui les a conduit par la suite à devoir préciser certains points dans un article [PRESCOTT, 1991]. C'est un des principaux reproches qui a été fait à cette méthode, l'autre étant qu'elle conduit à une modélisation moins précise de certains termes qu'elle découple des phénomènes microscopiques. Toutefois cette méthode a donné de bons résultats lors de simulations par différents auteurs dont on pourra trouver des exemples dans [PRESCOTT, 1996].

Les équations développées par la suite sont basées sur les hypothèses suivantes :

- La zone pâteuse est cohérente et forme donc une structure rigide continue et indéformable, la vitesse du solide est nulle.
- Les phases liquide et solide sont à l'équilibre thermique localement.
- La diffusion macroscopique dans la phase solide est nulle.
- Le liquide est supposé newtonien.
- Le terme de Darcy est prépondérant dans la zone pâteuse.

Les équations de conservation ont la forme suivante ont la forme suivante :

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1.3.1)$$

où les variables (vitesse ou densité, ...) sont des variables du mélange.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla \mathbf{V} \right) - \frac{\mu_l}{K} \frac{\rho}{\rho_l} \mathbf{V} - \nabla P + \rho_l B_l \quad (1.3.2)$$

où B_l regroupe les forces volumiques agissant sur le liquide.

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho f_s (h_l - h_s) \mathbf{V}] \quad (1.3.3)$$

Conservation de la masse de soluté :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \nabla \cdot (\rho D \nabla (c_l - c)) - \nabla \cdot (\rho (c_l - c) \mathbf{V}) \quad (1.3.4)$$

Les variables apparaissant dans les équations précédentes sont des variables de mélange, moyenne pondérée par la fraction volumique de chacune des phases des valeurs dans les phases liquide et solide.

Remarque : la signification de l'ensemble des variables utilisées dans ce manuscrit est précisée dans la nomenclature, parfois leur sens sera réprécisé aussi dans le texte.

L'intérêt de ces équations est qu'elles sont valables quelle que soit la valeur de la fraction de solide ce qui permet une modélisation de tout le domaine. Ces équations nécessitent aussi des relations supplémentaires pour résoudre ce système. Il s'agit entre autre du diagramme de phase pour lequel on considère en général une approximation linéaire des courbes de solidus et liquidus. On choisit aussi un des modèles de macroségrégation qui sont décrits par la suite.

Par la suite Ni et Incropera ([NI, 1995a], [NI, 1995b]) ont étendu les capacités de ce modèle, en particulier en ajoutant la prise en compte de la surfusion solutale, de la contraction ou du mouvement du solide. En conclusion, ce modèle a montré une bonne capacité de prédiction et une simplicité de programmation qui en ont fait un modèle largement utilisé.

Modèle basé sur la prise de moyenne volumique

Présentation générale de la théorie de prise de moyenne volumique

Dans la méthode de prise de moyenne volumique, on considère un volume élémentaire représentatif (VER) sur lequel on va déterminer la valeur moyenne de chaque variable de manière à s'affranchir en partie des variations locales à plus petite échelle. La Figure 1-10 illustre ainsi un VER dans le cas de la solidification dendritique colonnaire où l'on distingue les deux phases β et σ . On peut déjà identifier plusieurs échelles de taille, la première est l'échelle macroscopique L, la seconde l'échelle du VER r_0 et la dernière l'échelle de la dendrite l_β .

Soit ψ^β une grandeur physique définie sur la phase β . Sa moyenne $\langle \psi^\beta \rangle$ définie sur le VER est donnée par :

$$\langle \psi^\beta \rangle_x = \frac{1}{V} \int_V \psi^\beta(x+y) \cdot \gamma_\beta(x+y) dV \quad (1.3.5)$$

où γ_β est la fonction de phase définie par $\gamma_\beta = \begin{cases} 1 & \text{dans la phase } \beta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ et V est le volume du VER

On définit également une moyenne dite moyenne intrinsèque de phase, notée $\langle \psi^\beta \rangle^\beta$:

$$\langle \psi^\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi^\beta dV \quad (1.3.6)$$

où V_β est le volume occupé par la phase β à l'intérieur du volume V : $V_\beta = \int_V \gamma_\beta dV$

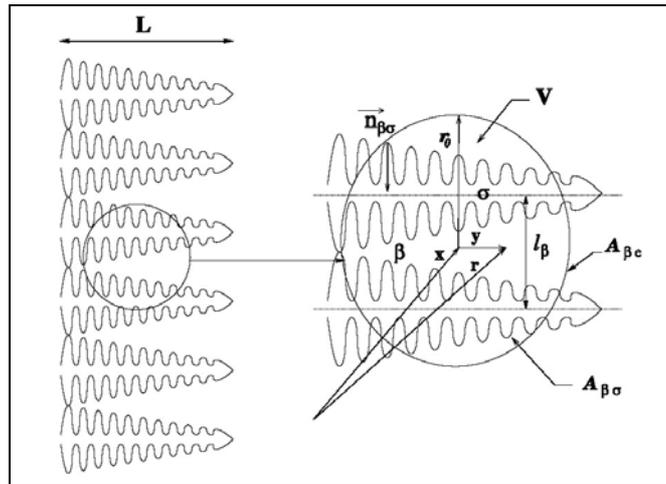


Figure 1-10 : Zone pâteuse dendritique à l'échelle macroscopique et VER associé
[BOUSQUET-MELOU, 2002]

Par la décomposition de Gray, on peut d'autre part décomposer ψ_β en deux parties :

$$\psi_\beta = \gamma_\beta \left(\langle \psi_\beta \rangle^\beta + \tilde{\psi}_\beta \right) \quad (1.3.7)$$

ce qui signifie que dans la phase β , la valeur de ψ est la somme de la moyenne intrinsèque de ψ sur la phase et d'une fluctuation locale de cette variable ψ dans la même phase : $\tilde{\psi}_\beta$ est cette fluctuation par rapport à la moyenne intrinsèque.

On utilise aussi les théorèmes de dérivation spatiale et temporelle de la moyenne volumique :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \psi_\beta \rangle &= \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \psi_\beta dA \\ \left\langle \frac{\partial \psi_\beta}{\partial t} \right\rangle &= \frac{\partial \langle \psi_\beta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} n_{\beta\sigma} \cdot w_{\beta\sigma} \psi_\beta dA \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

où $n_{\beta\sigma}$ est la normale sortante du domaine β et $w_{\beta\sigma}$ la vitesse de l'interface entre les milieux β et σ comme illustré sur la Figure 1-10.

Formulation moyennée des équations

L'hypothèse de base de cette formulation est le rapport d'échelle suivant : $l_\beta \ll r_0 \ll L$. Cette hypothèse va donner lieu à plusieurs simplifications, nous verrons dans la suite comment cette hypothèse peut être relaxée.

Ni et Beckermann [NI, 1991] ont appliqué la méthode de prise de moyenne pour obtenir les équations de conservation, parallèlement Ganesan et Poirier [GANESAN, 1990] ont décrit la même stratégie.

Les hypothèses suivantes sont utilisées pour l'obtention des équations :

- La zone pâteuse est cohérente et forme donc une structure rigide continue et indéformable, la vitesse du solide est nulle.

- La température est uniforme dans le VER
- La densité microscopique est uniforme dans le VER
- La quantité de mouvement induite par le changement de volume est négligeable
- Les termes de dispersion sont négligeables
- Le liquide est newtonien
- La relation de Darcy est applicable
- On se limite au terme de deuxième ordre dans la décomposition de la fonction de tortuosité pour exprimer la perméabilité, que l'on suppose isotrope
- Le milieu est saturé : $g_s + g_l = 1$

Dans les relations qui suivent nous utiliserons la notation simplifiée des variables telle que $\psi_\beta = \langle \psi_\beta \rangle^\beta$ ainsi par exemple $\rho_l = \langle \rho_l \rangle^l$.

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_s \rho_s + g_l \rho_l) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l) = 0 \quad (1.3.9)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$g_l \rho_l \left[\frac{\partial \langle \mathbf{V}_l \rangle^l}{\partial t} + \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \cdot \nabla \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \right] = -g_l \nabla \langle P_l \rangle^l + g_l \rho_l \mathbf{g} + \mu \nabla^2 (g_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l) - \mu \frac{g_l^2}{K} \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \quad (1.3.10)$$

Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle h_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle h_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \langle h_l \rangle^l) = \nabla \cdot ((g_l \kappa_l + g_s \kappa_s) \nabla T) \quad (1.3.11)$$

Conservation de la masse de soluté :

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle c_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle c_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{V}_l \rangle^l \langle c_l \rangle^l) = \nabla \cdot (D_l g_l \rho_l \nabla \langle c_l \rangle^l) + \nabla \cdot (D_s g_s \rho_s \nabla \langle c_s \rangle^s) \quad (1.3.12)$$

En complément de ces équations, on utilise, de même que pour le modèle précédent, des relations supplémentaires pour la perméabilité, la microségrégation, etc.

Discussion sur les problèmes de prise de moyenne

Les équations présentées précédemment prennent en compte des approximations qui se font au cours de la prise de moyenne des équations, en effet des termes supplémentaires apparaissent et par des comparaisons d'ordre de grandeur, ils sont jugés négligeables. Nous allons maintenant voir plus précisément cette méthode en nous basant sur les articles [WHITAKER, 1986], [GOYEAU, 1997] et [BOUSQUET-MELOU, 2002].

Le milieu poreux est généralement considéré comme étant homogène, isotrope et stationnaire. Or dans le cas de la solidification, il convient de prendre en compte le fait que la structure dendritique ne remplit aucun de ces trois critères ce qui influe sur le processus de prise de moyenne. En effet [WHITAKER, 1986] montre que l'application de la loi de Darcy sur un milieu hétérogène conduit à l'apparition de nouveaux termes dépendant du gradient de g_s . D'autre part Goyeau *et al.* [GOYEAU, 1997] montrent, à partir d'une approximation d'une

structure dendritique, que l'évaluation de la perméabilité varie en fonction de la taille du volume de contrôle, surtout lorsque l'hétérogénéité est importante. Ils arrivent ainsi à l'estimation suivante pour les échelles de grandeur : $r_0 \cong 3 \cdot l_\beta$ et $L \cong 48 \cdot l_\beta \tau^{-1}$, où τ est le taux d'hétérogénéité.

Pour illustrer ce propos, prenons l'exemple de la prise de moyenne des équations de Stokes pour laquelle, on arrive à :

$$-\nabla \langle P_\beta \rangle + \varepsilon_\beta \rho_\beta g + \mu_\beta \nabla^2 \langle V_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{V_\beta} n_{\beta\sigma} \cdot (-I \cdot P_\beta + \mu_\beta \nabla V_\beta \delta_{\beta\sigma}) dV = 0 \quad (1.3.13)$$

où $\delta_{\beta\sigma}$ est la distribution correspondant à l'interface $A_{\beta\sigma}$.

Dans l'équation précédente, le terme de pression est décomposé avec le théorème de Gray, seulement cela conduit à intégrer une valeur moyenne qui varie en chaque point de l'intégrale. Pour obtenir une évaluation de cette valeur moyenne, on utilise une décomposition en série de Taylor :

$$\langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_{r=x+y} = \langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_x + (r-x) \cdot \nabla \langle P_\beta \rangle^\beta \Big|_x + \dots \quad (1.3.14)$$

Goyeau *et al.* effectuent ensuite une étude numérique sur une forme analogue à une dendrite simplifiée pour montrer que ces termes sont généralement négligeables.

Cet exemple montre à quel point il est difficile d'appliquer de manière rigoureuse la théorie de prise de moyenne volumique dans le cas d'une structure aussi complexe que les dendrites.

En conclusion, d'après [BECKERMANN, 2002], les avantages clés de la procédure de prise de moyenne volumique sont les suivants :

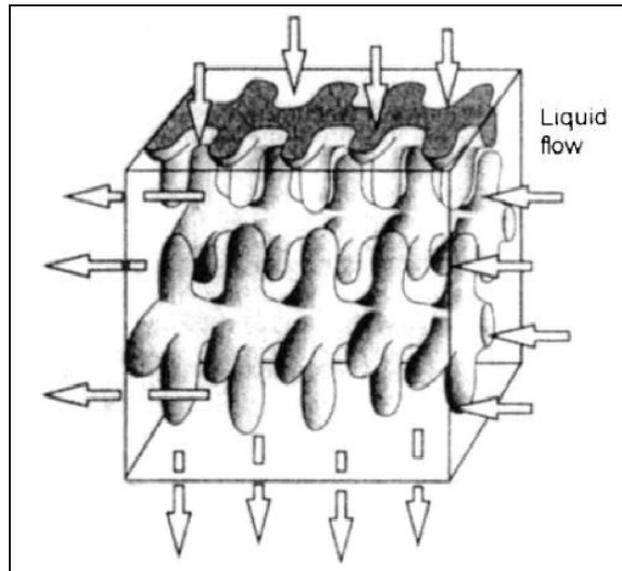
- Les variables macroscopiques sont définies de manière exacte à partir des profils microscopiques
- L'origine de chacun des termes est claire et apparaît naturellement au cours du procédé de prise de moyenne. La prise en compte de certains phénomènes est ainsi facilitée
- Les équations moyennées contiennent directement des paramètres microscopiques
- Les problèmes de fermeture locale peuvent être abordés à partir des variables fluctuantes des volumes de contrôle que l'on peut ensuite résoudre séparément.

1.3.3. Les paramètres des modèles

Dans les équations macroscopiques de nombreux paramètres interviennent dont on ne connaît pas les valeurs car ils sont dépendants de la structure de solidification à l'échelle microscopique. Généralement des hypothèses simplificatrices sont utilisées pour déterminer ces valeurs, on considère par exemple la conductivité thermique égale dans les deux phases dans l'intervalle de solidification. Toutefois pour d'autres paramètres il est important de faire intervenir les phénomènes microscopiques. Nous allons, dans cette partie, illustrer cela par l'étude de la perméabilité et de la macroségrégation, l'objectif étant de déterminer ces valeurs microscopiques à partir des valeurs macroscopiques connues.

Détermination de la perméabilité K

Différents modèles et relations vont être présentés, ils permettent de calculer la perméabilité intervenant dans les équations de quantité de mouvement macroscopiques. Le milieu est considéré comme un milieu poreux saturé de liquide comme illustré sur la Figure 1-11.



**Figure 1-11 : Schéma d'écoulement du liquide à travers la structure dendritique
[FLEMINGS, 1974]**

Les modèles présentés sont les suivants :

- Modèle classique Kozeny-Carman : environ 1960
- Modèle de West : 1985
- Corrélations tirées d'expériences, Poirier : 1987
- Modèle de Xu, corrélation des expériences de Piwonka-Flemings : 1989
- Modèle de Oldenburg : 1992
- Modèle Bhat-Poirier-Heinrich, simulation numérique à partir de données expérimentales : 1995

Plusieurs de ces modèles sont présentés dans un document récapitulatif décrivant l'état des lieux de la recherche rédigé par Prescott et al. [PRESCOTT, 1996]. Si aucune référence particulière n'est indiquée dans la suite de cette section, il faut se reporter à cette publication.

Modèle de Kozeny-Carman

Kozeny et Carman posent la formule suivante pour la perméabilité $K = \frac{(1 - g_s)^3}{kS_0^2 g_s^2}$.

Cette formulation est basée sur un écoulement capillaire où la distribution du liquide est uniforme. L'écoulement se fait à travers une structure régulière de canaux. Les canaux ont la même section et sont uniformes, k ne variant pas avec g_s . Généralement on prend $k=5$ et S_0 indépendant de g_s avec S_0^2 égal à $4 \cdot 10^9 \text{ m}^2$.

Ce modèle n'est a priori pas valide pour les structures dendritiques car l'expérience montre que k décroît continûment lorsque la fraction de solide augmente. De plus il est à noter que la valeur de S_0 peut aussi dépendre de la tortuosité de la structure ainsi que de l'espacement interdendritique qui varient au cours de la solidification ce qui conduit alors à une modification de la formule :

$$K = \frac{(1 - g_s)^3 \lambda_2^2}{\pi^2 k \tau^2 g_s^2} \quad (1.3.15)$$

où λ_2 est l'espace interdendritique secondaire et τ la tortuosité.

Généralement on remplace les valeurs de k et de τ par des valeurs standards : $k=5$ et

$$\tau=1,91. \text{ On obtient alors la formule simplifiée : } K = \frac{(1-g_s)^3 \lambda_2^2}{180 g_s^2}$$

Enfin au cours de la solidification des poches de liquide apparaissent et étant isolées du fluide elles ne doivent pas être prises en compte pour le calcul de la perméabilité. Toutefois ce modèle très simple est souvent utilisé et fournit une bonne première approximation.

Modèle de West

Mais a priori la relation de Kozeny-Carman n'est plus valable pour les faibles fractions solides car alors le fluide ne s'écoule pas à travers une structure de canaux mais plutôt à travers des pointes de dendrites. West a donc développé une formulation par morceaux :

$$K = K_1 f_1(g_l) + K_2 f_2(g_l) \quad \text{avec} \quad f_1(g_l) = g_l^2 \quad \text{et} \quad f_2 = 0 \quad \text{pour} \quad g_l < 0,3 \quad \text{et}$$

$$\text{sinon} \quad f_2(g_l) = (1-g_l)^{2/3} \left[3 + \frac{4}{1-g_l} - 3 \sqrt{\frac{8}{1-g_l} - 3} \right]. \text{ Les constantes } K_1 = 6,4 \cdot 10^{-13} \text{ et } K_2 = 8,8 \cdot 10^{-11}$$

¹¹ étant fixées à partir des expériences de Piwonka-Flemings [PIWONKA, 1966].

Modèle de Xu

Xu [XU, 1991b] propose aussi un modèle pour la perméabilité à partir des résultats expérimentaux de Piwonka-Flemings [PIWONKA, 1966].

$$K = 2,6 \cdot 10^{-5} \left[1,923 \cdot 10^{-2} g_l^2 + \frac{4 + 3g_s - 3\sqrt{g_s(8-3g_s)}}{g_s} \right] \quad \text{pour } g_l \geq \frac{1}{3} \quad (1.3.16)$$

$$K = 5,0 \cdot 10^{-7} g_l^2 \quad \text{pour } g_l < \frac{1}{3}$$

On peut noter une certaine similitude avec la relation de West même s'il existe des écarts entre les résultats des deux modèles.

Relations de Poirier

Poirier [POIRIER, 1987] a réalisé des expériences avec un alliage Pb-Sn, dont il a regroupé les résultats avec ceux d'autres études sur l'alliage Pb-Sn et du borneol-paraffine. Il en a déduit les relations suivantes pour la perméabilité à faible fraction de liquide. Pour les fractions liquides plus élevées, les formules proviennent de [FELICELLI, 1991] et correspondent à des solutions analytiques d'écoulement à travers un réseau de cylindres.

Parallèlement au bras principal de la dendrite

$$K_{\xi\xi} = \begin{cases} \left(4,53 \cdot 10^{-4} + 4,02 \cdot 10^{-6} (g_l + 0,1)^{-5} \right) \frac{\lambda_1^2 g_l^3}{1-g_l} & \text{pour } g_l < 0,7 \\ 0,07425 \lambda_1^2 \left(-\ln(1-g_l) - 1,476 + 2(1-g_l) - 0,5(1-g_l)^2 \right) & \text{pour } g_l \geq 0,7 \end{cases} \quad (1.3.17)$$

où λ_1 est l'espace interdendritique primaire

Perpendiculairement au bras principal de la dendrite

$$K_{\eta\eta} = \begin{cases} \left(1,73 \cdot 10^{-3} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{1,09} \right) \frac{\lambda_1^2 g_l^3}{1 - g_l^{0,749}} & g_l < 0,7 \\ 0,03979 \lambda_1^2 \left(-\ln(1 - g_l) - 1,476 + 2(1 - g_l) - 1,774(1 - g_l)^2 + 4,076(1 - g_l)^3 \right) & g_l \geq 0,7 \end{cases} \quad (1.3.18)$$

Relations proposées par Oldenburg-Spera

Une approche similaire proposée par Oldenburg et Spera [OLDENBURG, 1992] consiste à diviser le comportement du fluide en deux parties. En effet à partir d'une étude dimensionnelle, ces auteurs remarquent que l'écoulement est contrôlé par le gradient thermique ou thermo-solutal qui s'oppose dans la partie liquide à la viscosité et à la perméabilité pour les fractions de solide élevées. Ils présentent donc une relation qui bascule pour une valeur critique de la fraction de solide et ils combinent donc ainsi un modèle de viscosité augmentée avec la loi de Kozeny-Carman.

$$\begin{aligned} \mu_l &= \mu_l^0 \left(\frac{A_\mu}{A_\mu - F g_s} \right)^2 \\ K &= G K_0 \frac{(1 - g_s)^3}{g_s^2} \end{aligned} \quad (1.3.19)$$

$$\text{avec } A_\mu = 0,5, g_s^{\text{crit}} = 0,5 \text{ et } \begin{cases} F = 0,5 - \frac{1}{\pi} \arctan(100(g_s - g_s^{\text{crit}})) \\ G = \left[0,5 + \frac{1}{\pi} \arctan(100(g_s - g_s^{\text{crit}})) \right]^{-4} \end{cases}$$

La valeur de g_s^{crit} est cependant un paramètre qui dépend sans doute de l'alliage considéré et du type de solidification. Il apparaît donc nécessaire de fixer les valeurs des paramètres à partir des données de l'alliage que l'on souhaite étudier.

Relations de Bhat-Poirier-Heinrich

Cette approche est assez différente des précédentes puisqu'elle comprend plusieurs étapes mêlant la simulation numérique et des expériences. Lors de la réalisation de l'expérience des images sont prises pour différentes valeurs de la fraction de solide, à des valeurs faibles pour lesquelles il y a peu de mesures. Ces images sont ensuite numérisées et la structure dendritique ainsi obtenue est maillée. A partir de ce maillage, on effectue une simulation de l'écoulement à travers cette structure et on en déduit donc une valeur de la perméabilité.

Bhat-Poirier-Heinrich [BHAT, 1995] obtiennent ainsi les relations suivantes :

$$\begin{aligned} K S_v^2 &= -0,2395 + 1,3607 \omega + 0,5327 \omega^2 - 0,04959 \omega^3 + 0,001108 \omega^4 \\ \omega &= \frac{1}{g_s} \left[1 - \left[\frac{4 g_s}{\pi} \right]^{1/2} \right]^{5/2} \end{aligned} \quad (1.3.20)$$

où S_v , la surface de l'interface liquide/solide par unité de volume, est déterminé par analyse d'images mais peut être reliée à l'espacement interdendritique

Cette relation est valide pour $0,7 < g_l < 0,98$ et perpendiculairement au bras dendritique primaire.

Remarques sur les modèles de perméabilité

Etant donné la difficulté expérimentale de mesure des perméabilités d'un milieu en cours de solidification, le recalage des modèles est très difficile et des écarts importants subsistent. On peut ainsi voir sur la Figure 1-12 que les modèles divergent fortement en particulier pour les faibles fractions solides. Le modèle de Oldenburg est très éloigné des autres mais il faut tenir compte du fait que dans ce modèle la viscosité est modifiée et que donc on ne peut pas le comparer directement. Sinon l'ensemble des courbes se situe dans une même zone et globalement prédisent la même évolution. Il est donc difficile de sélectionner une loi en particulier étant donné que les résultats dépendent des paramètres que l'on doit introduire et qui peuvent être impossible à obtenir lors de certaines simulations. Ainsi si l'on considère un calcul dans lequel le modèle ne prédit pas la taille de l'espacement interdendritique primaire, certains modèles doivent être écartés. Généralement, les modèles les plus simples sont donc utilisés.

Une alternative aux mesures expérimentales est la simulation directe de l'évolution de la structure dendritique et le calcul numérique de l'écoulement à travers cette structure. Cette méthode diffère de celle de Bhat-Poirier-Heinrich, car alors les résultats expérimentaux n'interviennent pas et la structure dendritique est alors simulée directement par une méthode de champ de phase par exemple (pour plus de détail sur la méthode de champ de phase se reporter à [BOETTINGER, 2002]). Cette méthode semble très prometteuse et permettrait de s'affranchir de toutes les difficultés expérimentales empêchant une mesure précise de la perméabilité ou du coefficient de transfert thermique.

Devant la variabilité des modèles et la difficulté de les calibrer, nous avons donc choisi de privilégier la formulation de Kozeny –Carman faisant intervenir comme paramètres extérieurs l'espacement interdendritique secondaire et la tortuosité du milieu poreux. De plus ces informations devront être fournies par l'utilisateur et elles n'évolueront pas au cours du calcul. Ces conditions sont assez restrictives mais cela permet à notre formulation de rester simple en laissant la possibilité d'introduire plus tard un modèle plus complexe.

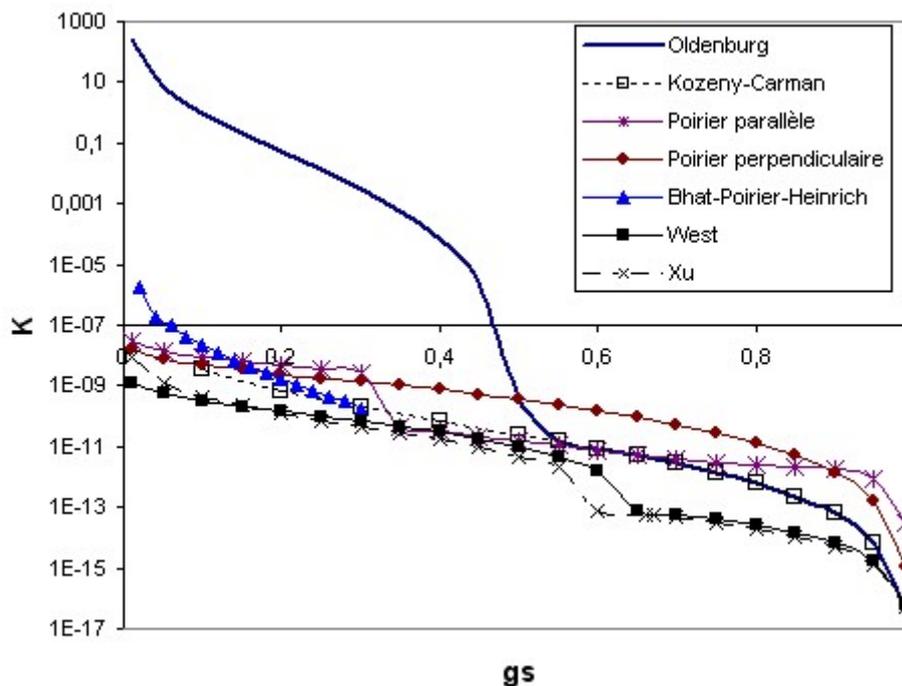


Figure 1-12 : Comparaison des modèles de perméabilité

Modèles de microségrégation

Les équations macroscopiques présentées dans la première partie nous permettent d'obtenir en général les valeurs de l'enthalpie (ou de la température) et de la concentration moyenne. Le modèle de microségrégation permet alors d'obtenir à partir de ces résultats les valeurs de la température, de la fraction de solide et des concentrations moyennes intrinsèques dans le liquide et dans le solide. Dans cette partie, nous n'allons présenter que les modèles les plus simples qui peuvent donc être introduits facilement dans un code de macroségrégation. Nous verrons dans une autre partie comment la résolution de ces relations peut se faire dans un code de calcul.

Plus généralement, un modèle de microségrégation doit contenir les points suivants :

- Choix des hypothèses comme l'équilibre thermique
- Modèle pour l'évolution de la concentration
- Modèle pour le coefficient de partage
- Expression des longueurs de diffusion
- Détermination des espacements interdendritiques
- Détermination des surfaces de contact
- Modèle pour la croissance d'une dendrite

Toutefois les principaux schémas utilisent des relations simplifiées qui permettent de ne pas avoir à déterminer l'ensemble de ces paramètres. La première approximation de ces modèles est de considérer une morphologie localement plane pour l'interface solide/liquide au niveau de la dendrite. Une autre hypothèse consiste à considérer que la température est uniforme au niveau microscopique et égale à la température du liquidus pour la concentration c_l^* . Dans les modèles suivants on considère donc le problème décrit sur la figure 7 où l'on cherche à déterminer une approximation de la courbe de concentration dans la phase liquide et dans la phase solide. L'exposant * correspondant aux valeurs à l'interface et la largeur de notre zone d'étude étant de l'ordre de la moitié de l'espacement interdendritique secondaire.

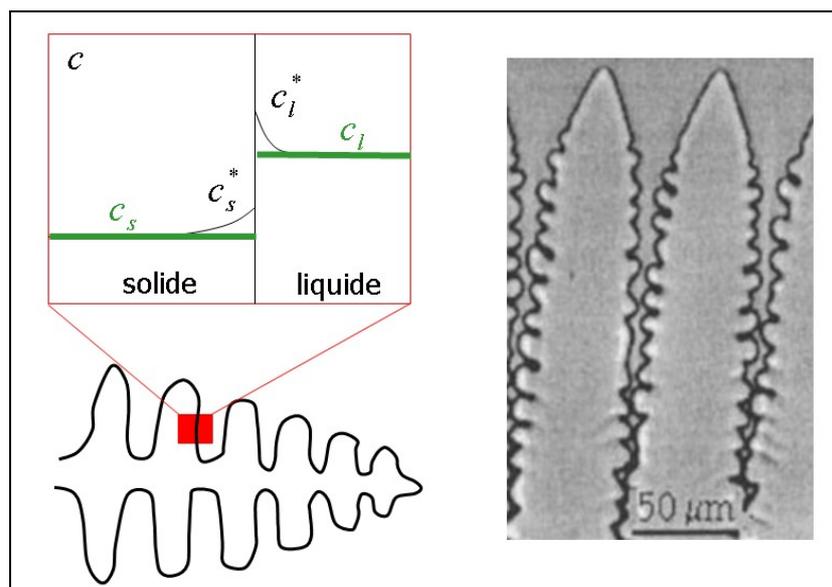


Figure 1-13 : Illustration de l'élément représentatif à l'échelle microscopique, courbes de variation de la concentration et image d'une dendrite [AKAMATSU, 1995]

Modèle de loi de levier

Dans ce modèle on suppose qu'il y a diffusion complète aussi bien dans le liquide que dans le solide, ce qui correspond à un état d'équilibre.

$$\begin{aligned} \langle c_s \rangle^s &= c_s = c_s^* = k_p c_l^* = k_p c_l = k_p \langle c_l \rangle^l \\ \langle c_l \rangle^l &= \frac{\langle c \rangle}{(1 - g_s) + k_p g_s} \end{aligned} \quad (1.3.21)$$

où k_p est le coefficient de partition.

Modèle de Scheil

La diffusion dans le liquide est ici considérée complète (comme dans tous les modèles qui suivent) alors que celle dans le solide est nulle, on obtient ainsi la relation :

$$\begin{aligned} c_s^* &= k_p c_0 (1 - g_s)^{k_p - 1} \\ \langle c_s \rangle^s &= \frac{1}{g_s} \int_0^{g_s} c_s^* d\varepsilon \end{aligned} \quad (1.3.22)$$

Cette relation est inadéquate lorsque la solidification se rapproche de l'eutectique, il convient alors de changer de mode de solidification qui se produit alors à température constante (température eutectique).

Modèle de Brody-Flemings (cf. [KOBAYASHI, 1988])

Brody et Flemings ont ensuite proposé un modèle à partir d'une hypothèse de solidification parabolique soit g_s proportionnel à \sqrt{t} . En posant $\gamma = \frac{2D_s}{\zeta^2}$ avec $g_s = \zeta\sqrt{t}$, ils

obtiennent : $c_s^* = k_p c_0 \left[1 - (1 - \gamma k_p) g_s \right]^{k_p - 1 / (1 - \gamma k_p)}$ en suivant la formulation de Kobayashi (dans le modèle originel γ est fonction de α le nombre de Fourier). Le calcul de la concentration moyenne intrinsèque $\langle c_s \rangle^s$ reste inchangé. Toutefois ce modèle n'est plus physique si $\gamma > 0,35$ d'après Clyne et Kurz qui ont donc apporté une légère modification.

Modèle de Clyne-Kurz (cf. [KOBAYASHI, 1988])

Le paramètre γ du modèle Brody-Flemings est ici remplacé par β qui est calculé à partir de γ .

$$\begin{aligned} c_s^* &= k_p c_0 \left[1 - (1 - \beta k) g_s \right]^{k_p - 1 / (1 - \beta k_p)} \\ \beta &= \gamma \left[1 - \exp\left(-\frac{2}{\gamma}\right) \right] - \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right) \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

Modèle de Ohnaka et loi de puissance (cf. [COMBEAU, 1996])

Un autre type d'approche consiste à postuler une forme pour la courbe de concentration dans la phase solide. Cette technique a d'abord été utilisé par Ohnaka (fonction quadratique) et ensuite été étendue à une loi de puissance de la forme :

$$c_s(\eta) = a\eta^\gamma + b \text{ où } \eta \text{ est l'abscisse dans l'élément représentatif, } \eta \text{ varie entre 0 et } g_s.$$

La constante γ est un paramètre ajustable.

Modèle à variable interne de Mo (cf. [COMBEAU, 1996])

Dans ce modèle au lieu d'exprimer une relation donnant directement la concentration moyenne, Mo détermine une équation d'évolution de la concentration moyenne dans le solide :

$$\frac{d\langle c_s \rangle^s}{dt} = \frac{k_p \langle c_l \rangle^l - \langle c_s \rangle^s}{g_s} \left[\frac{dg_s}{dt} + \frac{D_s}{x_0^2} \frac{\xi}{1 - (1 - k_p)g_s} \right] \quad (1.3.24)$$

où ξ est un paramètre ajustable et x_0 est égal à la moitié de l'espacement interdendritique secondaire.

Remarques à propos des différents modèles de macroségrégation

Le modèle de macroségrégation sert à prédire la variation de la concentration dans le solide et le liquide à l'échelle microscopique. Cette information est ensuite complétée par d'autres relations qui permettent ensuite de pouvoir calculer les valeurs de la température de la fraction et des valeurs moyennes de la concentration dans le solide et dans le liquide à l'échelle macroscopique.

Ces quelques modèles ne sont pas les seuls qui ont été développés mais ils permettent de mettre en avant quelques points intéressants. Ainsi à partir des deux cas limites que sont la loi de levier et la loi de Scheil, d'autres modèles ont été dérivés en adaptant graduellement la relation pour permettre d'obtenir une représentation plus réaliste. [KOBAYASHI, 1988] a ainsi comparé ces formulations avec une résolution analytique, il montre ainsi que pour une large plage de valeurs les résultats des modèles ne sont pas très satisfaisants. Plus tard [VOLLER, 1999] montre que les modèles de Brody-Flemings et Ohnaka donnent de meilleurs résultats non pas dans le cas d'une solidification parabolique comme écrit dans les hypothèses mais dans le cas d'une solidification avec un taux de refroidissement constant.

D'autres modèles ont ainsi été développés avec des approches différentes comme de choisir une formule pour la courbe de concentration dans le solide ou de résoudre une équation d'évolution. Ces approches ont été étudiées par Combeau *et al.* [COMBEAU, 1996] et montrent des résultats intéressants. Wang et Beckermann [WANG, 1993] ont aussi présenté un modèle décomposant en trois zones le VER : le solide, le liquide interdendritique et le liquide.

Toutefois, dans les codes de calcul on commence généralement par introduire les deux premières lois qui ont le gros avantage d'être très simples et d'être une bonne première approximation. Une deuxième étape étant d'introduire une discrétisation microscopique dans notre VER et de résoudre alors la macroségrégation directement au moyen d'une discrétisation monodimensionnelle, comme le décrivent Sundarraj et Voller [SUNDARRAJ, 1994].

Pour finir, il est à noter que la plupart de ces modèles considère l'interface comme localement plane, or la topologie de cette interface évolue au cours de la solidification comme l'a étudié [XU, 2001]. Le changement de topologie de cette interface modifie les relations comme le montrent Combeau *et al.* [COMBEAU, 1996].

1.3.4. Modèles de couplage T-g-c₁

Un autre point très important est la manière dont on résout le système d'équations macroscopiques. En effet il est très coûteux en temps de calcul de résoudre directement les équations couplées. On cherche donc à les résoudre séparément et ensuite à utiliser une méthode de couplage pour améliorer la résolution. Dans cette partie nous allons présenter les méthodes suivantes :

- Méthode de couplage de Xu et Li
- Source Based Scheme
- Méthode de Schneider-Beckermann
- Méthode de Swaminathan-Voller

Méthode de couplage de Xu et Li

Dans leur article Xu et Li [XU, 1991a] utilisent les équations suivantes pour la conservation de l'énergie et du soluté :

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l \rho_l c_{pl} \mathbf{V}T) &= \nabla \cdot (\kappa_m \nabla T) + \rho_s \Delta H_{ls} \frac{\partial g_s}{\partial t} \\ g_l \frac{\partial(\rho_l c_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l \rho_l \mathbf{V}c_l) &= \nabla \cdot (\rho_l D_l \nabla(g_l c_l)) + (\rho_l - \rho_s k_p) c_l \frac{\partial g_s}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.3.25)$$

Où l'indice m indique la valeur du mélange solide-liquide qui est obtenue par une moyenne sur les deux phases.

Ces équations sont ensuite discrétisées par différences finies avec un schéma upwind mais au temps t^i . Le terme de chaleur latente est omis dans la résolution de T^{i+1} , la variation de la fraction de solide est donc calculée par rapport à la température du liquidus à l'aide de l'équation :

$$\Delta g_s^{i+1} = \left(\frac{g_s \rho_s c_{ps} + g_l \rho_l c_{pl}}{\rho_s \Delta h_{ls}} \right)^i (T_{liq}^{i+1} - T^{i+1}) \quad (1.3.26)$$

La méthode de résolution de la corrélation T- g_s - c_l est basée sur la procédure suivante :

- 1- Calcul de T^{i+1} en considérant $\Delta g_s^{i+1}=0$
- 2- Calcul de c_l^{i+1} en utilisant la valeur T^{i+1} et c_l^i , ensuite calcul de T_{liq}^{i+1} à partir de cette valeur
- 3- Calcul de Δg_s^{i+1} , alors $F1=0,5*(F1+\Delta g_s^{i+1})$
- 4- Calcul de la nouvelle valeur de T^{i+1} à partir de $c_l=c_l^{i+1}$ et F1, alors $T1=0,5*(T1+T^{i+1})$
- 5- Calcul de c_l^{i+1} à partir de T1 et F1, alors $C1=0,5*(C1+c_l^{i+1})$
- 6- Si les écarts entre F1 et Δg_s^{i+1} , T1 et T^{i+1} , c_l^{i+1} et C1, ne remplissent pas les critères de convergence retour sur les étapes 3 à 6.

Ce schéma de résolution du couplage T- g_s - c_l mérite quelques explications. L'idée de base est de se rapprocher progressivement de la solution de l'équilibre thermodynamique que doivent respecter ces trois variables. Ainsi on commence par calculer une température plus basse car on ne prend pas en compte la solidification. On calcule aussi une nouvelle concentration. Cette solution n'est pas bonne car l'écart de température obtenue induit une solidification et de plus la température calculée doit être égale à la température du liquidus avec la nouvelle concentration dans le liquide. Il est donc nécessaire de corriger les valeurs de température et de concentration dans le liquide en prenant en compte cette solidification induite par notre première estimation de la température. Pour stabiliser le schéma, les auteurs pondèrent la nouvelle valeur calculée par la valeur précédente. Ainsi petit à petit l'écart entre la température et la température de liquidus calculée avec la concentration dans le liquide se réduit et on arrive alors à la convergence. D'ailleurs Xu et Li montrent que leur schéma de couplage converge nécessairement. En moins de 30 itérations ils atteignent une précision de 10^{-4} .

Les trois schémas de couplage suivant sont décrits dans l'article de Swaminathan et Voller [SWAMINATHAN, 1997], ils reprennent donc le même système d'équations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_{pl} T) &= \nabla(\kappa \nabla T) - \rho_s \Delta h_{ls} \frac{\partial g_l}{\partial t} \\ \frac{\partial(\rho c)_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_l) &= 0 \end{aligned} \quad (1.3.27)$$

Méthode du terme source

Ce schéma utilise la procédure suivante à deux niveaux d'itération :

- 1- Calcul de la température T et de la variable $(\rho c)_m$ à l'aide des équations précédentes
- 2- En chaque point une valeur auxiliaire de l'enthalpie est calculée :
 $h^{aux} = c_p T^{i+1} + g_l^i \Delta h_{ls}$
- 3- Itération interne pour ajuster la température et déterminer la concentration liquide et la fraction de liquide en satisfaisant les contraintes suivantes :

$$h^{aux} = c_p T^* + g_l^* \Delta h_{ls} \quad (a)$$

$$c_l^* = F((\rho c)_m, g_l^*) \quad (b)$$

$$T^* = G((c_l^1)^*, \dots, (c_l^N)^*) \quad (c)$$

La relation (b) correspond au modèle de microségrégation, la contrainte (c) est imposée par la surface du liquidus et dépend de tous les constituants. Pour le diagramme de phase linéarisé d'un alliage binaire cette relation se simplifie en $T^* = T_f + m \cdot c_l$ où m est la pente du liquidus.

- 4- Après convergence des itérations internes, les valeurs alors calculées deviennent les valeurs pour l'itération externe.
- 5- Vérification de la convergence des itérations externes.

Ce schéma se rapproche du précédent, en effet on part d'une solution des équations thermique et solutale basée sur des valeurs connues de g_l et c_l , qui sont initialisées à l'incrément précédent pour la première itération. Ensuite on actualise ces valeurs pour résoudre de nouveau le système d'équations thermo-solutal jusqu'à obtenir la convergence. Mais ici on cherche aussi à assurer la consistance des variables T, c_l et g_l par des itérations internes entre chaque résolution.

Ce schéma pose quelques problèmes puisque la substitution successive dans les itérations internes ne fonctionne pas forcément et qu'il est parfois difficile d'obtenir la convergence des itérations internes ce qui pousserait à faire une résolution directe des trois équations.

Schéma de Swaminathan et Voller

L'objectif de ce schéma est d'éviter le calcul d'une solution dans la boucle interne du schéma précédent. A partir de l'équation (1.3.27), Swaminathan et Voller [SWAMINATHAN, 1997] obtiennent les équations discrétisées suivantes en posant que

$$\frac{\partial g_l}{\partial t} = \frac{dg_l}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \text{ et en explicitant le calcul de la concentration moyenne :}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)_m T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_{pl} T) &= \nabla(\kappa \nabla T) - \rho_s \Delta h_{ls} \frac{dg_l}{dT} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \\ \frac{\partial(\rho c)_m}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho_l \mathbf{V} c_l^0) \end{aligned} \quad (1.3.28)$$

La procédure de résolution itérative employée suit alors le schéma suivant :

- 1- Initialisation aux valeurs du pas de temps précédent.
- 2- Résolution de l'équation de $(\rho c)_m$ réalisée une seule fois grâce à la formulation explicite.
- 3- Calcul d'une approximation de la température T_{aux} en utilisant l'équation suivante :

$$\frac{dg_l}{dT} = \begin{cases} \frac{g_l^n - g_l^{n-1}}{T^n - T^{n-1} + 10^{-6}}, & 0 < g_l^n < 1 \\ 0, & g_l^n = 1 \text{ ou } g_l^n = 0 \end{cases}$$

- 4- Calcul de g_l^{n+1} à partir de T_{aux} et de la température du liquidus T^{liq} provenant du diagramme de phase avec les c_l pris à l'itération n .

$$g_l^{n+1} = g_l^n + SLOPE * (T^{aux} - T^{liq})$$

$$SLOPE = \begin{cases} \frac{dg_l}{dT}, & 0 < g_l^n < 1 \\ \frac{c_{pl}}{\Delta H_{ls}}, & g_l^n = 0 \text{ ou } g_l^n = 1 \end{cases}$$

- 5- Calcul de $c_l^{n+1} = F((\rho c)_m, g_l^{n+1})$, valeurs de l'itération n
- 6- Pour un système eutectique, si $c_l < c_{eut}$ alors $c_l = c_{eut}$
- 7- Calcul de la nouvelle température : $T^{n+1} = \begin{cases} G((c_l^1)^{n+1}, \dots), & 0 < g_l^n < 1 \\ T^{aux}, & g_l^n = 0 \text{ ou } g_l^n = 1 \end{cases}$
- 8- Mise à jour des variables
- 9- Les étapes 4 à 9 sont répétées jusqu'à obtenir la convergence fixée lorsque la variation de fraction de solide est inférieure à 10^{-5} .

Ce schéma présente donc une linéarisation de l'équation de la thermique avec une correction successive de la concentration dans le liquide et de la fraction de liquide ainsi qu'une résolution explicite de l'équation de transport du soluté.

Les différentes méthodes de couplage présentées ci-dessus ont donné de bons résultats d'après leurs auteurs. Même si le dernier modèle de Swaminathan et Voller a l'intérêt d'éviter des itérations internes, il est difficile de juger lequel est le plus intéressant.

Différentes stratégies de couplage ont été testées dans la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005] et en partie testées aussi dans THERCAST. Ces résultats seront décrits plus loin lors de la présentation de la résolution des équations macroscopiques. Mais globalement l'équation de la thermique a été résolue en utilisant une technique de Newton-Raphson appelant le module de microségrégation pour calculer la dérivée de la température par rapport à l'enthalpie en fonction de la concentration moyenne.

1.3.5. Etat de l'art de la simulation et applications

La simulation numérique de la macroségrégation a débuté depuis plus d'une dizaine d'années et de nombreux articles ont été publiés sur le sujet. Cependant les aspects les plus marquants de ces travaux sont le manque de résultats expérimentaux directement exploitables sur les gros lingots qui nous intéressent. Ce manque est en grande partie du au fait que la réalité physique s'écarte largement de l'approche simplifiée des modèles utilisés et qu'il n'est donc pas facile d'exploiter directement les résultats expérimentaux. Les coûts sont aussi très élevés pour la mise en place de ces expériences. D'autre part les résultats présentés sont souvent succincts et ne permettent pas une analyse détaillée de l'évolution de la solidification et donc la compréhension des cartes de ségrégation finales. Toutefois des simulations ont permis de retrouver certains phénomènes rencontrés par les fondeurs et de les expliquer et reproduire numériquement. En particulier certains types de ségrégation apparaissant dans les lingots sont reproduits par les calculs. Ces aspects sont donc très encourageants même si il reste encore beaucoup de travail avant de pouvoir avoir un outil numérique à vocation industrielle fiable et efficace.

Pour ce tour d'horizon de la recherche nous nous appuyons sur trois publications ([PRESCOTT, 1996], [BECKERMANN, 2000], [BECKERMANN, 2002]) qui présentent une revue de ce qui se fait en ségrégation et des différentes applications actuelles. Même si certaines de ces applications sont éloignées de notre cas industriel, il semble bon d'avoir une idée de ces travaux pour mieux cerner les limites des modèles ainsi que leurs atouts.

Les travaux de recherche se sont bien souvent cantonnés à l'étude de substance semi transparentes analogues à des alliages métalliques, du $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ par exemple. La solidification dendritique de ces alliages permettait d'avoir une approximation de la structure colonnaire des alliages métalliques tout en pouvant visualiser la formation du front et aussi les dendrites. Toutefois les caractéristiques de ces matériaux restent tout de même éloignées de celles des métaux en particulier le nombre de Prandtl est très différent. Cette approche a donc ces limites mais peut permettre une première comparaison avec des résultats expérimentaux au moins pour le codage numérique des équations. L'aspect dendritique de la solidification peut aussi être utilisé pour valider des modèles microscopiques prédisant la formation de la dendrite.

Les cas étudiés sont généralement simplifiés en se limitant à une géométrie pouvant se ramener à un cas 2D et en contrôlant les échanges avec l'extérieur. Ainsi la majorité des cas sont soit du refroidissement latéral soit du refroidissement par le bas, les autres faces étant considérées adiabatiques. Le premier cas est bien adapté pour simuler l'avance d'un front de solidification alors que le second sert plus à analyser les instabilités dans le front de solidification qui peuvent conduire à la formation de canaux ségrévés. Ces cas plus académiques qu'industriels servent de référence pour les validations. Cependant la simplification parfois excessive de ces cas les rend difficilement exploitables pour une extrapolation sur des lingots industriels. Il est donc nécessaire de simuler des cas plus proches de la réalité.

Les simulations sur les alliages métalliques reprennent aussi en partie ces cas simplifiés (cf. [PRESCOTT, 1996], [AHMAD, 1998], [CHAKRABORTY, 2003], [STELIAN, 2003], [DESBIOLLES, 2003]) mais sont aussi appliquées à des cas plus complexes, comme les calculs et les analyses présentés dans [VANNIER, 1993] et [THIEBAUT, 1999]. [BECKERMANN, 2000] fournit ainsi dans ces articles quatre principaux exemples de simulations :

- lingot d'acier axisymétrique
- coulée continue d'aluminium
- croissance monocristalline d'un superalliage
- Pièce coulée complexe en acier

Le premier exemple correspond bien à notre problématique. En effet, comme l'illustre la Figure 1-14, la simulation comporte les différents éléments du moule et des réfractaires qui en font une bonne approximation de la géométrie du cas industriel. Les calculs permettent une prédiction de la ségrégation sur l'axe du lingot qui est bien souvent utilisée comme référence. Ce lingot a été coulé et analysé ce qui permet cette comparaison intéressante avec l'expérience. Les écarts de concentration sont expliqués par la non prise en compte de la partie de la solidification qui est en grande partie équiaxe. Cet exemple illustre bien la difficulté de la validation des codes de calcul de la macroségrégation. Il est en plus difficile d'estimer les effets numériques sur ces écarts car elles sont rarement évaluées. De plus les propriétés des matériaux ne sont pas toujours connues avec suffisamment de précision.

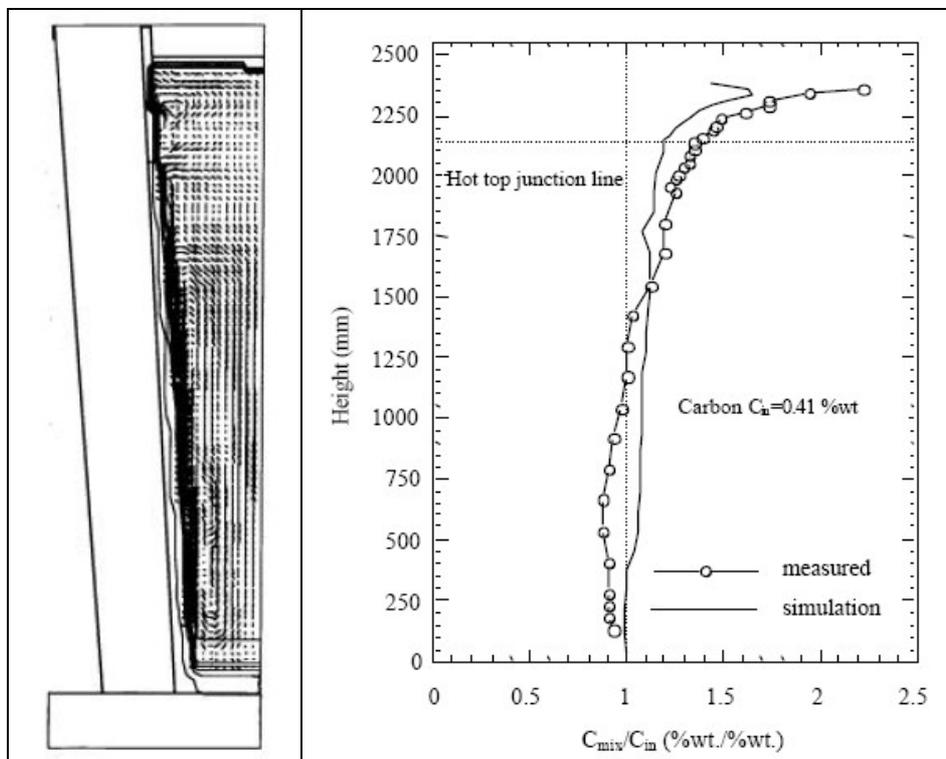


Figure 1-14 : Schéma du lingot et écart de concentration en carbone sur l'axe du lingot
[BECKERMAN, 2000]

Les autres exemples illustrent des types de calcul différents. La simulation en coulée continue est centrée sur la macroségrégation due à la contraction du solide dans la zone pâteuse qui expulse le liquide enrichi. La déformation du solide est donc ici la source principale de ségrégation même si pour l'aluminium le mouvement dans le liquide est important ([VENNEKER, 2002]) contrairement à la coulée continue d'acier pour laquelle la zone pâteuse est beaucoup plus longue.

Les problèmes de croissance de cristaux font intervenir une solidification verticale qui génère des instabilités dans le front de solidification. Cela provoque parfois la formation de « freckles », des canaux avec une forte ségrégation. Ce problème a été largement étudié dans la littérature (cf. [FELICELLI, 1997], [GUO, 2003], [HEINRICH, 2004], [LIU, 2005]). Il

nécessite de faibles tailles de maille mais les simulations se font seulement sur de petites pièces ce qui rend acceptable le nombre d'éléments spécialement pour les cas 2D. Ce type de simulations n'a pas été effectué avec THERCAST car l'objectif de l'étude était plutôt centré sur les lingots de grande taille pour lesquels ce phénomène est moins crucial.

Enfin le dernier exemple consiste en une pièce coulée complexe dans laquelle le refroidissement et l'écoulement sont compliqués par la géométrie. Cela limite l'amplitude des zones de recirculation et donc les ségrégation que l'on observe sont différentes et les termes de retrait peuvent avoir leur importance. Pour ce type de calcul, la phase de remplissage est très importante et ce type de simulation requiert donc une approche différentes de celles employées pour la solidification de lingots plus classiques.

Ainsi la plupart des publications concernent l'étude de points bien particuliers comme les freckles mais les articles traitant de la solidification de lingots industriels sont très rares. Il ne sera donc quasiment pas possible de comparer nos résultats avec ceux d'autres codes de calcul ou avec des résultats expérimentaux. Ce type de comparaison se fera donc sur des cas simplifiés comme l'expérience de Hebditch et Hunt [HEBDITCH, 1974] qui est couramment employée pour la validation de code de macroségrégation [AHMAD, 1998].

1.4. Contexte et objectifs de l'étude

1.4.1. Contexte de l'étude et partenaires industriels

Ce travail de recherche fait partie d'un projet d'Optimisation des Systèmes de Coulée du Ministère de l'Industrie qui réunit de nombreux partenaires industriels (principalement Arcelor, Aubert&Duval, Ascometal, Industeel, CTIF, Erasteel), des laboratoires de recherche (CEMEF et LSG2M) et des sociétés de valorisation des outils logiciels (Sciences et Computers Consultants, Transvalor).

En effet, les partenaires industriels de ce projet et les laboratoires de recherche ont lancé en février 2000, avec l'aide du Ministère de l'Industrie, un projet concernant le procédé de la coulée à la fois en lingots et en coulée continue. Ce procédé, très important au niveau de la qualité finale du produit et de son coût de revient, regroupe, pour les industriels, les phases de remplissage, de solidification et de refroidissement. Son domaine d'application concerne la fabrication, des pièces moulées (que ce soit des pièces moulées en sable, ou en coquille comme les lingots) et des brames de coulée continue.

L'objectif des industriels est, au final, de réduire les coûts et délais de cette étape de fabrication. Ceci passe par la mise au point d'outils performants de modélisation de la coulée. Ces outils permettront l'optimisation des produits actuels et la mise au point de produits nouveaux.

Pour une gestion technique plus facile, le projet a été découpé en 3 sous-projets ayant chacun une forte interaction avec les 2 autres :

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Fonderie" (OSC - F)

Le projet OSC - F s'intéresse à l'optimisation des gammes de moulage (sable ou coquille), basée sur la prévision des phénomènes thermo-mécaniques de la solidification (dimensionnel des pièces, contraintes dans les pièces et les moules). Trois points, intéressant fortement les industriels, sont particulièrement étudiés : la réduction des temps de calcul, la

prise en compte du remplissage de pièces complexes et l'élaboration d'une base de données matériau.

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Métallurgie" (OSC - M)

Le projet OSC - M prend en compte des phénomènes métallurgiques qui sont prépondérants pour la solidification de certaines nuances. Ce projet permettra l'application des logiciels développés, aux procédés industriels mettant en jeu la coulée et la solidification d'aciers ou d'alliages très alliés.

Projet "Optimisation des Systèmes de Coulée - Coulée Continue" (OSC - CC)

Ce projet s'intéresse à la prise en compte d'un phénomène essentiel pour certains procédés de coulée : la compressibilité du métal pâteux au niveau de la thermomécanique du produit mais aussi à la modélisation des rouleaux, du refroidissement de la brame, etc. Par exemple, la prise en compte de la compressibilité est essentielle pour une meilleure compréhension des phénomènes qui régissent les ségrégations axiales, criques internes et porosités... Par ailleurs, les outils numériques, déjà développés ou en cours de développement dans le cadre du projet OSC, seront adaptés à une utilisation dans le domaine de la coulée continue.

Ces sous projets sont pilotés chacun par un industriel, et la coordination est effectuée par un Comité de Pilotage, composé d'un représentant de chaque partenaire (voir Figure 1-15).

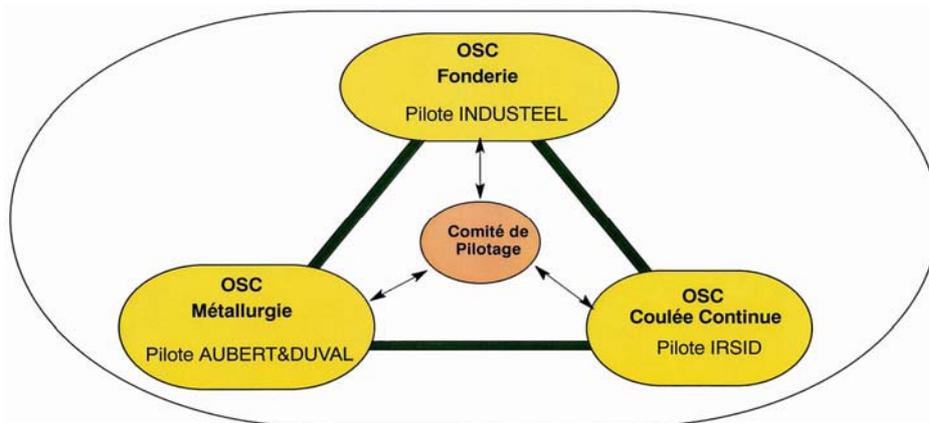


Figure 1-15 : Structure du projet OSC

Concernant plus spécifiquement le projet OSC – M dans lequel s'inscrit cette thèse, les travaux se divisent en plusieurs parties :

- perfectionnement de R2SOL, le logiciel de solidification 2D éléments finis développé au CEMEF
- développement des modèles «métallurgiques», et implantation dans le logiciel SOLID, logiciel 2D volumes finis développé au LSG2M
- validation des modèles,
- intégration des modèles de ségrégation dans le logiciel 3D THERCAST, logiciel de solidification 3D éléments finis développé au CEMEF, et validation des résultats.

Perfectionnement du logiciel R2SOL

Cette étude vise à améliorer l'efficacité du code en termes de temps de calcul, de précision et de place mémoire nécessaire (adaptation du maillage). Cette action, nécessaire

aussi à l'adaptation de R2SOL à la Coulée Continue, est prise en compte dans le projet OSC CC.

Développement des modèles métallurgiques et implantation

Il est prévu d'améliorer le modèle de prévision de la structure par l'étude de la formation des germes, de leur transport lié au mouvement du liquide, de leur survie, ainsi que par l'étude de la croissance et du mouvement des grains équiaxes issus de ces germes.

Par ailleurs, les alliages mis en œuvre par les industriels sont chargés en éléments chimiques et leur chemin de solidification est complexe. Des actions sont programmées pour pouvoir traiter la solidification des aciers fortement alliés.

Validations industrielles des modèles développés

Des pièces d'essais seront coulées en différentes nuances fortement alliées (nuances qui posent habituellement des problèmes). Ces pièces seront entièrement caractérisées. Des comparaisons avec le logiciel permettront de valider la justesse de ce dernier.

Intégration des modèles de ségrégation dans le logiciel 3D et validation

Il sera implanté dans THERCAST, les mêmes possibilités que dans R2SOL, en matière de calcul de macro et microségrégation et de traitement de la zone pâteuse.

1.4.2. Objectifs de l'étude

Objectif: simuler la solidification, supposée dendritique colonnaire, et la macroségrégation qui l'accompagne pour un lingot de taille industrielle en 3 dimensions dans un assemblage de moules et de réfractaires.

A partir de cet objectif principal très général, plusieurs points devront être remplis pour pouvoir considérer la capacité du logiciel à simuler la macroségrégation.

Parmi ces points secondaires, le premier est la prédiction correcte de l'écoulement dans la partie liquide et pâteuse. En effet, il est essentiel que le code soit capable de prédire correctement le champ de vitesse et aussi que cette résolution soit la plus efficace possible à la fois en temps de calcul mais aussi en terme d'utilisation de grands pas de temps et de taille de maillage nécessaire.

Ensuite la résolution du transport de soluté et le couplage avec la résolution thermique en enthalpie doit être réalisé à l'aide d'un module de transport et d'un module de microségrégation qui devront être construits de manière indépendante pour permettre une évolution plus aisée du code. En particulier le module de microségrégation doit pouvoir dans le futur être remplacé de manière modulaire par un modèle de microségrégation plus réaliste comme ceux introduits dans SOLID dans le cadre du projet OSC – M, ou ceux dont disposent déjà des sociétés industrielles comme ARCELOR par exemple.

Pour finir, les différents tests réalisés au cours de cette étude ont démontré la nécessité d'ajouter un module de remaillage. Il faudra donc aussi introduire une stratégie générale de remaillage adaptée à ce problème physique. Cette méthode devra idéalement être adaptable facilement à différentes configurations de lingots, peu coûteuse et raffiner efficacement le maillage pour ne pas avoir un accroissement trop important du nombre d'éléments.

Ces travaux sont effectués dans la continuité du développement du logiciel THERCAST au CEMEF. Au cours de cette thèse, nous n'avons bien entendu pas redéveloppé l'ensemble des modules de résolution. Nous sommes partis d'un noyau logiciel déjà existant à l'intérieur nous avons apporté de nouveaux, des améliorations ou des fonctions complémentaires. Ainsi le Tableau 1-2 récapitule les différents apports de ce travail au niveau du logiciel. Le symbole & signifie que cette partie a été réalisée en collaboration avec Victor Fachinotti, en postdoctorat au Cemef sur ce sujet durant ma première année de thèse, alors que le symbole * signifie qu'il l'a réalisé seul (toutefois cette partie s'intègre dans les développements pour la prédiction la macroségrégation).

L'implémentation des fonctionnalités présentées dans le Tableau 1-2 et l'analyse de bien d'autres points ont été nécessaires pour permettre une résolution efficace de la macroségrégation.

Dans la suite de ce manuscrit nous allons donc voir comment ces différents objectifs ont été abordés et quelles solutions ont été trouvées. Enfin nous essayerons d'évaluer à travers différentes simulations l'efficacité du logiciel.

Tableau 1-2 : Evolution des différentes parties du logiciel THERCAST au cours du projet macroségrégation

| Etat initial du logiciel | Modifications apportées pour la prédiction de la macroségrégation |
|---|--|
| Résolution thermique : Résolution upwind nodal en température Chemin de solidification fournit par l'utilisateur sous forme d'un tableau $g_i(T)$ | Résolution thermique : Résolution SUPG en température (*) Résolution SUPG en enthalpie (&) Prise en compte de l'eutectique (&) Implémentation de la méthode de line-search (*) Optimisation de la méthode de résolution Traitement des chocs thermiques (*) |
| Résolution mécanique : Résolution P1+/P1 upwind nodal | Résolution mécanique : Résolution P1+/P1 SUPG Résolution SUPG-PSPG (*) Semi-implication du terme de convection |
| Extraction de maillage | Résolution solutale : Résolution SUPG avec « splitting » (&) Module de macroségrégation (loi des leviers) (&) Intégration des données du diagramme de phase (&) Remaillage : Calcul des tailles de maille Coefficients d'anisotropie Optimisation du remaillage et extraction |

Chapitre 2 Modélisation et résolution numérique

| | | |
|------------|---|----|
| Chapitre 2 | Modélisation et résolution numérique..... | 35 |
| 2.1. | Problématique de la validation..... | 36 |
| 2.1.1. | Différents modèles à valider | 37 |
| 2.1.2. | Validation numérique..... | 40 |
| 2.1.3. | Validation expérimentale | 42 |
| 2.2. | Modélisation de la solidification : principales hypothèses..... | 44 |
| 2.3. | Résolution de la mécanique..... | 45 |
| 2.3.1. | Equations de la mécanique..... | 45 |
| 2.3.2. | Modélisation de la zone pâteuse..... | 46 |
| 2.3.3. | Résolution numérique des équations..... | 47 |
| 2.3.4. | Validation du modèle mécanique..... | 50 |
| 2.4. | Résolution de la thermique..... | 59 |
| 2.4.1. | Equations de conservation de l'énergie..... | 59 |
| 2.4.2. | Résolution en température et en enthalpie | 60 |
| 2.4.3. | Problème du choc thermique et son traitement | 61 |
| 2.4.4. | Résolution numérique avec stabilisation SUPG..... | 64 |
| 2.4.5. | Validation du modèle thermique | 67 |
| 2.5. | Résolution de la ségrégation | 70 |
| 2.5.1. | Modèle de microségrégation | 71 |
| 2.5.2. | Résolution du transport de soluté..... | 72 |
| 2.6. | Résolution couplée des équations | 73 |

Avant d'aborder les détails de la résolution numérique, il convient de rappeler brièvement l'histoire du logiciel THERCAST qui a servi de base logicielle à toute cette étude.

THERCAST est un code industriel de fonderie basé sur des maillages 3D tétraédriques et un modèle éléments finis. La version de base de THERCAST utilisée comme support pour nos développements inclut une résolution thermo-mécanique multi-domaines qui permet une prédiction des champs de température dans la pièce et dans les moules ainsi que les champs de contraintes et la formation des lames d'air et de la retassure. Un des avantages de cette approche multi-domaines est qu'elle utilise des maillages indépendants dans chacun des domaines ce qui évite d'imposer des maillages coïncidents aux interfaces. Pour plus de détails sur ce type d'approche, on pourra se reporter utilement à la thèse d'Olivier Jaouen [JAOUEN, 1998] ainsi qu'à la thèse de Frédéric Costes [COSTES, 2004] qui a étendu l'application de THERCAST à l'étude du refroidissement secondaire en coulée continue d'aciers. Frédéric Costes a introduit en particulier une fonctionnalité d'extraction de maillage qui sera utilisée dans ce travail.

Pour commencer nous étudierons la problématique de la validation dans le contexte de la solidification et plus particulièrement de la macroségrégation. Ensuite nous verrons successivement comment se déroule la résolution de la mécanique, de la thermique et du transport de soluté. Pour chacun de ces problèmes physiques nous présenterons d'abord les équations et la modélisation utilisée. Ensuite nous préciserons la résolution d'un point de vue numérique pour enfin conclure par une validation de notre approche par comparaison avec une solution analytique ou un autre logiciel. La méthode de couplage de ces équations sera ensuite discutée en profitant de l'expérience acquise sur le logiciel R2SOL ; code 2D éléments finis développé au CEMEF notamment au cours de la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005].

2.1. Problématique de la validation

Pour qu'un code de calcul puisse être utilisé de manière prédictive par des ingénieurs, il est nécessaire d'avoir une certaine confiance dans ses résultats. C'est dans cet optique que l'on introduit toujours une étape de validation lors des phases de développement d'un code de calcul. Ce type d'étude est particulièrement important pour des codes de calcul de sécurité nucléaire ou de contrôle aérien par exemple. La vérification d'un code a donc été analysée et structurée pour permettre la définition de normes et améliorer ainsi la qualité des codes de calcul. On pourra trouver une description claire et détaillée de certaines de ces procédures dans [ROY, 2005].

La validation des modèles et de la résolution numérique est donc une des étapes essentielles de la génération d'un code de calcul. La validation doit aussi s'accompagner d'une analyse des « réactions » du code sur différents cas tests de manière à calibrer une plage de fonctionnement optimale.

Ce type d'étude est complexe en particulier dans le cas de solidification car il n'existe pas beaucoup d'expériences bien instrumentées permettant une validation efficace des codes de calcul. De plus les modèles actuellement implantés dans les logiciels de simulation de solidification ne parviennent pas à représenter toute la complexité de ce phénomène. Seuls

certains aspects sont modélisés. D'autre part, la résolution de la solidification est une résolution fortement couplée entre la thermique, le transport de soluté et la mécanique. Or les erreurs numériques peuvent être grandement amplifiées par ces effets de couplage.

Dans cette partie nous allons essayer de parcourir les différents problèmes de validation qu'il serait intéressant de traiter pour être certain du bon fonctionnement du code et identifier de manière efficace son domaine d'application. La plupart de ces points n'ont pas pu être analysés de manière suffisamment précise mais il paraissait intéressant de les indiquer pour bien situer le niveau de validation de THERCAST et les points restant à traiter.

2.1.1. Différents modèles à valider

La première étape consiste à identifier des blocs à valider. Dans notre cas on peut différencier trois blocs principaux : la thermique, la mécanique et la partie solutale. Après l'analyse de ces modules fondamentaux, il s'ajoute une approche plus complexe qui prend en compte le couplage entre les phénomènes à travers la validation de la solidification et ensuite la macroségrégation. Ce processus de validation progressif présente l'avantage majeur d'être plus simple mais surtout plus vérifiable. En effet la résolution des équations de chacun des modules est indépendante et la validation de chaque module séparément est facilitée par l'existence de cas test dans la littérature pour chacun de ces domaines. Cette étape sert aussi à faire des comparaisons sur des cas académiques pour lesquels une solution précise existe voire même une solution analytique. Ainsi la qualité du code peut être plus facilement vérifiée. Nous allons maintenant parcourir successivement nos modules principaux et nos modélisations plus complexes en essayant d'identifier à chaque fois les points clés qui devraient être validés en priorité.

2.1.1.1. Résolution thermique

Les aspects thermiques pour la simulation de la macroségrégation ne sont pas extrêmement complexes et se limitent à la convection-diffusion de la chaleur et à la prise en compte du changement de phase. Il existe des solutions analytiques pour de nombreux cas de conduction thermique unidimensionnelle. Nous avons d'ailleurs utilisé une telle solution pour valider la formulation condsplit. Des solutions existent aussi pour des cas plus complexes. En particulier lors de la solidification des métaux, les propriétés thermiques, telles que la conductivité ou la capacité calorifique, sont modifiées par le changement de température et aussi par le changement de phase. Pour obtenir une solution plus réaliste il serait donc intéressant d'intégrer ces variations dans notre résolution. Cet aspect peut être validé par comparaison avec des résultats analytiques et semi-analytiques présentées par [OLIVER, 1987] et [RAMOS, 1992].

La validation de la partie conduction de la thermique se fait donc assez simplement à partir de solutions analytiques. Mais la validation de la partie convection de l'équation nécessite déjà l'introduction d'un couplage avec la mécanique. La validation de la convection naturelle se fait généralement à l'aide du benchmark défini par [DE VAHL DAVIS, 1983]. Ce cas de référence pour une cavité remplie d'air a été tout particulièrement étudié et sert donc de cas de validation standard. Cependant l'air a des propriétés très différentes des métaux et il n'est donc pas forcément judicieux d'utiliser ce cas pour valider notre code. Nous verrons par la suite d'autres exemples de la littérature qui tendent à se rapprocher de la solidification des métaux.

2.1.1.2. Résolution mécanique

La résolution de la mécanique dans un cas de solidification introduit des modifications de l'équation de Navier-Stokes classique. D'une part on ajoute un terme de Darcy variable en fonction de la position dans le domaine. D'autre part, la force motrice devient thermo-solutale avec l'intervention de la concentration dans le calcul des changements de densité dans l'approximation de Boussinesq. La validation de cette partie va donc se faire aussi progressivement en s'assurant que l'ajout de chacune de ces modifications ne conduit pas à des limitations du code ou à des problèmes numériques.

La première étape est la validation de la résolution des équations de Navier-Stokes en stationnaire. Le cas de validation standard est celui de la cavité carrée 2D déjà présentée dans ce chapitre et pour lequel il existe des solutions de référence (par exemple [GHIA, 1982]). L'étape suivante consiste en la comparaison des résultats de convection mais en utilisant des métaux et non plus de l'air comme dans la validation de la thermique. Wolff *et al.* [WOLFF, 1988] ont ainsi réalisé des mesures sur une petite cavité remplie d'un alliage Sn-Ga avec un gradient thermique entre les faces verticales et comparé leurs résultats numériques avec les mesures expérimentales. L'application d'un gradient de soluté en plus du gradient thermique permet alors d'étudier la convection thermo-solutale dans une cavité de référence comme pour le benchmark de De Vahl Davis. Dans [BERGMAN, 1996], l'étude est réalisée en utilisant un alliage Pb-Sn et en imposant un gradient thermique et solutal entre les deux faces verticales de la cavité carrée 2D. Il est alors possible d'étudier l'aspect transitoire de l'écoulement et l'évolution de la prédominance des termes thermiques et solutaux. L'écoulement peut être instable lorsque les effets thermiques et solutaux s'opposent ce qui complique les comparaisons même sur des cas simples comme ici. De très nombreuses études ont été menées sur la stabilité de tels systèmes mais il n'est pas nécessaire d'approfondir ce point dans notre cas car l'évolution de la solidification va de toute façon introduire un aspect transitoire qui ne permettra pas l'établissement durable d'une solution stable.

La seconde étape de la validation de la mécanique est l'introduction du traitement du milieu poreux. Nous avons choisi de le faire à l'aide d'un terme de Darcy. Il existe toutefois des formulations plus complexes mais, étant donné l'imprécision des données sur la perméabilité, il paraissait prématuré de complexifier le modèle. Les cas de référence trouvés dans la littérature combinent bien souvent le milieu poreux avec une convection thermo-solutale car l'intérêt sous-jacent est souvent la solidification ou plus généralement les changements de phase. On trouve ainsi des études numériques de cavité remplie d'un milieu poreux uniforme [GOYEAU, 1996] mais plus récemment la prise en compte de l'anisotropie du milieu poreux a été introduite ce qui modifie les transferts de chaleur et de masse ([BENNACER, 2001]). L'aspect transitoire de ce type d'écoulements a aussi été étudié en imposant un changement brusque de température sur les deux faces verticales (cf. [SAEID, 2004]). Enfin une solution analytique d'un écoulement en cavité poreuse a été proposée dans [DANIELS, 2004] pour les faibles nombres de Darcy et de Rayleigh. La solution a ensuite été obtenue par simulation numérique pour des nombres de Darcy et de Rayleigh plus importants. Ces exemples montrent bien que la prise en compte de la perméabilité provoque des changements non négligeables dans la solution. La stabilité de l'écoulement est différente et le couplage avec la convection thermo-solutale produit une solution d'autant plus complexe. Toutefois il manque encore un aspect particulièrement important dans ces cas de référence pour bien approcher la simulation de la solidification. En effet dans chacun de ces cas la perméabilité est supposée uniforme même si elle est anisotrope, alors que dans les systèmes métalliques en cours de solidification, la perméabilité dans la zone pâteuse varie très

rapidement et l'échelle de la zone pâteuse, où se situe ce milieu, est souvent très différente de l'échelle des boucles de recirculation dans le bain liquide du lingot. Cette différence d'échelle n'est pas abordée dans la validation sur ces cas académiques.

2.1.1.3. Résolution de la ségrégation

Enfin le dernier point particulièrement important est la résolution de la ségrégation. En fait cette notion recouvre plusieurs aspects. Dans les exemples présentés dans la résolution de la mécanique, on parlait déjà de convection thermo-solutale. A cette étape apparaissait donc déjà l'effet du soluté. Cependant sous cet aspect il n'intervenait que comme un terme moteur, avec une équation de convection-diffusion supplémentaire à résoudre. Toutefois lorsque l'on parle de ségrégation, on ajoute un aspect supplémentaire qui est la différence de concentration dans le liquide et le solide. Il convient alors de connaître comment les concentrations dans le liquide et dans le solide sont déterminées à partir de la température, de la fraction liquide, de la concentration moyenne. On introduit alors un modèle de microségrégation qui permet de déterminer cette relation localement. Ces relations induisent un couplage supplémentaire et très fort entre la résolution thermique et la résolution solutale. De plus la prise en compte de l'alliage, que nous supposons binaire pour simplifier le problème, nécessite la connaissance du diagramme de phase ou de données thermodynamiques permettant de connaître pour une température et une concentration moyenne, la fraction liquide. Dans notre cas nous utilisons des diagrammes de phase linéarisés mais il faut être conscient qu'il s'agit là d'une approximation plus moins précise suivant la plage d'utilisation du logiciel.

La validation du module de microségrégation s'effectue à partir de solutions 1D si l'on veut s'affranchir des problèmes liés au calcul de l'écoulement et au transport du soluté. Les articles [VOLLER, 1999] et [CHUNG, 2001] établissent des solutions auto-similaires et semi-analytiques pour de la solidification 1D. Ces calculs peuvent servir de référence pour une validation du modèle de microségrégation. Cependant pour pouvoir faire des comparaisons avec des résultats expérimentaux, qui induisent des réactions souvent plus complexes qu'un simple diagramme binaire comme pour l'acier par exemple, on s'oriente de plus en plus vers un couplage avec un modèle de microségrégation plus complexe couplé avec une base de données thermodynamiques. Ce type de couplage est présenté dans [PUSTAL, 2003] ou dans [THUINET, 2005]. Les résultats plus réalistes de ces types de modèles pourraient être très utiles pour estimer la marge d'erreur induite par les approximations de notre modèle de microségrégation.

2.1.1.4. Solidification

A plusieurs reprises nous avons vu que dans le processus de validation, l'aspect solidification apparaissait, d'une part parce que c'est l'origine de la ségrégation mais aussi parce que le changement de phase provoque la formation d'une zone pâteuse que nous représentons par un milieu poreux. Pour l'étude des changements de phase, actuellement aucun exercice de comparaison entre plusieurs codes n'a été défini. Ce type de comparaison permet en général d'identifier une solution de référence ou tout au moins de borner les variations et ainsi de situer les nouveaux codes de calcul par rapport à d'autres résultats. En particulier, à cette occasion, des simulations sur des maillages très fins sont parfois lancées ce qui fournit une solution précise. L'exemple de l'exercice de comparaison concernant la fusion [BERTRAND, 1999] est représentatif de ce que peut apporter ce type d'approche pour un cas de solidification.

Une autre approche pour la validation de la solidification d'un alliage binaire est la résolution semi-analytique d'un cas 1D. Cette solution proposée dans [CHAKRABORTY, 2002] permet d'obtenir une solution thermique tenant compte de l'intervalle de solidification et des éventuelles variations dans les propriétés thermiques du matériau. Cette validation peut être appliquée en particulier pour les premiers instants de la solidification alors que la convection est négligeable ou pour des problèmes où la convection est dominante.

Enfin une dernière approche consiste à obtenir une solution stationnaire dans une cavité en solidification, en imposant des températures latérales inférieure et supérieure à la température de solidus et à la température de liquidus respectivement. Il est ainsi possible, mais pas certain, que le front de solidification se stabilise. L'expérience menée dans [BECKERMANN, 1988] utilise ainsi une petite cavité remplie de Gallium. L'instrumentation permet alors de récupérer des profils de température et des champs de vitesse. Ces données sont ensuite comparées avec le modèle numérique.

Ces trois approches différentes donnent un aperçu de la manière de valider la résolution de la solidification pour un code numérique.

2.1.1.5. Macroségrégation

En dernier vient la validation de la résolution de la macroségrégation. La comparaison avec des résultats et des expériences est possible, on se reportera à ce propos aux références fournies dans le chapitre d'introduction dans le paragraphe concernant l'état de l'art. Il n'existe toutefois actuellement aucune expérience bien instrumentée, aux conditions aux limites précisément connues et qui puisse fournir une référence indiscutable pour la validation des codes de macroségrégation. Ainsi plusieurs expériences sont menées et servent à valider chaque code en particulier mais la comparaison n'est pas toujours facile. Ainsi [SINGH, 2001] présente des résultats de macroségrégation pour l'expérience simple définie dans l'article mais il n'y a pas de comparaison effective avec des mesures expérimentales. La validation de la macroségrégation s'oriente donc vers une autre voie qui consiste en la définition d'un cas théorique permettant une comparaison efficace des codes de calcul entre eux. L'analyse d'une cavité cubique dans [CHAKRABORTY, 2003] est ainsi un premier pas vers l'identification d'un cas 3D pouvant servir de benchmark pour une validation des codes de macroségrégation.

2.1.2. Validation numérique

Dans les paragraphes précédents nous avons vu les différentes parties à valider et indiqué quelques références bibliographiques comme support de ce travail de validation. Nous allons maintenant discuter de l'intérêt des trois types de comparaisons possibles pour une validation de logiciel de simulation comme le nôtre. La validation peut se faire en comparaison avec des solutions analytiques, des cas de référence ou des cas réels. Le passage d'une solution à l'autre induit des changements majeurs dans l'interprétation des résultats, c'est ce que nous allons essayer de décrire ici.

2.1.2.1. Comparaison avec des solutions analytiques

La comparaison avec une solution analytique est primordiale pour pouvoir certifier la qualité d'une résolution numérique. L'exactitude des valeurs de la solution de référence ne

pouvant pas être mise en doute, il est alors possible d'évaluer l'erreur induite par la résolution numérique, vérifier la convergence en fonction du maillage, l'effet du pas de temps dans la résolution pour les calculs transitoires, etc. Ces comparaisons obtenues à partir d'une solution analytique sont souvent essentielles pour déterminer la stabilité du code ou sa précision. Mais les solutions analytiques n'existent que pour des cas simples parfois très éloignés de la réalité du procédé et il est donc nécessaire de faire des extrapolations. Le risque est alors d'avoir un code qui fonctionne bien sur des cas simples mais qui, appliqué à des problèmes concrets, rencontre des problèmes numériques. Par exemple la densité de maillage nécessaire pour obtenir une bonne solution est facilement atteinte pour un cas académique simple mais peut être très difficile sur un cas réel à cause d'un changement d'échelle ou de la complexité du domaine. Ainsi si cette étape est nécessaire, elle n'est pas suffisante pour valider un code. En particulier il n'existe pas de solution analytique pour les écoulements régis par l'équation de Navier-Stokes dans une cavité. Or nous connaissons le rôle primordial de l'écoulement dans la formation de la macroségrégation, il ne paraît donc pas réaliste de se limiter à cette analyse.

2.1.2.2. Comparaison avec des cas de référence

Pour combler les lacunes de l'analyse par des solutions analytiques, on complète le processus de validation par des comparaisons sur des cas de référence. Ces cas ont la particularité d'être en général très simplifiés aussi bien au niveau de la géométrie, que des conditions aux limites ou pour les propriétés des matériaux. Le but de ces cas est de fournir des solutions plus physiques tout en contrôlant au maximum les paramètres de la simulation. Toutefois on ne peut alors faire que des comparaisons avec d'autres solutions numériques ou des corrélations (pour des coefficients de transfert aux parois par exemple). Le calibrage précis de ces cas de référence peut permettre aussi de tester la sensibilité sur différents paramètres puisque les calculs sont encore en partie déconnectés des matériaux et procédés réels. Toutefois on cherche au maximum à utiliser des données proches des expériences pour pouvoir faire au minimum des comparaisons qualitatives, identifier des tendances similaires. Mais le principal intérêt de ces cas est de tester la qualité de la résolution en interne en lançant de nombreuses simulations avec le code de calcul et aussi en externe en comparant sur des données précises (et fiables puisqu'elles sont fixées arbitrairement) avec d'autres codes de calcul.

Les avantages de cette approche sont donc de permettre des simulations simples sur des cas proches des cas réels, en s'affranchissant des problèmes de mise en données et aussi généralement des écarts entre la modélisation et la physique réelle. Cependant il peut aussi être intéressant de tester l'effet du modèle utilisé sur les résultats. Ainsi une comparaison de macroségrégation sur un lingot identique entre une simulation utilisant un modèle de solidification colonnaire et une simulation de solidification équiaxe peut apporter des contributions très intéressantes. L'inconvénient persistant est bien entendu l'absence de comparaison avec des mesures expérimentales qui permettraient de valider complètement les résultats. Mais la mise en place et l'instrumentation d'un lingot est très coûteuse alors que ce type de comparaison purement numérique peut être réalisée beaucoup plus simplement.

2.1.2.3. Comparaison avec des cas réels

La comparaison avec des cas réels est la plus pertinente pour valider un code de calcul. On peut différencier deux types de cas, le premier correspond à une expérience de laboratoire instrumentée. Par opposition le second est une mesure effectuée sur un cas industriel. Dans ce cas là, il est plus difficile d'instrumenter le lingot puisque le design n'est pas prévu pour. De

plus dans notre cas les lingots industriels coulés ont des masses de plusieurs tonnes et il n'est donc pas possible d'effectuer de nombreux essais pour tester la reproductibilité des résultats, le coût étant prohibitif.

Les cas étudiés en laboratoire sont généralement de dimensions beaucoup plus faibles, or il est difficile d'extrapoler les résultats à des échelles plus importantes. Les vitesses dans le liquide sont beaucoup plus faibles et le type de solidification peut aussi être très différent. La transition colonnaire équiaxe pouvant intervenir différemment ou même pas du tout pour certains petits lingots.

En effet lorsque l'on commence à réaliser des expériences sur des cas réels, on ne contrôle plus finement le procédé et la physique de la solidification devient plus complexe. Non seulement la transition équiaxe colonnaire devrait être prise en compte mais encore le retrait, la formation de lame d'air, la déformation des moules, l'étape de remplissage, etc. L'ensemble de ces points ne peut pas, actuellement, être simulé simultanément. Le modèle utilisé est donc limité à certains aspects. Cette faiblesse diminue alors de beaucoup l'intérêt des comparaisons avec des résultats expérimentaux en particulier sur des cas industriels. Les cas de laboratoire permettent encore un certain contrôle ce qui permet de réaliser des expériences qui correspondent aux modèles implémentés dans le code de calcul.

L'inconvénient des comparaisons sur des cas réels est donc double, d'une part la difficulté de mesure et de connaissance des conditions aux limites et d'autre part les problèmes de validité du modèle. Mais c'est aussi l'avantage de cette comparaison de pouvoir tester notre modèle et de déterminer quels types de macroségrégation peuvent être prédites efficacement en l'appliquant.

2.1.3. Validation expérimentale

L'étape finale de toute validation est la comparaison avec des résultats expérimentaux qui permettent de déterminer le degré d'efficacité de la simulation et aussi la pertinence des modèles employés pour obtenir cette solution numérique. Dans le cas de la macroségrégation, cette étape est particulièrement difficile pour plusieurs raisons. La première est la difficulté d'obtenir des données matériaux précises aussi bien pour les contacts entre le lingot et les moules que pour la rhéologie de l'alliage ou pour l'approximation de la zone pâteuse comme un milieu poreux. La seconde raison est la limitation intrinsèque de la modélisation utilisée ici qui ne permettra pas de représenter efficacement le processus industriel. Nous allons aborder successivement ces deux points et voir comment dépasser ces limitations pour produire des comparaisons avec des expériences.

2.1.3.1. Identification des paramètres

Pour appliquer de manière efficace un modèle à un cas physique, il est nécessaire de posséder des données aussi complètes et précises que possible. Cela est particulièrement difficile pour la solidification car de nombreux paramètres sont difficiles à mesurer. La perméabilité par exemple est un paramètre important du modèle qu'il est très difficile de mesurer. Dans le chapitre d'introduction, ce point a déjà été abordé et il y a été montré la grande variabilité des modèles couramment utilisés. On pourra joindre à cette analyse de la perméabilité le travail présenté dans [HAN, 2003], où a été réalisée une expérience pour mesurer la perméabilité d'une zone de grains équiaxe d'un alliage Aluminium-Silicium. L'objectif étant de déterminer une constante du modèle de Carman-Kozeny. Cette expérience simplifiée est déjà difficile à mener, on comprend alors qu'une étude de la perméabilité dans un lingot en train de se solidifier serait considérablement plus difficile à mettre en place. C'est

pourquoi les données de perméabilité validées sur des cas simples ne sont pas forcément transposables aisément dans les zones pâteuses des lingots.

Parmi les autres paramètres difficiles à préciser, les conditions de contact entre la pièce et les moules sont particulièrement déterminantes pour les vitesses de solidification. Plusieurs auteurs se sont intéressés à ce problème, des mesures sur des lingots ont été réalisées, des analyses menées pour trouver un coefficient de transfert acceptable (par exemple [LOULOU, 1999]). Mais il reste difficile de calculer a priori la valeur de la résistance de contact dans un cas général d'autant que l'état de surface est très important et pas forcément connu avec précision. Cet exemple montre toutefois l'intérêt de l'analyse inverse pour certains paramètres de la simulation. D'autres paramètres pourraient être déterminés de manière similaire à partir du moment où il est possible d'obtenir des mesures expérimentales précises et adaptées.

L'importance des données matériaux peut être mise en évidence de différentes manières. Une approche consiste à tester un cas simple et standardisé avec différents matériaux [SINGH, 2001]. On obtient ainsi une série de résultats qui montrent l'effet des changements de matériaux sur la solution numérique et éventuellement expérimentale. Cela peut conduire à une analyse des sensibilités mais aussi à une compréhension de l'évolution de la température en paroi qui peut être complètement différente et donc réduire l'importance d'un coefficient de transfert pariétal. Il devient alors aussi possible d'anticiper les effets de changements de matériaux sur d'autres cas. Cette analyse a l'avantage d'être réalisée sur un cas simple pour lequel les mesures sont possibles, d'autre part le fait d'utiliser différents matériaux permet une variation des paramètres qui n'est pas seulement numérique comme peut l'être une étude de sensibilité. On peut ainsi identifier les limites du code.

Les imprécisions sur les données matériaux et autres conduisent à des erreurs dans les résultats de simulation. Il est donc important de connaître la sensibilité des résultats à différents paramètres. Dans [MAJCHRZAK, 2004], une telle étude est menée sur la variation du coefficient de diffusion et de partition et sur ces conséquences pour la macroségrégation. Toutefois de nombreux autres paramètres nécessiteraient des études de sensibilité dans notre code pour bien identifier les tendances et connaître les exigences en terme de précision sur les données d'entrée pour obtenir une certaine qualité dans la solution finale. Cette étape est nécessaire pour ensuite effectuer des études d'optimisation de procédés pour lesquelles les données disponibles présentent des marges d'erreur.

2.1.3.2. Adéquation du modèle et de la réalité physique

La modélisation employée dans notre code présente de nombreuses limitations. Du fait de la complexité des phénomènes en jeu, des choix ont été faits pour produire une solution numérique à partir d'un modèle relativement simple. La première limitation vient du modèle utilisé qui ne prend en compte que la solidification de type dendritique colonnaire. Or, dans la plupart des lingots coulés par nos partenaires industriels, la zone équiaxe est très importante et impose donc une macroségrégation différente. Notre modèle est aussi limité par plusieurs aspects comme par exemple la prise en compte d'un espacement interdendritique constant alors que dans les observations il augmente au cours de la solidification. La non prise en compte de l'étape de remplissage est aussi un point critique. Nous pouvons donc voir qu'il reste encore beaucoup d'étapes à franchir avant d'atteindre une simulation qui prenne en compte toute la complexité du processus industriel et soit apte à reproduire fidèlement les résultats expérimentaux.

Actuellement des travaux sont en cours dans plusieurs laboratoires, y compris au CEMEF et au LSG2M, pour traiter efficacement la solidification équiaxe et bien représenter le mouvement des grains. Cependant ces simulations sont difficiles puisque qu'il n'est pas réaliste de vouloir simuler le déplacement de chaque grain dans un lingot industriel qui en compte au moins plusieurs milliards.

Parallèlement des logiciels simulent le remplissage des moules et prédisent donc une première solidification lors de cette étape. Mais la ségrégation n'est pas étudiée dans cette étape où les efforts de recherche se concentrent plus dans le traitement de la surface libre qui pose des problèmes importants.

Enfin la déformation mécanique de la pièce au cours de la solidification est réalisée en utilisant une thermique simple et des lois de comportement peu réalistes. Toutefois cette approximation permet de calculer la formation de lame d'air et de mettre en évidence les changements de régime thermique qu'elle impose.

Ces différents exemples montrent bien à quel point la simulation de la solidification de lingot est fragmentée. La prise en compte de l'ensemble de ces phénomènes dans une même simulation est actuellement irréaliste. Les résolutions numériques sont optimisées pour chacun des cas et les formulations sont donc dépendantes du problème étudié. La fusion de l'ensemble de ces simulations sera nécessaire pour obtenir une simulation réaliste et représentative de la complexité du processus de solidification en lingots.

2.2. Modélisation de la solidification : principales hypothèses

La fonderie est un procédé complexe dans lequel interviennent des échelles et des phénomènes très différents. La modélisation présentée ici a pour but de reproduire un type bien particulier de solidification : la solidification dendritique colonnaire. Ce choix nous conduit à des hypothèses très fortes sur la modélisation physique. La première et la plus importante de ces hypothèses est que le solide est considéré comme fixe car les dendrites sont considérées comme accrochées à la paroi.

Hypothèse 1 : Solidification dendritique colonnaire $V_s=0$

La solidification de notre alliage se produit sur un intervalle de température ce qui conduit à l'apparition d'une zone pâteuse comprenant du liquide et du solide. Cette zone est, dans notre cas, constituée d'un squelette de dendrites à la forme très complexe. On représentera ce milieu hétérogène comme un milieu poreux isotrope dont la perméabilité suit la loi de Carman-Kozeny. D'autres modèles ont été développés qui permettent de prendre en compte par exemple l'anisotropie ou des informations sur la surface spécifique comme on a pu le voir dans le chapitre d'introduction. Toutefois le recalage de ces modèles sur des expériences est très difficile et il est apparu plus simple d'utiliser un modèle déjà largement employé.

Hypothèse 2 : Zone pâteuse équivalente à un milieu poreux isotrope de perméabilité définie par la relation de Carman-Kozeny

Lors de la solidification de certains alliages, il se produit parfois la formation de bulles de gaz à l'intérieur même du matériau en train de se solidifier ce qui conduit à des porosités. Une autre source de porosité est aussi due au retrait de changement de phase qui conduit à l'apparition de vide qui est normalement comblé par du liquide provenant du bain liquide. Il arrive cependant que ce liquide ne puisse traverser la zone pâteuse, du fait d'une perméabilité trop faible, ce qui entraîne la formation de porosités. Ces deux phénomènes physiques ne sont pas simulés dans notre logiciel et nous prendrons donc l'hypothèse que le milieu est toujours saturé et ne contient aucun vide.

Hypothèse 3 : Milieu saturé, aucune porosité $g_l+g_s=1$

Lors de la solidification, la masse volumique du matériau peut changer de manière importante ce qui conduit souvent à la formation de lame d'air et à des retassures. Toutefois dans notre modèle nous ne tiendrons pas compte de ces variations de masse volumique dues à la solidification. Les seules variations de masse volumiques prises en compte seront celles qui interviennent dans le terme de gravité à l'origine de la convection thermo-solutale.

Hypothèse 4 : Masse volumique constante $\rho_l=\rho_s$, pas de retrait

De manière similaire, les propriétés thermiques du matériau seront considérées constantes. Leurs variations ne jouent pas un rôle prépondérant dans le phénomène que nous souhaitons simuler et il ne nous apparaît donc pas nécessaire dans un premier de prendre en compte ces variations.

Hypothèse 5 : Propriétés thermo-physiques constantes (conductivité thermique et chaleur massique)

Ces hypothèses sont primordiales dans notre modèle mais d'autres hypothèses plus spécifiques les complèteront par la suite. En particulier des hypothèses fortes sur les propriétés du matériau ou le modèle de microségrégation seront présentées par la suite.

2.3. Résolution de la mécanique

Dans ce paragraphe nous allons voir comment est résolu le problème mécanique. Après avoir posé les équations, nous verrons comment est traité le milieu poreux par l'introduction d'un terme de Darcy et quelles en sont les conséquences numériques. Ensuite différents schémas de résolution seront présentés et testés sur un cas académique.

2.3.1. Equations de la mécanique

Dans notre modèle le solide est fixe et nous allons donc représenter le métal liquide comme un fluide newtonien. Rappelons que nous supposons ici que la masse volumique et la viscosité dynamique sont constantes et donc indépendantes de la température. Notre calcul ne fera donc pas apparaître de retrait pendant la solidification.

D'après la loi des mélanges [BENNON, 1987], les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (2.3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \times \mathbf{V}) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla \mathbf{V} \right) - \frac{\mu_l}{K} \frac{\rho}{\rho_l} \mathbf{V} - \nabla P + \rho_l B_l$$

où B_l est la force volumique qui s'applique sur la liquide, dans notre cas, il ne s'agit que de la gravité. On applique ensuite sur ces équations nos hypothèses. Alors les équations macroscopiques prennent alors la forme simplifiée suivante :

Conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (2.3.2)$$

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{D}{Dt} (\rho_0 \mathbf{V}) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho_0 \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{V} \times \mathbf{V}) = \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{V}) - \frac{\mu}{K} \mathbf{V} - \nabla P + \tilde{\rho} \mathbf{g} \quad (2.3.3)$$

où $\tilde{\rho}$ est la densité prenant en compte l'effet de dilatation thermique et solutale pour simuler la convection thermo-solutale. On applique l'hypothèse de Boussinesq et donc la valeur de la densité n'est modifiée que dans le terme de gravité.

$$\tilde{\rho} = \rho_0 (1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_c (c - c_0)) \quad (2.3.4)$$

2.3.2. Modélisation de la zone pâteuse

La zone pâteuse est modélisée par un milieu poreux isotrope. La prise en compte de ce milieu poreux conduit à l'addition d'un terme de Darcy dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, comme le montre l'équation (2.3.3).

Dans cette équation K est la perméabilité du milieu poreux. Pour calculer cette perméabilité nous avons choisi d'utiliser la relation de Kozeny-Carman :

$$K = \frac{(1 - g_s)^3 \lambda_2^2}{\pi^2 k \tau^2 g_s^2} \quad (2.3.5)$$

où λ_2 est l'espacement interdendritique secondaire, k une constante égale à 5, τ la tortuosité du milieu poreux et g_s la fraction solide.

L'ajout de ce terme complique beaucoup la résolution car il varie très rapidement avec la fraction solide. Ainsi pour bien reproduire l'écoulement il est nécessaire que la variation de fraction liquide ne soit pas trop grande dans un élément. En effet lors de la discrétisation la valeur de K sera calculée aux points d'intégration (nous en prenons 4 pour ce terme) et sur chacun des volumes associés à ces points d'intégration la perméabilité est prise constante. De trop grandes discontinuités entre ces valeurs peuvent alors créer des problèmes de convergence de la solution en produisant une matrice très mal conditionnée. Il est donc nécessaire d'avoir un maillage fin dans la zone pâteuse pour bien représenter l'écoulement.

2.3.3. Résolution numérique des équations

A partir des équations macroscopiques, nous allons maintenant déterminer la forme faible du problème pour ensuite le résoudre sur un maillage non structuré (par défaut car l'utilisation de maillages structurés est possible) composé d'éléments tétraédriques. La Figure 2-1 illustre la discrétisation spatiale pour un élément P1+/P1 qui est à la base des premiers développements dans THERCAST.

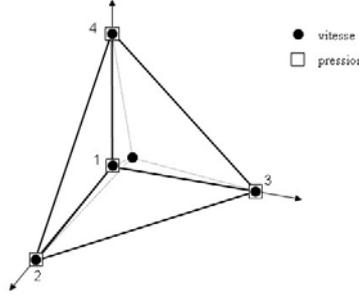


Figure 2-1 : Schéma décrivant l'élément tétraédrique P1+/P1

Plusieurs approches seront présentées dans les paragraphes qui suivent. En effet, au cours des tests effectués pour valider le fonctionnement du module mécanique, il est apparu que l'approche classique de THERCAST (P1+/P1 upwind nodal) semblait rencontrer des problèmes d'instabilités. Nous avons donc implémenté deux autres approches et les avons ensuite testées sur le cas test de la cavité entraînée pour évaluer leur robustesse. La première approche introduite ajoute une stabilisation SUPG à une formulation bulle eulérienne, évitant ainsi l'étape de transport des variables. La seconde méthode s'affranchit de l'élément bulle et utilise un élément P1/P1 avec trois paramètres de stabilisation.

2.3.3.1. Approche P1+/P1 classique

La première approche décrite ici est la formulation utilisée classiquement dans THERCAST au cours des précédents travaux. On pourra trouver une description plus complète de cette méthode dans [BELLET, 2004a]. Dans cette résolution on utilise la dérivée particulaire de la vitesse. Cela impose de calculer, après la résolution de la mécanique, une étape de transport de la valeur à la position précédente de la particule en chaque nœud du maillage. A partir de l'équation (2.3.3), on obtient la forme faible du problème :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \rho_0 \frac{D(\mathbf{V} + \mathbf{V}_b)}{Dt} d\Omega + \int_{\Omega} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{w}) : \mathbf{s}(\mathbf{V}) d\Omega - \int_{\Omega} P \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \tilde{\rho} \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \frac{\mu}{K} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \rho_0 \frac{D(\mathbf{V} + \mathbf{V}_b)}{Dt} d\Omega + \int_{\Omega} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{w}_b) : \mathbf{s}(\mathbf{V}) d\Omega - \int_{\Omega} P \nabla \cdot \mathbf{w}_b d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \tilde{\rho} \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \frac{\mu}{K} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = \quad (2.3.6) \\ \int_{\Omega} \varphi_P \nabla \cdot (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = 0 \end{aligned}$$

où \mathbf{w} est la fonction test de la vitesse linéaire, \mathbf{w}_b de la composante bulle de la vitesse et φ_P de la pression.

Nous voyons apparaître dans cette équation deux fonctions test qui pour ce schéma sont prises égales aux fonctions d'interpolation dans l'élément. Par contre, la fonction bulle est plus particulière puisqu'elle varie linéairement du centre vers les nœuds de l'élément entre

1 au centre et 0 aux noeuds sur chaque sous-élément. L'ajout de ce terme bulle permet de rendre l'élément stable mais cela ajoute une équation supplémentaire.

Toutefois au cours de notre résolution, nous ne calculons pas la composante bulle V_b du champ de vitesse. Il est en effet possible d'effectuer la condensation de ce terme et de réduire le système matriciel aux deux variables V et P comme le montre la formule suivante (pour plus de précision se reporter à [JAOUEN, 1998] ou [BELLET, 2004a]) :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ll} & \mathbf{K}_{lb} & \mathbf{K}_{lp} \\ \mathbf{K}_{bl} & \mathbf{K}_{bb} & \mathbf{K}_{bp} \\ \mathbf{K}_{pl} & \mathbf{K}_{pb} & \mathbf{K}_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{V} \\ \delta \mathbf{V}_b \\ \delta \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_l \\ \mathbf{R}_b \\ \mathbf{R}_p \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{ll} - \mathbf{K}_{lb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bl} & \mathbf{K}_{lp} - \mathbf{K}_{lb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bp} \\ \mathbf{K}_{pl} - \mathbf{K}_{pb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bl} & \mathbf{K}_{pp} - \mathbf{K}_{pb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{K}_{bp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \mathbf{V} \\ \delta \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_l - \mathbf{K}_{lb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{R}_b \\ \mathbf{R}_p - \mathbf{K}_{pb} \mathbf{K}_{bb}^{-1} \mathbf{R}_b \end{bmatrix} \quad (2.3.7)$$

2.3.3.2. Approche P1+/P1 avec stabilisation SUPG

L'expression de la forme faible de l'équation (2.3.3) est quasiment identique à la formulation précédente la seule différence est que nous avons développé l'expression du terme de dérivée particulaire. En effet dans cette résolution, nous allons effectuer une résolution eulérienne qui nous évitera donc l'étape de transport des variables qui est la cause des problèmes rencontrés avec la méthode de résolution précédente.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \rho_0 \left(\frac{\partial (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b)}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \hat{\mathbf{e}}(\tilde{\varphi}) : \mathbf{s}(\mathbf{V}) d\Omega - \int_{\Omega} P \nabla \cdot \tilde{\mathbf{w}} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \tilde{\rho} \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \frac{\mu}{K} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = 0 \\ & \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \rho_0 \left(\frac{\partial (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b)}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right) d\Omega \\ & + \int_{\Omega} \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{w}_b) : \mathbf{s}(\mathbf{V}) d\Omega - \int_{\Omega} P \nabla \cdot \mathbf{w}_b d\Omega - \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \tilde{\rho} \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{w}_b \cdot \frac{\mu}{K} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = 0 \\ & \int_{\Omega} \varphi_p \nabla \cdot (\mathbf{V} + \mathbf{V}_b) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

La seconde modification de l'équation est l'apparition d'une fonction test différente mais seulement pour la partie linéaire de la vitesse, la fonction test de la bulle reste inchangée. C'est ici qu'intervient la stabilisation SUPG. Cette nouvelle fonction test est définie de la manière suivante :

$$\tilde{\mathbf{w}}_i = N + \tau_{SUPG} \mathbf{V}_{elt} \cdot \nabla N \quad (2.3.9)$$

où $\tilde{\mathbf{w}}_i$ est la composante du vecteur suivant l'axe i , N est la fonction d'interpolation de l'élément et \mathbf{V}_{elt} la vitesse liée à l'élément que nous prendrons au centre de l'élément. τ_{SUPG} est le coefficient de stabilisation (cf. [BROOKS, 1982] et [TEZDUYAR, 2000]).

Le calcul du coefficient τ_{SUPG} , décrit dans l'équation (2.3.10), fait intervenir trois termes différents. Le premier terme correspond à l'aspect transitoire de la solution, la partie linéaire en V et il apparaît donc aussi l'influence du terme de Darcy. Le second terme correspond à la prise en compte de la convection et le dernier terme à la diffusion.

$$\tau_{SUPG} = \left[\left(\frac{2 \left(1 + \Delta t \frac{\mu}{\rho_0 K} \right)}{\Delta t} \right)^2 + \left(\frac{2 \|\mathbf{V}_{elt}\|}{h_{elt}} \right)^2 + \left(\frac{4\mu}{h_{elt}^2} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (2.3.10)$$

où h_{elt} est la taille de l'élément dans la direction de la vitesse, calculée de manière similaire à celle présentée en thermique SUPG.

2.3.3.3. Approche P1/P1 avec stabilisation SUPG-PSPG

La dernière formulation introduite dans THERCAST utilise l'élément P1/P1. Cette formulation est présentée plus en détail dans l'article [TEZDUYAR, 2000]. La forme faible des équations est très similaire à celle de la formulation précédente sans l'équation pour la bulle. Deux termes de stabilisation sont ajoutés le premier dans l'équation de la quantité de mouvement en faisant intervenir le coefficient τ_{LSIC} et le second dans l'équation de conservation de la masse en faisant intervenir le coefficient τ_{PSPG} . On obtient alors l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \rho_0 \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \tau_{LSIC} (\nabla \cdot \mathbf{w}) \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{V} d\Omega \\ + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{w}) : \mathbf{s}(\mathbf{V}) d\Omega - \int_{\Omega} P \nabla \cdot \tilde{\mathbf{w}} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \tilde{\rho} \mathbf{g} d\Omega + \int_{\Omega} \tilde{\mathbf{w}} \cdot \frac{\mu}{K} \mathbf{V} d\Omega = 0 \quad (2.3.11) \\ \int_{\Omega} \varphi_P \nabla \cdot \mathbf{V} d\Omega + \int_{\Omega} \left(\frac{\tau_{PSPG}}{\rho_0} \nabla \varphi_P \right) \cdot \left(\rho_0 \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho_0 (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} + \nabla P - \tilde{\rho} \mathbf{g} + \frac{\mu}{K} \mathbf{V} \right) d\Omega = 0 \end{aligned}$$

où τ_{PSPG} est le terme de stabilisation de la pression (Pressure-Stabilizing/Petrov-Galerkin) et τ_{LSIC} est le terme de stabilisation pour l'équation de la continuité (Least Squares on Incompressibility Constraint).

Les coefficients de stabilisation sont calculés à partir de l'équation (2.3.10) et d'après les formules suivantes :

$$\begin{aligned} \tau_{PSPG} &= \tau_{SUPG} \\ \tau_{LSIC} &= \frac{h_{elt}}{2} \|\mathbf{V}_{elt}\| \cdot \zeta \quad \zeta = \begin{cases} \text{Re}/3 & \text{si } \text{Re} \leq 3 \\ 1 & \text{si } \text{Re} > 3 \end{cases} \quad (2.3.12) \end{aligned}$$

où $\text{Re} = \frac{\|\mathbf{V}_{elt}\| h_{elt} \rho_0}{2\mu}$ est le nombre de Reynolds pour l'élément et h_{elt} donné par (2.4.18).

Après cette présentation des trois formulations que nous avons implémentées et testées dans THERCAST, nous allons nous intéresser à la discrétisation temporelle du terme de convection et à la validation de ces formulations.

Pour avoir plus d'informations sur les méthodes de stabilisation, on pourra se reporter au rapport très intéressant de Fries *et al.* [FRIES, 2004] qui décrivent de manière détaillée cette problématique.

2.3.3.4. Schéma de discrétisation du terme de convection

La stabilisation SUPG fait intervenir une vitesse liée à l'élément. Il est donc possible de calculer cette vitesse de manière implicite ou explicite. A l'instar de Tezduyar, Nous avons choisi dans tous les modèles qui suivent de prendre cette vitesse explicite, nous pensons en effet que la vitesse au centre de l'élément doit peu varier.

Par contre, la discrétisation temporelle du terme de convection est plus complexe, il est en effet possible de résoudre de manière implicite tout ou partie de cette expression. Dans THERCAST, trois types de discrétisations temporelles ont été implémentés pour le codage du terme de convection :

- complètement explicite : $(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = (\mathbf{V}^t \cdot \nabla)\mathbf{V}^t$ (appliqué pour la formulation P1+/P1 avec stabilisation SUPG)
- semi-implicite: $(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = (\mathbf{V}^t \cdot \nabla)\mathbf{V}^{t+\Delta t}$ (appliqué pour la formulation P1+/P1 avec stabilisation et la formulation SUPG-PSPG)
- implicite: $(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = (\mathbf{V}^{t+\Delta t} \cdot \nabla)\mathbf{V}^{t+\Delta t}$ (appliqué pour la formulation SUPG-PSPG)

Nous aurons donc au final 5 formulations possibles que nous identifierons comme suit :

Upwind nodal : formulation P1+/P1 classique

Bulle-E : formulation P1+/P1 avec stabilisation SUPG et terme de convection explicite

Bulle-SI : formulation P1+/P1 avec stabilisation SUPG et terme de convection semi-implicite

PSPG-SI : formulation P1/P1 avec stabilisation SUPG-PSPG et terme de convection semi-implicite

PSPG-I : formulation P1/P1 avec stabilisation SUPG-PSPG et terme de convection implicite

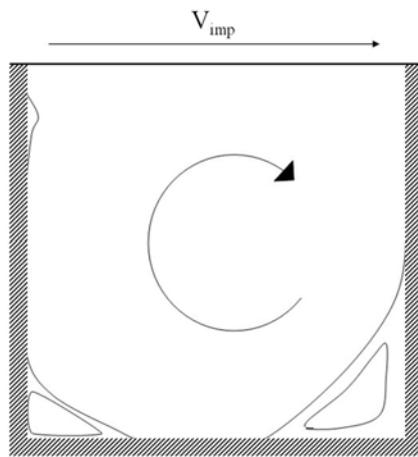
On peut remarquer que toutes ces formulations sont linéaires sauf la dernière. Cependant dans nos calculs nous n'effectuerons qu'une seule itération dans la résolution de Newton-Raphson de ce système.

Pour chacune de ces méthodes, nous avons essayé d'identifier la sensibilité au pas de temps et à la taille de maille sur un cas académique. Cette validation et l'analyse des méthodes sont présentées dans le paragraphe suivant.

2.3.4. Validation du modèle mécanique

La validation de la mécanique est très couramment faite par comparaison avec une solution de référence obtenue sur un cas académique. Nous avons choisi à cet effet le cas classique de la cavité entraînée avec, comme solution de référence, la publication suivante [GHIA, 1982]. La géométrie de la cavité est présentée sur la Figure 2-2. D'autre part, pour rendre plus lisible nos résultats, nous ne présenterons ici que les résultats obtenus sur des maillages structurés réguliers et pseudo-2D (cf. exemple de maillage sur la Figure 2-3), des résultats similaires ont été obtenus sur des maillages non structurés. Nous identifierons nos maillages de la manière suivante : m41 correspond à un maillage comprenant 41 nœuds en x, 41 nœuds en z et 2 nœuds en y soit dans l'épaisseur de la pièce. Pour ce cas académique, il existe une solution stationnaire. Nous comparerons donc nos résultats après que notre solution

instationnaire ait convergé. Nous estimons la convergence de la solution en admettant une variation relative maximale de 10^{-5} sur la valeur de la vitesse.



Données utilisées pour $Re=400$:

$$\rho = 40 \text{ kg m}^{-3}$$

$$\mu = 10^{-4} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$D = 0.1 \text{ m}$$

$$V_{\text{imp}} = 0.01 \text{ m s}^{-1}$$

Figure 2-2 : Schéma de la cavité entraînée et données utilisées

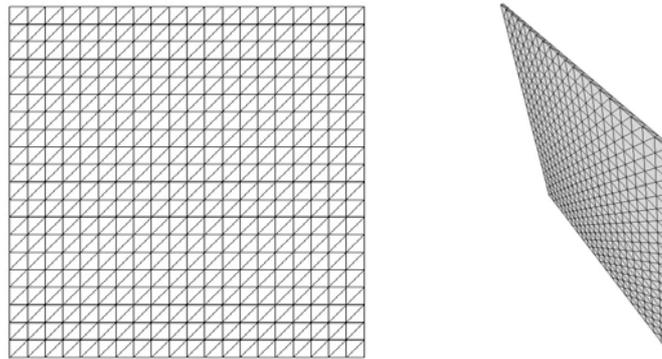


Figure 2-3 : Maillage structuré m21 (grille 21x21)

Pour se faire une première idée du type d'écoulement que l'on obtient, la Figure 2-4 présente les vitesses horizontales et verticales. Ce cas académique simple possède toutefois des singularités dans les coins supérieurs où une discontinuité de vitesse est imposée comme condition aux limites. Cependant nous parvenons tout de même à obtenir une solution très régulière. La déformation des isovitesse horizontales dans le coin inférieur droit correspond à la présence d'un vortex secondaire. L'analyse de la position et de la taille des vortex apporte généralement des informations supplémentaires qualitativement intéressantes mais, pour simplifier notre propos, nous n'aborderons pas ce point dans la suite. Nous nous limiterons à une comparaison des champs de vitesse, des vitesses verticales dans la section horizontale à mi-hauteur et de la convergence des vitesses en un point particulier de cette section.

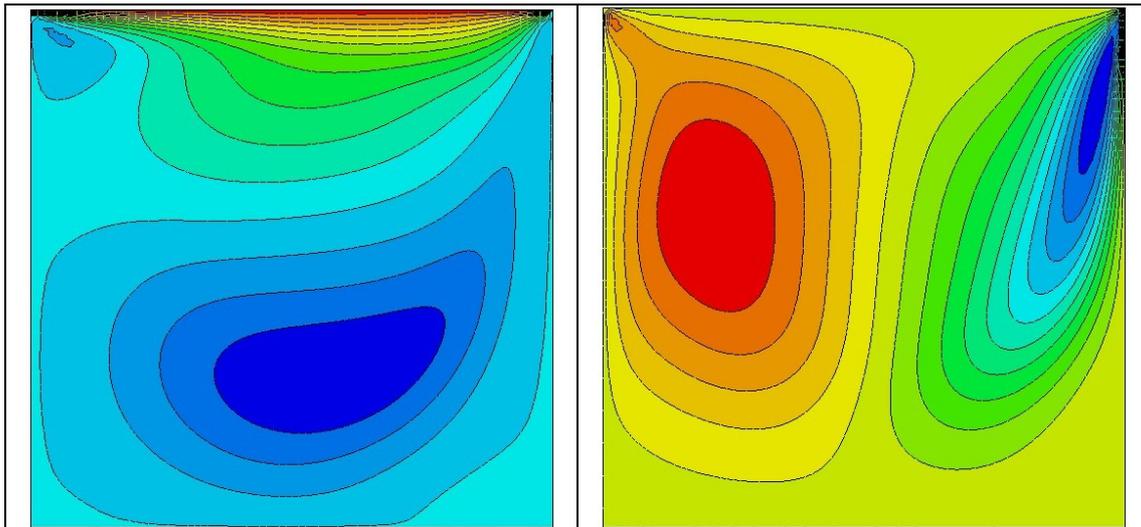


Figure 2-4 : Isovaleurs des vitesse horizontale et vitesse verticale à $Re=400$ avec $dt=0.2s$ pour une résolution PSPG-SI sur le maillage m81

Convergence des résultats avec le maillage

La première étape de notre processus de validation a été de vérifier la convergence de notre solution vers la solution de référence en raffinant progressivement le maillage. Ce résultat est présenté sur la Figure 2-5 pour la résolution PSPG-SI. On étudie le profil de V_z dans la section horizontale à mi-hauteur de la cavité pour lequel nous avons les résultats numériques de la solution de référence [GHIA, 1982].

La convergence avec les résultats de référence est obtenue pour le maillage m81. D'autre part l'évolution vers cette solution est régulière avec le raffinement du maillage. Des résultats similaires sont obtenus avec les autres méthodes de résolution.

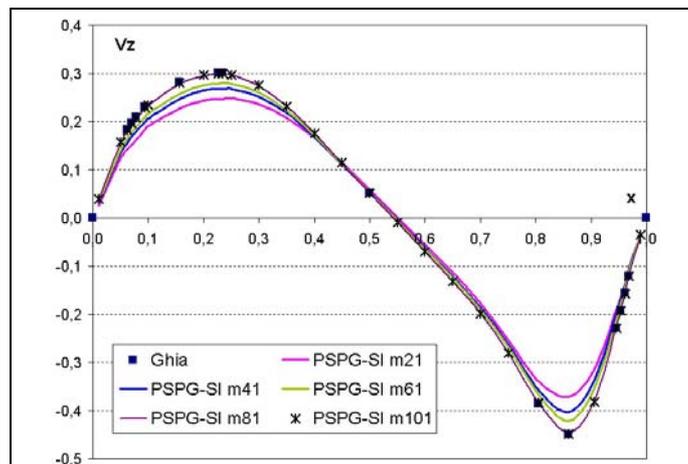


Figure 2-5 : Test de convergence de la solution pour $dt=0,2s$ avec le maillage pour la résolution PSPG-SI à $Re=400$

Comparaison des résolutions à $Re=400$

Pour effectuer les premières études de sensibilité au pas de temps et d'autres comparaisons, nous avons choisi d'utiliser le maillage m41 qui permet d'avoir des temps de calcul beaucoup plus raisonnables étant donné le nombre très important de simulations qui ont

été réalisées. La première comparaison est faite sur notre maillage de test m41 et sur notre maillage de référence m81. La Figure 2-6 montre ainsi que les solutions obtenues avec les deux formulations Bulle et la formulation PSPG convergent bien vers la solution de référence. Par contre un écart non négligeable persiste entre la solution upwind nodal et la solution de référence.

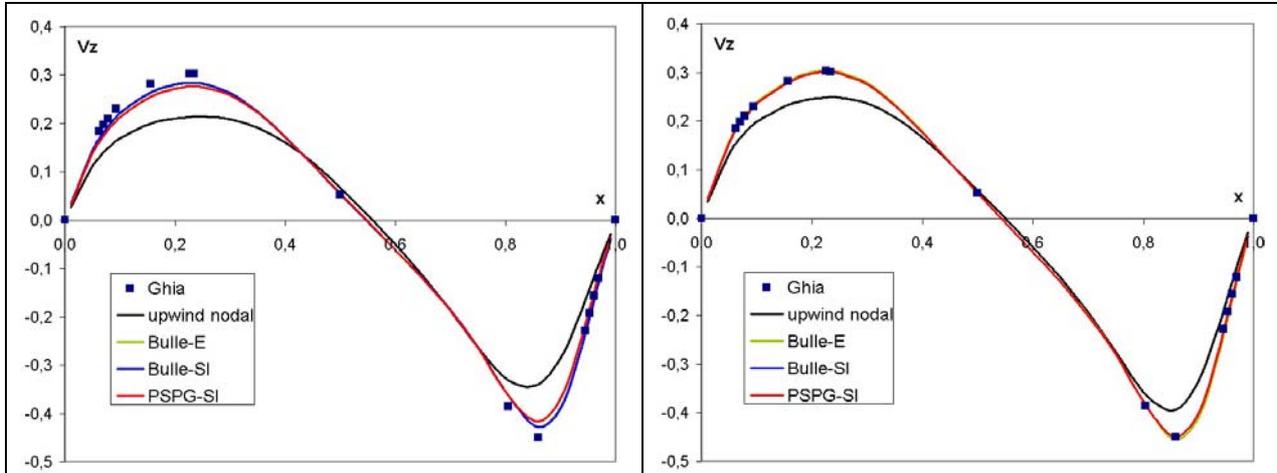


Figure 2-6 : Vitesse verticale sur la section horizontale à mi-hauteur à $Re=400$ pour $dt=0.2s$ avec le maillage m41 (à gauche) et le maillage m81 (à droite) pour les différentes méthodes de résolution

Cet écart diminue avec le raffinement du maillage mais reste important. Pourtant dans cette première comparaison, nous avons utilisé un pas de temps relativement faible de 0.2s qui devrait permettre d'obtenir une bonne solution ($\Delta t=0.2s$ et $\Delta x=0.0025m$ pour $V_{max}=0.01$ m/s). Nous allons donc maintenant voir comment les formulations sont sensibles au pas de temps.

Analyse de la sensibilité au pas de temps des différentes résolutions

La formulation upwind nodal semble ne pas fournir de bons résultats avec un pas de temps de 0.2s mais de plus ces résultats se dégradent rapidement avec l'augmentation du pas de temps. On peut ainsi voir sur la Figure 2-7, qui représente les vitesses verticales pour trois pas de temps différents, que la forme de l'écoulement est considérablement modifiée par une augmentation du pas de temps. En particulier dans le coin supérieur droit on note une variation brusque de la vitesse. De plus il semble y avoir une diminution des gradients de vitesse dans le domaine central. Cela est confirmé sur la Figure 2-8 qui montre les courbes de vitesse verticale dans la section horizontale à mi-hauteur. La deuxième image de la Figure 2-8 mérite quelques explications.

En effet sur cette image nous avons tracé l'évolution de la variation de vitesse en un point du domaine. Ce point, de coordonnées (0.01563, 0.05), n'a pas été choisi au hasard mais correspond à la vitesse verticale maximale sur la section horizontale à mi-hauteur pour un $Re=1000$ d'après la solution de référence [GHIA, 1982]. L'évolution de la vitesse en ce point nous a donc semblé représentative de la convergence vers l'état stationnaire de notre écoulement. Ensuite nous avons décidé de calculer une valeur représentative de la variation de la vitesse. Pour cela nous avons pris l'écart entre la vitesse minimale et maximale en ce point sur un intervalle de 20s. Cette méthode permet de s'affranchir des oscillations à haute fréquence pouvant apparaître dans nos résultats. Cette valeur de variation locale de la vitesse, dV_z , est résumée par l'équation suivante :

$$dV_z = \text{Max}_{t' \in [t-20; t]} |V_z(t) - V_z(t')| \quad (2.3.13)$$

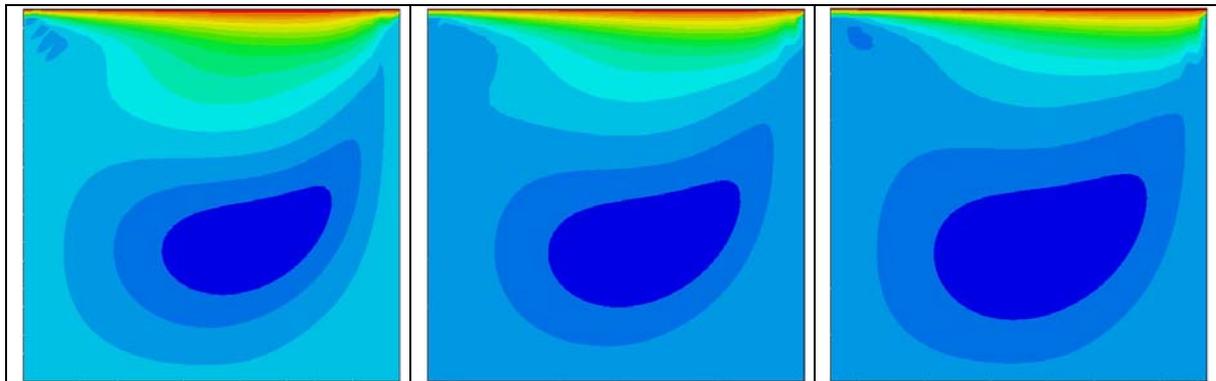


Figure 2-7 : Vitesse verticale à Re=400 sur le maillage m41 avec la résolution upwind nodal pour dt=0.2s (à gauche), dt=1s (au centre) et dt=2s (à droite)

Ainsi lorsque l'on analyse cette donnée supplémentaire, nous notons sur la Figure 2-8 que la convergence vers la solution stationnaire se fait de manière régulière pour les différents pas de temps. On peut donc considérer que nous avons sur la Figure 2-7 les champs de vitesse convergés vers l'état stationnaire car ils sont tracés à t=350s.

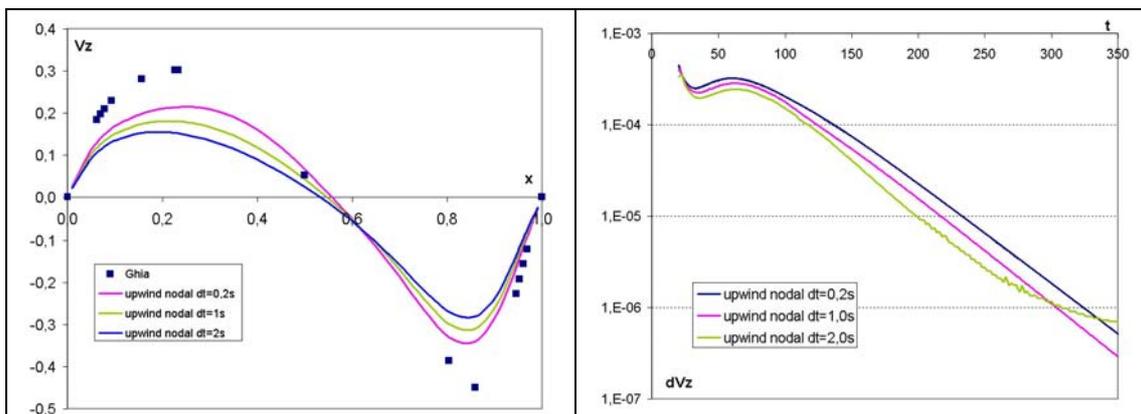


Figure 2-8 : Vitesse verticale dans la section horizontale à mi-hauteur à Re=400 sur le maillage m41, pour la résolution upwind nodal en fonction du pas de temps et évolution de dVz au cours du temps

Il semblerait donc que la formulation upwind nodal ne soit pas très précise et comporte en plus une sensibilité très forte au pas de temps.

La formulation Bulle-E devrait aussi normalement être assez sensible au pas de temps du fait de la formulation explicite du terme de convection. La Figure 2-9 confirme cette hypothèse. En effet, au-delà d'une valeur critique du pas de temps la solution ne converge plus. Une singularité apparaît dans le champ de vitesse et devient ensuite prépondérante. Cependant en dessous de cette valeur critique les résultats ne dépendent pas du pas de temps comme le montrent les premières images de la Figure 2-9 et les courbes sur la section centrale de la première image de la Figure 2-10.

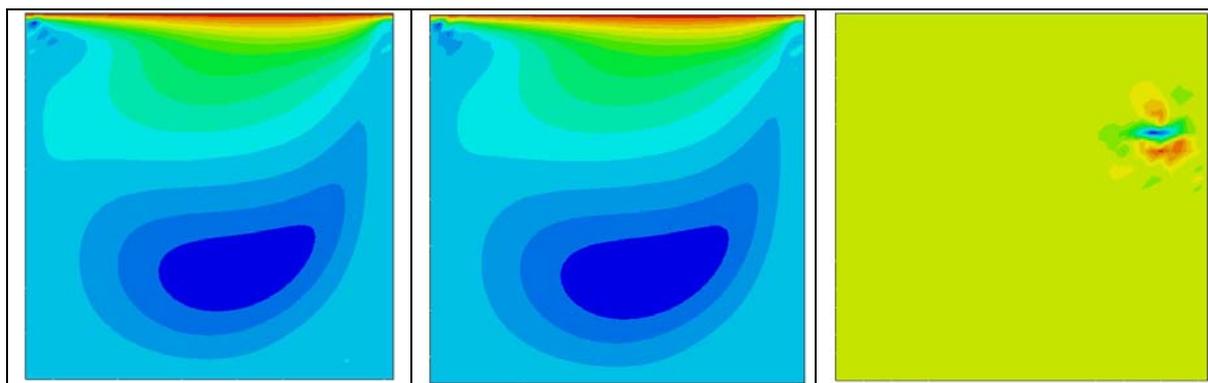


Figure 2-9 : Vitesse verticale à $Re=400$ sur le maillage m41 avec la résolution Bulle-E pour $dt=0.2s$ (à gauche), $dt=1s$ (au centre) et $dt=2s$ (à droite, solution divergente à 50s)

Enfin la sensibilité au pas de temps des formulations Bulle-SI et PSPG-SI sont illustrées sur la Figure 2-10. Les variations avec le pas de temps sont tout à fait minimales, seulement une petite amélioration apparaît sur la simulation PSPG-SI lorsque l'on diminue le pas de temps. Plus généralement ces deux formulations sont très performantes dans un large éventail de pas de temps allant de 0.1s à 10s, qui sont les valeurs extrêmes que nous avons testées. Dans la suite des tests nous ne présenterons donc que les résultats de ces deux méthodes qui sont les plus stables et les plus performantes.

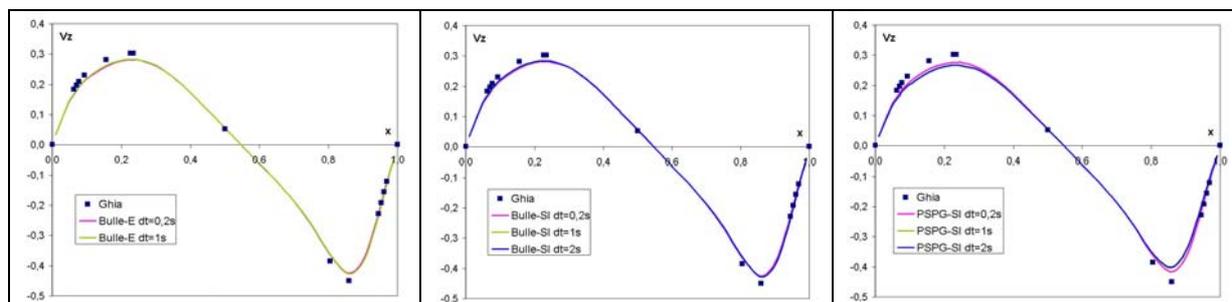


Figure 2-10 : Vitesse verticale sur la section horizontale à mi-hauteur à $Re=400$ pour $dt=0.2s$, $dt=1s$ et $dt=2s$ sur le maillage m41 pour la résolution Bulle-E (à gauche), Bulle-SI (au centre) et PSPG-SI (à droite)

Comparaison des schémas PSPG-SI et PSPG-I

Précédemment la formulation PSPG-I n'apparaissait pas sur les courbes. En effet sur les différents tests menés sur la cavité entraînée nous n'avons pas mis en évidence d'amélioration des résultats avec la méthode PSPG-I. D'ailleurs la comparaison pour un pas de temps de 2s sur le maillage m41 à $Re=400$ ne montre aucune différence (cf. Figure 2-11). Nous limiterons donc par la suite notre étude à la formulation PSPG-SI qui de plus pourra donc se comparer parfaitement avec la formulation Bulle-SI.

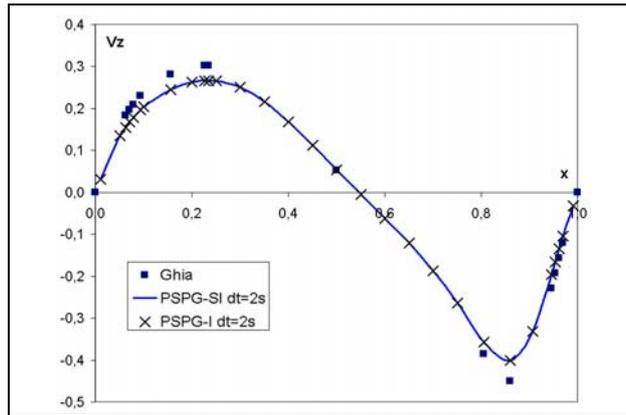


Figure 2-11 : Comparaison des vitesses verticales dans la section horizontale à mi-hauteur pour les résolutions PSPG-SI et PSPG-I à $Re=400$ sur le maillage m41 avec $dt=2s$

Validation des résultats à des Reynolds plus élevés

Après avoir validé nos différentes formulations à $Re=400$, nous allons maintenant tester les résolutions Bulle-SI et PSPG-SI à des nombres de Reynolds plus élevés, soit $Re=1000$ et $Re=3200$. Dans un premier temps nous pouvons voir un aperçu des changements dans l'écoulement sur la Figure 2-12. L'écoulement plus important dans le centre de la cavité conduit à une croissance des vortex dans les coins inférieurs et à un déplacement vers le bas des vitesses horizontales minimales.

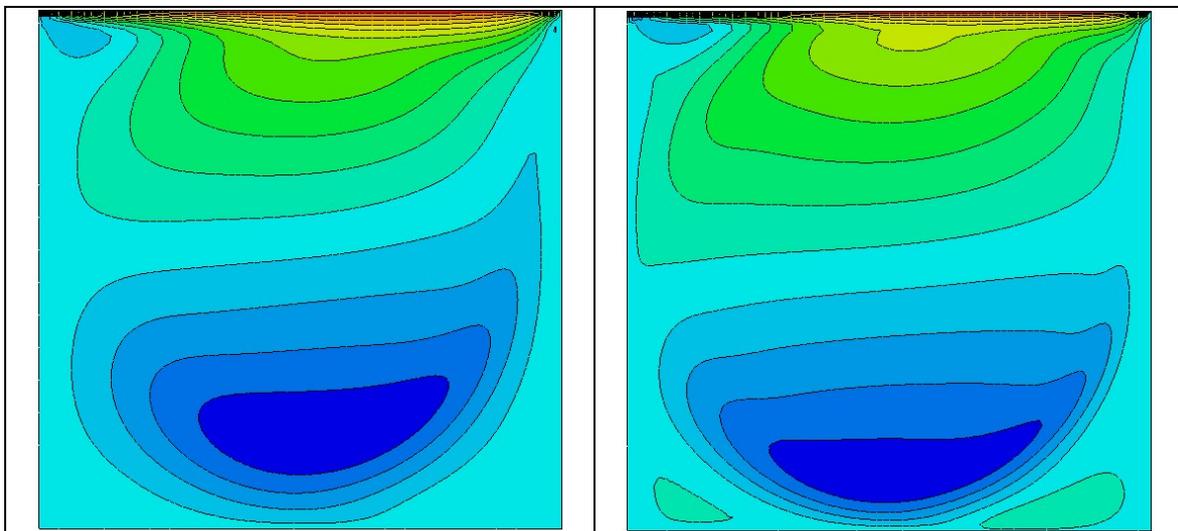


Figure 2-12 : Vitesse horizontale à $Re=1000$ (à gauche) et $Re=3200$ (à droite) avec $dt=0.2s$ pour une résolution PSPG-SI sur le maillage m81

Cette modification de l'écoulement conduit aussi à la formation de couches limites plus fines comme le montrent les résultats de la Figure 2-13 où l'on voit un décalage des pics de vitesse maximale (positive et négative) en direction des parois. Cette figure nous permet aussi de valider nos deux formulations à des Reynolds plus élevés. Il semble par contre que la

formulation Bulle-SI surestime très légèrement la vitesse par rapport à la résolution PSPG-SI et à la solution de référence.

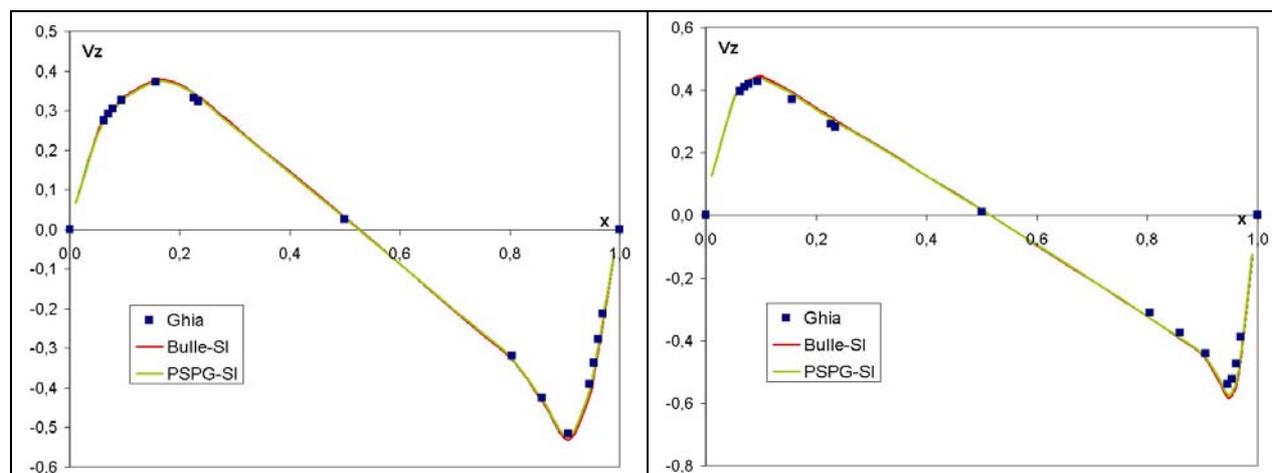


Figure 2-13 : Vitesse verticale sur la section horizontale à mi-hauteur pour $dt=0.2s$ à $Re=1000$ (à gauche) et à $Re=3200$ (à droite), sur le maillage m81 pour la résolution Bulle-SI et la résolution PSPG-SI

Evolution de la vitesse de convergence vers une solution stationnaire en fonction du nombre de Reynolds

Pour approfondir notre analyse de ces deux formulations, nous avons tracé à chacun des nombres de Reynolds étudiés notre valeur dVz (cf. Figure 2-14), qui représente la variation de la vitesse en un point moyennée temporellement (cf. équation (2.3.13)). La convergence vers la solution stationnaire est très régulière à $Re=400$ mais dès $Re=1000$ elle devient plus irrégulière avec la présence d'oscillations assez fortes même si globalement la convergence se fait bien. A $Re=3200$, la fréquence de ces oscillations a augmenté mais leur amplitude a diminué. Cette dernière remarque est moins valable pour la simulation PSPG-SI qui présente sur la fin des pics très prononcés.

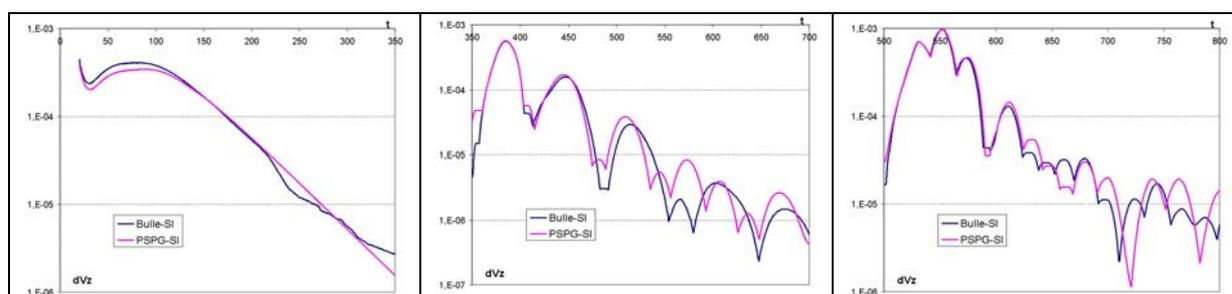


Figure 2-14 : Evolution de dVz au cours du temps à $Re=400$ (à gauche), à $Re=1000$ (au centre) et à $Re=3200$ (à droite), sur le maillage m81 pour les résolutions Bulle-SI et PSPG-SI avec $dt=0.2s$

Ces résultats nous permettent de confirmer que la convergence vers l'état stationnaire, même si elle est plus difficile lorsque le nombre de Reynolds augmente, se réalise tout de même assez rapidement. Toutefois à des nombres de Reynolds très élevés, il se peut que ces

oscillations dans la solution provoquent des problèmes de convergence numérique et conduisent à des instabilités dans le champ de vitesse qui pourraient faire diverger le champ de vitesse.

Etude de l'aspect transitoire de la solution : comparaison avec FLUENT

Les différentes validations menées dans ce paragraphe ont permis de démontrer l'efficacité de nos différentes formulations ainsi que leurs limitations. Cependant la comparaison n'était effectuée que par rapport à une solution de référence stationnaire. Il nous est donc apparu important de vérifier aussi l'aspect transitoire de notre résolution. En effet dans les calculs de solidification nous aurons un aspect transitoire très fort et non pas un écoulement durablement stable. Pour réaliser cette dernière étude, nous avons décidé de faire une comparaison avec le code FLUENT puisque nous ne possédons pas de résultats de référence. La comparaison est faite sur le maillage m81 à $t=50s$ pour $Re=400$. La simulation de Fluent utilise un maillage 2D en volumes finis mais une grille 81×81 . Les courbes de la Figure 2-15 montrent un très bon accord entre les résultats de nos différentes formulations et les résultats de Fluent. Cependant la formulation upwind nodal est toujours décalée et les prédictions des formulations Bulle-E et Bulle-SI surestiment légèrement la vitesse. Ces résultats confirment donc ceux déjà enregistrés dans l'étude du régime stationnaire.

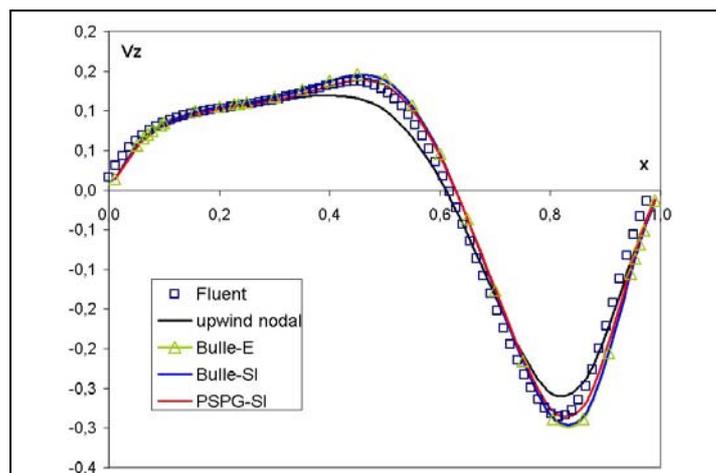


Figure 2-15 : Vitesse verticale dans la section horizontale à mi-hauteur à $Re=400s$ pour $dt=0.2s$ et à $t=50s$. Comparaison des résultats entre FLUENT et les résolutions upwind nodal, Bulle-E, Bulle-SI et PSPG-SI

En conclusion, le cas académique de la cavité entraînée, nous a permis de valider les différentes formulations mises en place dans THERCAST. Nous avons ainsi pu voir les faiblesses de la formulation upwind nodal qui était initialement présente dans THERCAST. La sensibilité au pas de temps de la méthode Bulle-E est trop critique pour que nous puissions l'utiliser. Enfin les méthodes Bulle-SI et PSPG-SI ont démontré de très bonnes performances et une faible sensibilité au pas de temps. Il semble par contre que la méthode Bulle-SI surestime légèrement les vitesses, nous avons donc décidé de sélectionner la méthode PSPG-I qui a démontré les mêmes performances que la méthode PSPG-SI mais pourrait apporter un plus dans des problèmes encore plus complexes comme ceux que nous allons étudier en solidification. Cette implicitation complète du terme de convection pourrait être utile même si nous n'avons d'exemple l'illustrant. Ce point devrait être vérifié même si le coût additionnel de cet implicitation est négligeable et ne vaut donc pas forcément le coût de cette étude.

2.4. Résolution de la thermique

Lors de la solidification d'un matériau, le changement de phase produit un dégagement de chaleur à l'interface solide/liquide. L'ajout de ce terme complique la résolution des équations avec d'autre part la forme souvent complexe de l'interface comme nous l'avons vu précédemment. Ainsi deux approches ont été développées, la première considère une séparation des deux domaines solide et liquide par un suivi du front de solidification (Front Tracking Method) alors que la deuxième considère un milieu unique par une technique de prise de moyenne. La première méthode est assez complexe à mettre en œuvre à l'échelle macroscopique pour les alliages qui présentent une zone pâteuse. Elle n'est donc utilisée que pour des calculs à l'échelle de la dendrite par exemple ou pour des calculs de solidification de substances pures. La seconde approche permet d'obtenir une équation unique pour l'ensemble du domaine ce qui simplifie grandement la résolution.

2.4.1. Equations de conservation de l'énergie

Si l'on considère un volume représentatif suffisamment petit par rapport aux inhomogénéités de température et suffisamment grand par rapport à la microstructure, il est alors possible de définir une valeur moyenne sur ce volume. Nos variables macroscopiques seront donc des valeurs moyennées sur un tel volume. Cette approche est particulièrement adaptée pour la résolution thermique car l'échelle des variations de température est très supérieure à l'échelle des dendrites.

En plus des hypothèses décrites précédemment, nous supposons que la masse volumique ne varie pas en fonction de la température ou de la phase (hypothèse 4). La contribution du retrait à la solidification est ainsi négligée dans le cadre de ce travail. Une autre conséquence est l'identité entre fractions volumiques g_i et massiques f_i . De même la conductivité et la chaleur massique seront supposées constantes (hypothèse 5).

On définit donc localement l'enthalpie volumique moyenne en fonction de la température et de la fraction de liquide :

$$H = \rho_0 c_p \int_{T_0}^T d\tau + \rho_0 g_l \Delta h_{ls} \quad (2.4.1)$$

où Δh_{ls} est la chaleur latente de fusion par unité de masse, g_l la fraction volumique de liquide. T_0 est une température de référence prise égale à 0°C.

Pour obtenir à l'équation de conservation de l'énergie, nous nous basons sur l'équation suivante présentée dans [BENNON, 1987] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\kappa_s}{c_{ps}} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho f_s (h_l - h_s) \mathbf{V}] \quad (2.4.2)$$

En appliquant nos hypothèses présentées précédemment l'équation se simplifie beaucoup. Alors l'équation de conservation de l'énergie peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \rho_0 c_p \mathbf{V} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = 0 \quad (2.4.3)$$

Le terme convectif est exprimé à partir de la température et non de l'enthalpie volumique car notre modèle impose que la vitesse du solide soit nulle. Ainsi seul le liquide est transporté par convection.

L'équation de convection-diffusion (2.4.3) nécessite une relation supplémentaire pour être résolue puisqu'il est nécessaire de calculer la fraction liquide pour déterminer la relation liant l'enthalpie et la température. Le chemin de solidification peut être fixé dans le cas d'un alliage à concentration fixe pour lequel on fournit alors les valeurs de la fraction liquide en fonction de la température (ou de l'enthalpie). Par contre dans le cas d'un alliage subissant une modification de sa concentration, il devient nécessaire de faire évoluer ce chemin de solidification qui devient alors dépendant de la concentration locale. Cette relation implique donc un couplage fort avec la résolution de la ségrégation comme nous le verrons dans la description du module de microségrégation.

2.4.2. Résolution en température et en enthalpie

Résolution en température

L'équation (2.4.3) peut être résolue en utilisant comme variable principale soit la température soit l'enthalpie. Il est en effet possible de régulariser cette équation pour obtenir une équation ne faisant apparaître que la température en utilisant une capacité calorifique effective comme l'a montré [LEMMON, 1979]. La chaleur massique effective est définie par :

$$c_p^{eff} = \frac{\partial h}{\partial T} \quad (2.4.4)$$

où h est l'enthalpie massique.

Dans le cas d'une résolution utilisant des éléments linéaires (tétraèdres P1 dans le cas de THERCAST), on obtient une valeur de c_p^{eff} constante par élément en utilisant une régularisation spatiale :

$$c_p^{eff} = \frac{\|\nabla h\|}{\|\nabla T\|} \quad (2.4.5)$$

L'équation à résoudre se présente donc sous la forme :

$$\rho_0 c_p^{eff} \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla (\rho_0 c_p T) - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) = 0 \quad (2.4.6)$$

Cette équation est ensuite discrétisée temporellement avec un schéma d'Euler implicite et spatialement sur des éléments tétraédriques linéaires. On arrive ainsi finalement à l'équation suivante en ne considérant comme condition aux limites qu'un transfert convectif avec l'extérieur :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \varphi \cdot \rho_0 c_p^{eff} \frac{T - T^0}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \cdot (\mathbf{V} \cdot \nabla (\rho_0 c_p T)) d\Omega + \int_{\Omega} \kappa \nabla \varphi \cdot \nabla T d\Omega \\ & = - \int_{\partial\Omega_e} \varphi \cdot h (T - T_{ext}) d\Gamma \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

où T^0 est la température résultant de l'incrément temporel précédent.

φ appartient à un ensemble de fonction test. Cet ensemble sera pris comme l'ensemble des fonctions d'interpolation des éléments finis. Nous verrons plus loin que ces fonctions seront modifiées par la stabilisation SUPG.

Résolution en enthalpie

En utilisant le schéma d'Euler implicite pour la discrétisation temporelle et les éléments finis P1 pour la discrétisation spatiale de l'équation (2.4.3), on obtient l'équation discrète de la chaleur :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \varphi \cdot \frac{H - H^0}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \cdot (\mathbf{V} \cdot \nabla (\rho_0 c_p T)) d\Omega + \int_{\Omega} \kappa \nabla \varphi \cdot \nabla T d\Omega \\ = - \int_{\partial\Omega_r} \varphi \cdot h(T - T_{ext}) d\Gamma \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

Pour simplifier la notation ce système d'équation est mis sous forme matricielle :

$$\mathbf{C} \frac{\mathbf{H} - \mathbf{H}^0}{\Delta t} + \mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad (2.4.9)$$

où \mathbf{H} , le vecteur des enthalpies nodales, est l'inconnue courante.

La température en chaque noeud est une variable dépendante de l'enthalpie et éventuellement de la concentration. La matrice \mathbf{K} est composée d'une partie convective et d'une partie diffusive.

L'équation (2.4.9) est fortement non linéaire et sera donc résolue en utilisant la méthode itérative de Newton-Raphson.

D'autre part, pour compléter la description de la résolution numérique de ces équations, lorsque l'on considère l'interaction avec les moules, on utilise une méthode de point fixe pour obtenir la convergence. Ainsi à chaque incrément, on résout successivement la thermique sur chacun des domaines et on détermine alors l'écart de température dans les solutions. Si cet écart est supérieur à notre critère de convergence, on itère la résolution sur chaque domaine en utilisant comme condition aux limites du contact thermique les nouvelles valeurs de température [JAOUEN, 1998].

2.4.3. Problème du choc thermique et son traitement

Présentation du problème

L'apparition de forts gradients aux frontières ou à l'intérieur du domaine conduit à l'apparition d'oscillations dans la solution lors de la résolution numérique en utilisant des éléments standard. Ce phénomène très général apparaît aussi bien en mécanique avec les ondes de choc, avec le déplacement d'un front de matière ou en thermique. Dans ce dernier cas, cela correspond par exemple à la mise en contact entre le métal liquide et un moule à température ambiante. A l'interface entre ces deux domaines, le refroidissement produit un échange très important de chaleur. Ce fort gradient est difficilement simulable et en conséquence la solution prédit des oscillations. La température dans le bain liquide peut alors dépasser la température initiale. Au bout d'un certain temps de refroidissement le choc est dissipé grâce à la diffusion thermique mais son effet est tout de même très notable dans les

premières secondes et peut conduire à une modification importante et éventuellement durable de la solution. Il est ainsi primordial de comprendre l'effet du choc thermique et de le limiter le plus possible.

Pour modéliser proprement les chocs thermiques, il est nécessaire que l'épaisseur affectée par le choc thermique contienne au moins un élément. C'est le critère de longueur de pénétration. Ainsi dans les calculs purement thermiques, les chocs thermiques ont une influence relativement courte puisque dès que cette épaisseur est suffisante, le problème disparaît. Par contre dans la simulation de phénomènes couplés, comme la thermo-mécanique, ces instabilités initiales ont des conséquences majeures sur le déroulement de la suite des calculs.

Pour un maillage de taille uniforme Δx , le pas de temps minimum Δt_{ts} requis pour satisfaire le critère de longueur de pénétration est donné par la formule suivante :

$$\Delta t_{ts} = a \frac{\rho c_p}{\kappa} \Delta x^2 \quad (2.4.10)$$

où a est une constante de l'ordre de 1.

Pour un maillage non uniforme, le calcul de Δt_{ts} en utilisant la formule (2.4.10) est compliqué par une incertitude sur la définition de la taille de maille Δx . [JAOUEN, 1998] a parcouru toutes les surfaces externes non adiabatiques pour déterminer le minimum, le maximum, et la moyenne de Δx . Cependant le choix d'une de ces valeurs nécessite une bonne connaissance a priori de l'évolution de la solution par l'utilisateur ce qui limite son efficacité, d'où la recherche d'une méthode plus robuste. Dans la suite nous allons présenter cette nouvelle stratégie de contrôle des chocs thermiques introduite dans THERCAST par Victor Fachinotti lors de son postdoctorat au Cemef [FACHINOTTI, 2004].

La méthode condsplit

Pour décrire cette méthode nous nous basons sur l'équation (2.4.9). La matrice \mathbf{K} est composée d'une partie convective et d'une partie diffusive, c'est seulement la partie diffusive qui est modifiée par cette méthode.

La méthode dite de condsplit consiste alors à modifier l'équation de la sorte:

$$\mathbf{C} \frac{\mathbf{H} - \mathbf{H}^0}{\Delta t} + (\mathbf{K}_{adv} + \mathbf{K}_{diff}^*) \mathbf{T} - \mathbf{F} = (\mathbf{K}_{diff}^* - \mathbf{K}_{diff}) \mathbf{T}^0 \quad (2.4.11)$$

La matrice \mathbf{K}_{diff}^* étant définie de la manière suivante:

$$K_{diff,ij}^* = \int_{\Omega} \kappa^* \nabla N_i \cdot \nabla N_j dV \quad (2.4.12)$$

La conductivité augmentée κ^* peut être définie de la manière suivante pour respecter le critère de longueur de pénétration pour le pas de temps nominal Δt :

$$\kappa^* = \begin{cases} \kappa & \text{if } \Delta t_{ts} \leq \Delta t \\ \kappa \frac{\Delta t_{ts}}{\Delta t} & \text{if } \Delta t_{ts} > \Delta t \end{cases} \quad (2.4.13)$$

Cependant plutôt que la capacité calorifique ρc_p dans l'évaluation de Δt_{ts} , il faut prendre la capacité calorifique effective ρc_{eff} qui tient compte de la chaleur latente. Dans les

éléments subissant un changement de phase, ρc_{eff} est beaucoup plus grand que ρc_p et varie beaucoup en fonction du temps, l'estimation a priori de Δt_{ts} n'est alors pas toujours valide. En solidification, il devient nécessaire que la température initiale ne soit pas trop proche de la température de liquidus, pour éviter une solidification dès le premier pas de temps. De toute façon, Δt_{ts} devrait être déterminé à chaque pas de temps jusqu'à ce que le choc thermique ait complètement disparu.

D'autre part cette approche a été implémentée en introduisant une optimisation du pas de temps de correction de la conductivité. En effet plus la valeur du pas de temps correctif est proche de la valeur réelle meilleure sera notre approximation. Ainsi plutôt que de calculer les tailles de maille sur tous les éléments des parois, on effectue un calcul thermique en augmentant progressivement le pas de temps correctif jusqu'à obtenir un choc thermique suffisamment affaibli et cela pour chacun des domaines. Le calcul du pas de temps correctif n'est utilisé que lors de la première itération, cependant le pas de temps critique est modifié par l'apparition de la solidification ce qui nécessiterait une nouvelle optimisation du pas de temps correctif qui n'est plus adapté. Cette faiblesse de la méthode conduira à un choc thermique apparaissant lors du début de la solidification pour le cas du lingot présenté à l'Annexe A. Toutefois cette stratégie permet une certaine optimisation du calcul en limitant au maximum la correction de la conductivité.

Validation sur un cas unidimensionnel

Nous allons maintenant présenter une validation par comparaison avec une solution analytique. Considérons le cas unidimensionnel d'un domaine semi infini, initialement à température uniforme $T_0=800^\circ\text{C}$, dont la surface passe soudainement à une valeur à $T_w=25^\circ\text{C}$, gardée constante par la suite. Le Tableau 2-1 donne la liste des propriétés du matériau. Ce problème illustre bien un problème typique de l'analyse thermique dans la mise en forme de l'acier. On utilisera un maillage 3D structuré composé de tétraèdres avec une taille uniforme $\Delta x = 2 \text{ mm}$ dans la direction du flux. Un pas de temps constant $\Delta t=0.1 \text{ s}$ est choisi.

Dans ce cas, la solution Galerkin d'origine est affectée par le choc thermique, comme le montre le dépassement de température de 13.2°C au premier pas de temps pour un noeud situé à 4 mm de la paroi froide (cf. Figure 2-16). Pour les éléments tétraédriques linéaires et une matrice de capacitance consistante (non condensée), la constante a de l'équation (2.4.10) est prise égale à 1 [JAOUEN, 1998], on obtient alors $\Delta t_{ts}=0.748 \text{ s}$. Cependant en utilisant la méthode de condsplit, aucun noeud n'a de dépassement de température pour $\Delta t_{ts}=0.544 \text{ s}$. Et, en tolérant un faible dépassement de température de 0.1°C , cette valeur peut être réduite à 0.287 s . La conductivité augmentée κ^* est calculée en utilisant l'équation pour le premier pas de temps et diminuée linéairement jusqu'à retrouver sa valeur initiale pour $t \geq \Delta t_{ts}$. Rappelons que plus les valeurs de Δt et Δt_{ts} sont proches, plus faible est la conductivité artificielle introduite dans les équations. Cela est particulièrement évident sur la Figure 2-16 où la décroissance de la température augmente avec l'augmentation de κ^* , ce qui n'est pas physique mais reflète un effet numérique de la méthode condsplit.

Tableau 2-1 : Propriétés du matériau pour le test thermique unidimensionnel

| | |
|---------------------------------|------------------------|
| Densité ρ | 7800 kg/m ³ |
| Capacité calorifique c_p | 360 J/(kg°C) |
| Conductivité thermique κ | 15 W/(m°C) |

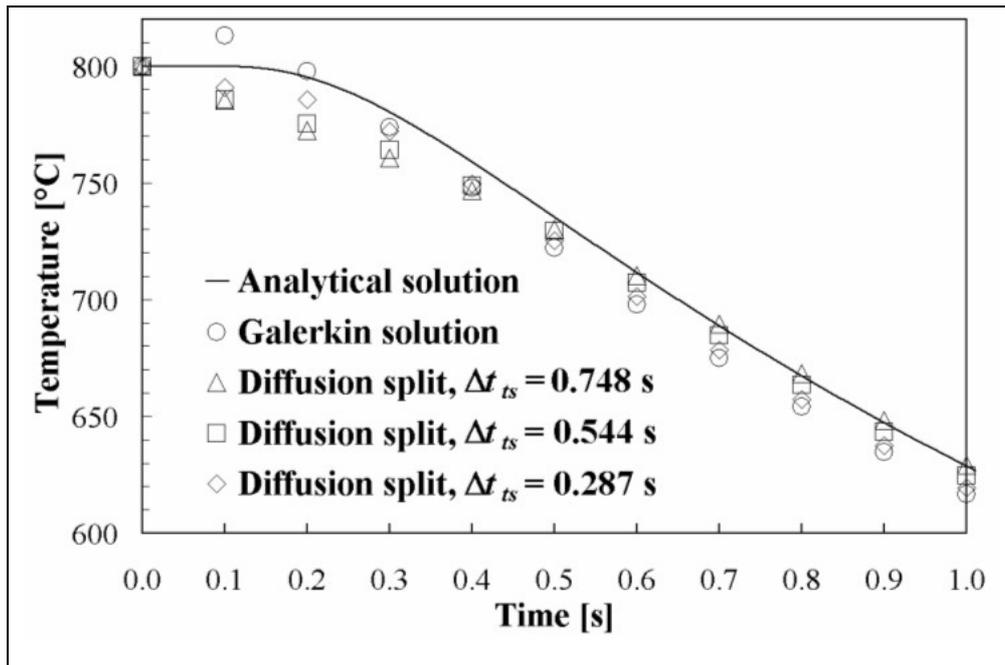


Figure 2-16 : Evolution de la température à 4 mm de la surface froide

Ce cas test permet donc de montrer le bon fonctionnement de la méthode condsplit pour la simulation du refroidissement brutal. La résolution dans un cas plus complexe de solidification dans un lingot montre aussi une amélioration nette de la solution cependant il apparaît tout de même nécessaire d'introduire un maillage fin près de la paroi. Ces résultats et leur analyse sont détaillés dans l'Annexe A.

Pour conclure, la résolution des chocs thermiques est efficace avec THERCAST et permet d'obtenir une solution proche de la solution réelle après seulement quelques secondes de solidification.

2.4.4. Résolution numérique avec stabilisation SUPG

Si l'on reprend l'équation (2.4.6), en l'absence de solidification, elle peut se mettre sous la forme :

$$\rho_0 c_p \frac{DT}{Dt} = \rho_0 c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla (\rho_0 c_p T) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.4.14)$$

Cette équation peut être résolue en considérant le premier terme, on effectue alors ce que nous appellerons une résolution Upwind nodal en faisant une résolution particulière qui nécessite une étape de transport pour obtenir les valeurs particulières précédentes aux nœuds du maillage [JAOUEN, 1998]. Ici la notion de dérivée particulière est particulière puisque l'on suit la phase liquide avec une vitesse moyennée. Si l'on considère le deuxième terme, on effectue alors une résolution eulérienne et pour cette résolution nous allons utiliser un terme de stabilisation SUPG [BROOKS, 1982].

Une première comparaison a été menée au début de cette thèse sur une cavité en convection naturelle [DE VAHL DAVIS, 1983] que nous utiliserons pour la validation dans la suite. Les résultats obtenus sur cette cavité ont montré un effet très net du pas de temps sur la qualité de la solution pour la résolution Upwind nodal. Nous avons donc décidé

d'introduire une résolution SUPG de la thermique. Voyons maintenant en quoi consiste cette stabilisation SUPG.

Lorsque l'on considère la discrétisation de l'équation de la thermique, on obtient l'équation suivante (sans les termes de frontière) :

$$\int_{\Omega} \varphi \cdot \rho_0 c_p \frac{T - T^0}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \cdot (\mathbf{V} \cdot \nabla (\rho_0 c_p T)) d\Omega + \int_{\Omega} \kappa \nabla \varphi \cdot \nabla T d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \cdot \dot{Q} d\Omega = 0 \quad (2.4.15)$$

La fonction test φ employée n'est alors pas simplement la fonction d'interpolation, on ajoute un terme supplémentaire dépendant de la vitesse pour décentrer le schéma vers l'amont.

La nouvelle fonction test $\tilde{\varphi}$ est définie par :

$$\tilde{\varphi} = N + \tau_{SUPG} \mathbf{V}_{elt} \cdot \nabla N \quad (2.4.16)$$

où N est la fonction d'interpolation de l'élément fini et \mathbf{V}_{elt} la vitesse au centre de l'élément.

Le coefficient de stabilisation se calcule alors de la manière suivante [BROOKS, 1982] :

$$\tau_{SUPG} = \left(\coth\left(\frac{Pe}{2}\right) - \frac{2}{Pe} \right) \cdot \frac{h_{elt}}{\sqrt{15} \|\mathbf{V}_{elt}\|} \quad (2.4.17)$$

où h_{elt} est la taille de l'élément dans la direction de la vitesse et Pe le nombre de Peclet

La taille h_{elt} et le nombre de Peclet sont calculés de la manière suivante :

$$h_{elt} = 2 \|\mathbf{V}_{elt}\| \cdot \left(\sum_{i=1}^4 |\mathbf{V} \cdot \nabla N_i| \right)^{-1} \quad (2.4.18)$$

$$Pe = \|\mathbf{V}_{elt}\| \frac{\rho c_p \cdot h_{elt}}{\kappa}$$

Un cas de référence a été défini pour tester les schémas numériques simulant la convection naturelle [DE VAHL DAVIS, 1983]. La Figure 2-17 présente le schéma de cette cavité. La comparaison entre les deux méthodes pour un nombre de Rayleigh ($Ra = \frac{\rho g \beta_T \Delta T L^3}{\mu}$) assez faible est présentée sur la Figure 2-18. On observe pour la résolution

Upwind nodal une déformation des isothermes. Celles-ci ne sont plus perpendiculaires aux parois horizontales qui sont pourtant adiabatiques. Par contre la solution avec la stabilisation SUPG est bien meilleure et ces distorsions n'apparaissent pas. Cet exemple montre qualitativement l'effet d'un pas de temps important sur la solution de la thermique.

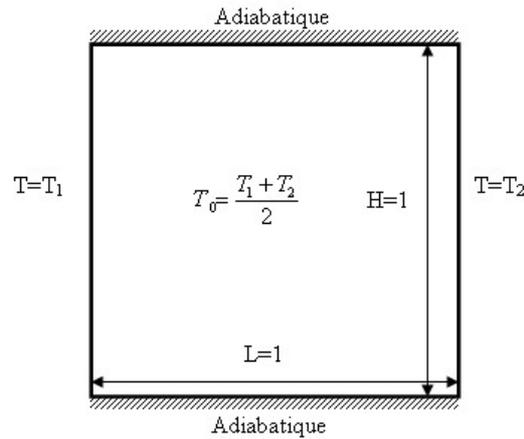


Figure 2-17 : Schéma de la cavité de Rayleigh

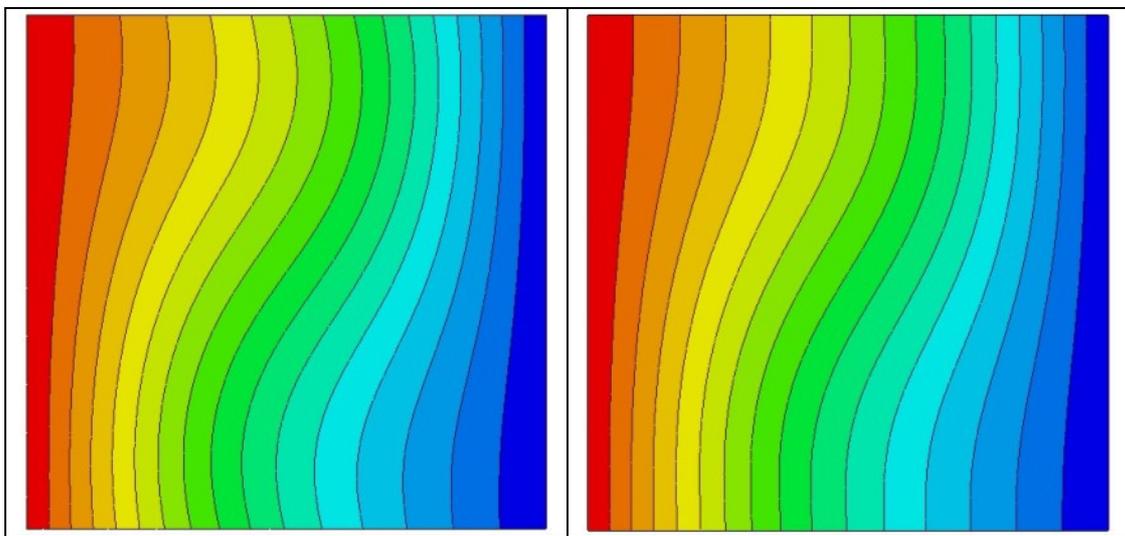


Figure 2-18 : Comparaison des isothermes entre une simulation utilisation une résolution Upwind nodal (à gauche) et une résolution SUPG (à droite) à $Ra=10^3$ et avec $dt=0.5s$

Mais on peut aussi faire une comparaison quantitative. La Figure 2-19 présente ainsi une comparaison des courbes sur trois sections horizontales. La valeur mesurée est l'écart par rapport à une solution de conduction pure. On peut ainsi mettre en évidence plus facilement les différences. Les solutions avec les deux approches sont identiques lorsque le pas de temps est faible ($dt=0.1s$). Par contre lorsque l'on augmente le pas de temps ($dt=0.5s$), on note une divergence dans les solutions. Si la solution SUPG ne change pas de valeur par rapport à la solution à $dt=0.1s$, la solution avec l'upwind nodal montre un décalage important sur les sections haute et basse alors que la section centrale est quasiment inchangée. Cette différence de comportement sur la hauteur de la cavité s'explique par l'écoulement. En effet le fluide a une vitesse non négligeable près des parois horizontales et donc si le pas de temps est trop élevé (le déplacement incrémental est trop grand) alors le modèle upwind nodal n'est plus approprié. Le transport des valeurs particulières précédentes est faussé ce qui conduit à cette déformation des isothermes que nous avons observée sur la Figure 2-18.

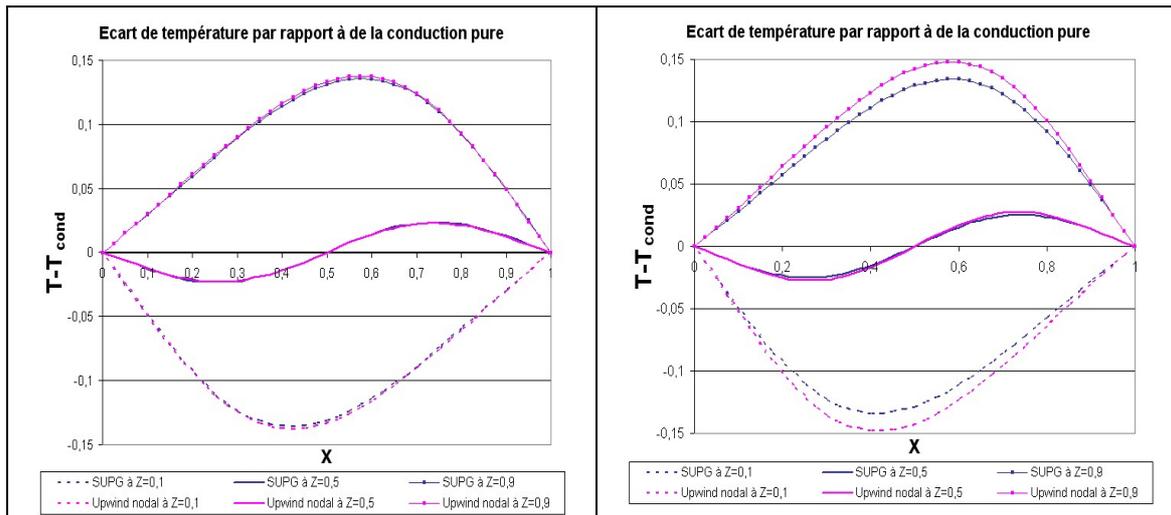


Figure 2-19 : Courbes de température sur trois sections horizontales pour la cavité de Rayleigh à $Ra=10^3$, comparaison entre la simulation Upwind nodal et la simulation SUPG pour $dt=0.1s$ (à gauche) et $dt=0.5s$ (à droite)

Ainsi l'introduction du schéma de résolution eulérien avec stabilisation SUPG a montré une plus grande stabilité par rapport à une augmentation du pas de temps. Nous utiliserons donc ce schéma dans tous les calculs qui suivent.

2.4.5. Validation du modèle thermique

Pour valider notre résolution thermique, en plus de la comparaison effectuée dans le cadre de la mise en place de la méthode condsplit, nous avons utilisé le cas académique de la cavité en convection naturelle qui nous a servi aussi à tester l'effet de la méthode SUPG. Cette cavité a été définie comme benchmark par [DE VAHL DAVIS, 1983] et sert depuis de référence. La Figure 2-17 présente le schéma de la cavité carrée ainsi que les conditions aux limites thermiques. Toutes les parois sont considérées comme des murs avec donc une vitesse nulle. Les calculs ont été menés en prenant les propriétés de l'air. C'est pourquoi, comme nous le discuterons plus loin dans le paragraphe sur la validation des codes, il serait nécessaire d'effectuer le même type de comparaison en utilisant un matériau plus proche de notre application.

Les résultats de la Figure 2-20 montrent un bon accord entre notre simulation et le cas de référence, même si des comparaisons plus quantitatives n'ont pas été faites.

Le deuxième cas test que nous avons utilisé pour réaliser cette validation reprend une géométrie, présentée sur la Figure 2-21, et des données physiques d'un alliage dont nous étudierons la solidification en application. Ainsi les données du matériau (cf. Tableau 2-2) correspondent à celles d'un métal liquide et notre validation sera donc beaucoup plus pertinente. Pour réaliser cette validation, nos résultats seront comparés avec ceux obtenus à l'aide du logiciel FLUENT. La simulation avec FLUENT, qui est un code volumes finis, sera réalisée en 2D. Le maillage de THERCAST sera pseudo-2D, c'est-à-dire qu'il aura deux plans de symétrie et un seul élément dans l'épaisseur ce qui produit une simulation à peu près équivalente à une simulation 2D. Le maillage est structuré avec un raffinement en bas le long de la paroi pour mieux capturer l'écoulement. Ce raffinement suit une progression

géométrique (cf. Figure 2-23). Cette grille est utilisée dans les simulations avec FLUENT et avec THERCAST. En effet la répartition des noeuds sur le plan de symétrie est identique mais FLUENT utilise ensuite une discrétisation 2D utilisant des quadrangles.

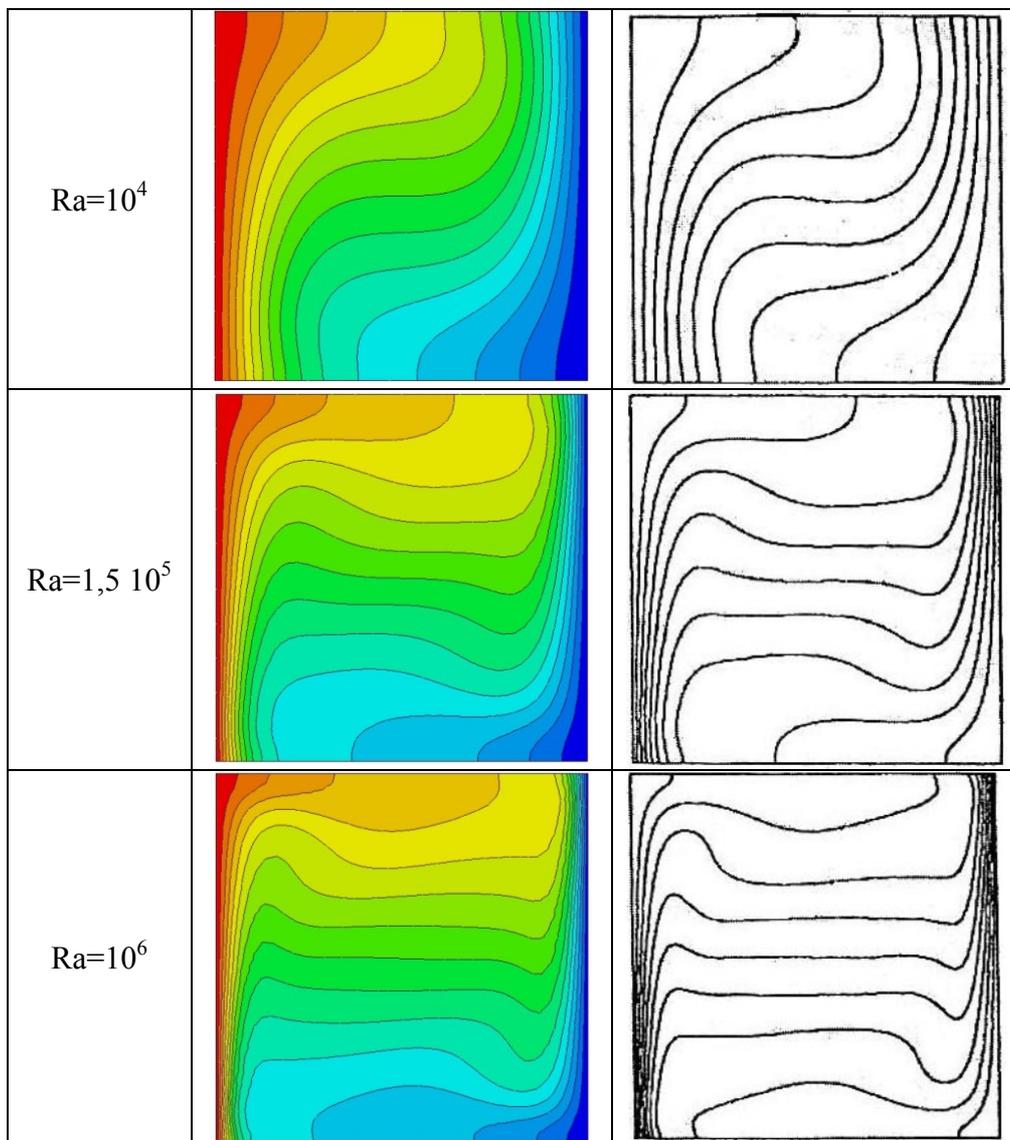


Figure 2-20 : Comparaison des isothermes sur la cavité de Rayleigh entre la simulation SUPG et les résultats de l'article de référence pour $Ra=10^4$, $Ra=1,5 \cdot 10^5$ et $Ra=10^6$

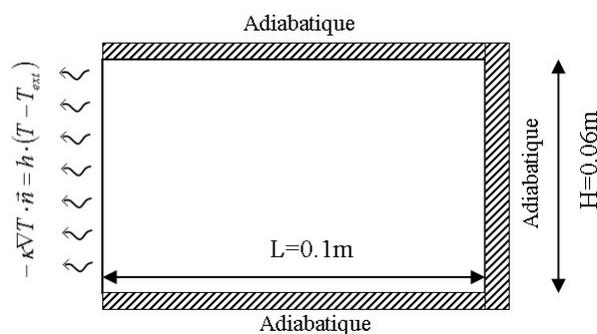


Figure 2-21 : Schéma de la cavité de validation de la convection naturelle d'un métal

Nous avons préféré nous limiter à un calcul de convection naturelle sans solidification car le modèle employé dans FLUENT est différent de celui de THERCAST et cela aurait biaisé notre validation.

Tableau 2-2 : Caractéristiques du matériau du cas de convection naturelle d'un métal

| | |
|---|--|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 9000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 50 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 200 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 10 ⁻⁴ K ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 405 °C |
| Coefficient de transfert thermique h | 400 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 25 °C |

La comparaison est faite après 10s de refroidissement. La Figure 2-22 montre que les solutions sont assez proches aussi bien au niveau des valeurs maximales et minimales que dans les formes des isovaleurs au moins en vitesse. Des écarts apparaissent pourtant avec un vortex plus important dans la solution avec FLUENT qui déforme plus les isothermes. Un autre point qui a attiré notre attention est la présence d'irrégularités dans les isovaleurs de la norme de la vitesse en haut de la cavité. Ces irrégularités correspondent à la structure du maillage. Le raffinement n'est donc pas suffisant dans cette zone. Cet exemple montre d'autre part, qu'avec un maillage similaire, la solution en volumes finis est plus régulière et sans doute plus précise. Cette observation est en phase avec les constatations de Weitao Liu, comparant dans sa thèse [LIU, 2005] les résultats obtenus avec R2SOL (E.F. 2D) et SOLID (V.F. 2D) sur des calculs de macroségrégation.

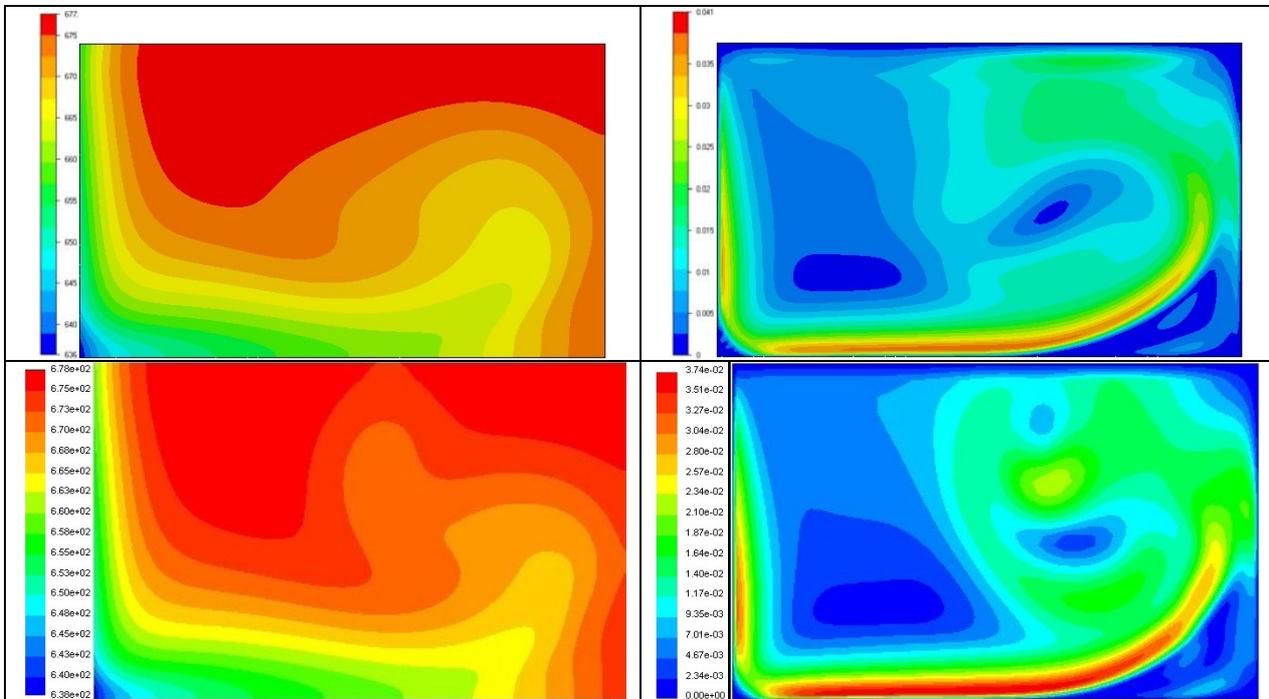


Figure 2-22 : Champ de température (en °C) et de norme de la vitesse (en m/s) à t=10s pour une simulation avec THERCAST sur maillage structuré (en haut) et avec FLUENT sur un maillage similaire (en bas)

Ainsi, nous devons garder en mémoire qu'il nous sera nécessaire de raffiner plus finement pour obtenir des solutions équivalentes pour des comparaisons avec des codes en volumes finis.

Pour vérifier notre affirmation que les perturbations des isovaleurs de la norme de la vitesse proviennent bien du maillage nous avons appliqué un remaillage adaptatif. Notre stratégie de remaillage sera présentée dans le chapitre suivant. La comparaison entre les résultats des simulations sur maillage fixe et avec remaillage adaptatif révèle une amélioration perceptible de la régularité de la solution (cf. Figure 2-23). En particulier les pics ont disparu et le maillage s'est adapté pour suivre l'écoulement, le maillage étant d'autant plus fin que le gradient de vitesse est fort. Le maillage adaptatif comporte environ 50000 éléments et le maillage structuré 30000. Cette différence explique en partie l'amélioration de la solution mais elle provient aussi d'une répartition plus judicieuse des tailles des éléments.

Ce dernier cas test nous a permis de montrer un bon accord entre THERCAST et le logiciel FLUENT pour un cas de convection naturelle de métal liquide. D'autres validations pourraient être menées en particulier pour vérifier la bonne prédiction de la solidification par comparaison avec des résultats analytiques et des cas de référence. Mais tous ces tests additionnels n'ont pas pu être menés dans le délai imparti à cette thèse.

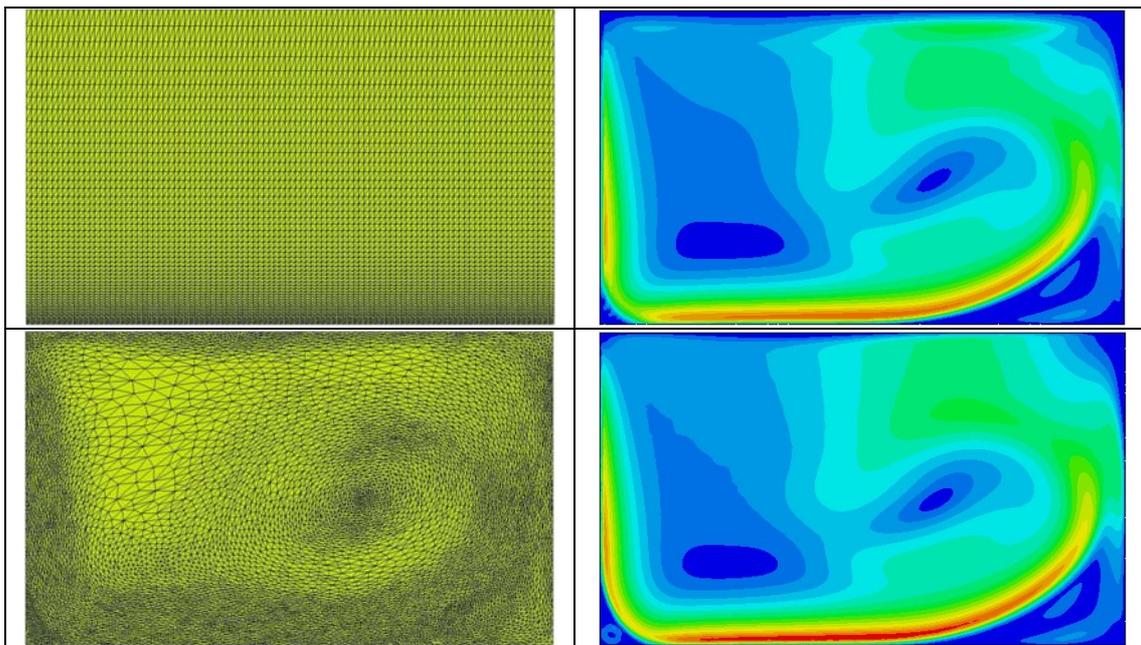


Figure 2-23 : Maillage et norme de la vitesse à $t=10s$ pour une simulation avec THERCAST sur un maillage structuré fixe (en haut) et avec remaillage (en bas)

2.5. Résolution de la ségrégation

La solidification des alliages nécessite la prise en compte de la ségrégation et de ses effets sur la température de liquidus. L'intégration des données fournies par le diagramme de phase ainsi que le choix d'un modèle de microségrégation sont donc essentiels pour ensuite s'intéresser à la résolution du transport du soluté par convection-diffusion.

2.5.1. Modèle de microségrégation

Ce que nous appellerons modèle de microségrégation dans la suite de ce paragraphe constitue un abus de langage, puisque dans notre cas il s'agira du modèle permettant de déterminer à partir des variables macroscopiques l'enthalpie volumique H et la concentration volumique moyenne c les valeurs de la concentration dans le liquide c_l , de la fraction liquide g_l et de la température T . Notre modèle regroupe donc en plus du modèle de microségrégation proprement dit, les informations provenant du diagramme de phase et la relation liant l'enthalpie à la température et à la fraction liquide.

Le diagramme de phase que nous linéarisons, dont un exemple est donné à la Figure 2-24, nous fournit la valeur de la température, uniforme dans notre volume représentatif, en fonction de la concentration dans le liquide. Cette première relation peut s'écrire ainsi :

$$T = T_{liq} = T_f + mc_l \quad (2.5.1)$$

où m est la pente du liquidus et T_f la température de fusion du métal pur

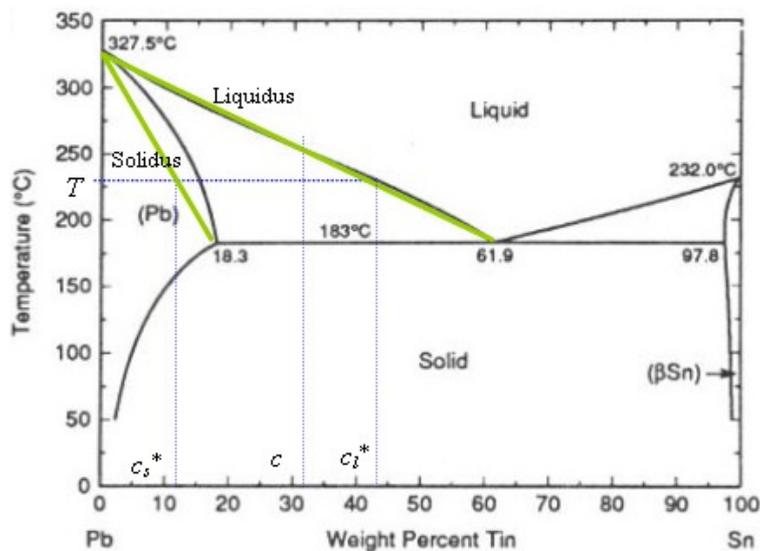


Figure 2-24 : Diagramme de phase de l'alliage plomb - étain (linéarisation en vert)

La seconde information fournie par le diagramme de phase est le coefficient de partage k_p , qui est constant dans notre cas puisque nous linéarisons le diagramme (de même que la pente du liquidus). Cette donnée est alors intégrée dans le modèle de microségrégation que nous utilisons : la loi des leviers. Ce modèle très simple suppose une diffusion parfaite dans le liquide et le solide à l'échelle microscopique comme nous l'avons vu dans le chapitre d'introduction. Ainsi la relation entre la concentration moyenne, la fraction liquide et la concentration liquide est la suivante :

$$c = g_s c_s + g_l c_l = k_p c_l + (1 - k_p) g_l c_l \quad (2.5.2)$$

La dernière information est constituée par la température du palier eutectique. Si cette réaction ne se produit pas systématiquement pour toutes les compositions d'alliage, il est

nécessaire de la prendre en compte lorsqu'elle se produit puisque alors la température reste constante pendant la solidification eutectique et la concentration atteint une valeur maximale. On différencie ainsi deux plages pour calculer la relation liant l'enthalpie, la température et la fraction liquide :

$$\begin{aligned} H &= \rho c_p T + \rho g_l \Delta h_{ls} & \text{si } T \neq T_{eut} \\ H &= \rho c_p T_{eut} + \rho g_l \Delta h_{ls} & \text{si } T = T_{eut} \end{aligned} \quad (2.5.3)$$

Dans cette équation, on a supposé que la densité et que la capacité calorifique étaient constantes pour simplifier. Cette relation est illustrée sur la Figure 2-25 qui présente l'évolution de l'enthalpie. Toutefois cette figure ne met pas évidence le fait que la valeur de l'enthalpie au début de la réaction eutectique, h_{eut} , varie en fonction de la concentration moyenne locale. En effet, dans le cas extrême où la concentration est très élevée avant solidification, h_{eut} va être quasiment égale à h_{liq} , la valeur au liquidus, a contrario pour un alliage à faible concentration la concentration eutectique peut n'être jamais atteinte.

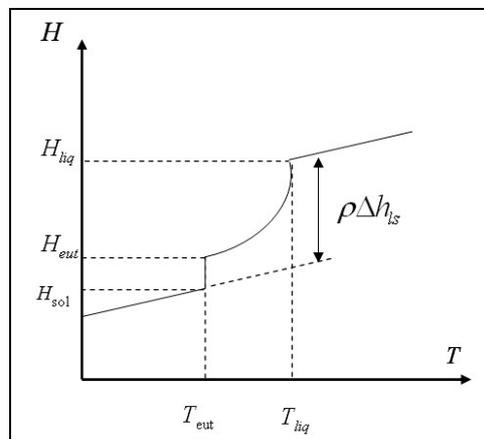


Figure 2-25 : Evolution de l'enthalpie volumique en fonction de la température avec une réaction eutectique

On peut alors résumer notre modèle de microségrégation par le système d'équations suivant (en supprimant la notion d'eutectique pour simplifier) :

$$\begin{cases} T = T_f + m \cdot c_l \\ c = (k_p + (1 - k_p)g_l) \cdot c_l \\ H = \rho c_p T + \rho g_l \Delta h_{ls} \end{cases} \quad (2.5.4)$$

La résolution simultanée de ces trois équations à partir des valeurs connues de h et c permet alors de déterminer la température T , la fraction liquide g_l , et la concentration moyenne dans le liquide c_l .

2.5.2. Résolution du transport de soluté

Nous allons résoudre l'équation de transport du soluté en nous basant sur l'équation présentée par [BENNON, 1987] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \nabla \cdot (\rho D \nabla (c_l - c)) - \nabla \cdot (\rho (c_l - c) \mathbf{V}) \quad (2.5.5)$$

où $D = g_l D_l$ car nous supposons que $D_s \ll D_l$.

Avec nos hypothèses, on peut écrire une version simplifiée de cette l'équation de transport du soluté sous la forme :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{V} \cdot \nabla c_l - \nabla \cdot (g_l D_l \nabla c_l) = 0 \quad (2.5.6)$$

Le terme de diffusion est exprimé en fonction de la concentration dans le liquide. Etant donné son rôle négligeable, nous l'avons exprimé en fonction de la concentration moyenne en utilisant un facteur de diffusion fixé arbitrairement. La diffusion n'apparaît alors plus que pour des raisons de stabilité numérique. Enfin le terme de convection est séparé en deux parties pour retrouver une équation principale ne s'exprimant qu'en fonction de la concentration moyenne. Cette méthode de splitting (cf. [PRAKASH, 1989]) est similaire à ce qui a été fait en thermique pour la résolution en enthalpie. Lors de la discrétisation temporelle, le terme de convection du membre de droite est exprimé au pas de temps précédent. On arrive alors à l'équation suivante :

$$\frac{c^{t+\Delta t}}{\Delta t} + \mathbf{V} \cdot \nabla c^{t+\Delta t} - \nabla \cdot (\varepsilon \nabla c^{t+\Delta t}) = \frac{c^t}{\Delta t} + \mathbf{V} \cdot \nabla (c^t - c_l^t) \quad (2.5.7)$$

Dans cette formulation nous avons exprimé notre équation en utilisant la concentration moyenne c comme variable principale. Il est aussi possible d'utiliser la concentration dans le liquide comme variable principale. Cependant le choix de la concentration moyenne nous est apparu plus pertinent car il permet d'étendre la formulation en utilisant plus facilement à d'autre modèle de microségrégation comme la loi de Scheil ou des modèles plus complexes.

Cette équation est ensuite discrétisée en employant des éléments finis tétraédriques linéaires. Nous avons aussi utilisé une stabilisation SUPG exactement identique à celle présentée pour la résolution de la thermique. La seule différence provient du calcul du nombre de Peclet solutal :

$$Pe_c = \|\mathbf{V}_{elt}\| \frac{h_{elt}}{\varepsilon} \quad (2.5.8)$$

où h_{elt} est la taille de l'élément dans la direction de la vitesse.

2.6. Résolution couplée des équations

Le système d'équations, composé des équations de la thermique, du soluté, de la mécanique et du modèle de microségrégation, est fortement couplé. En effet dans l'équation de la thermique apparaît le terme de changement de phase et donc la fraction liquide qui dépend de la concentration moyenne à travers le modèle de microségrégation. De plus la vitesse intervient par le terme de convection. De même l'équation de transport du soluté fait apparaître la concentration dans le liquide (liée à l'enthalpie) et la vitesse. Enfin dans l'équation de la mécanique apparaît le terme moteur représenté par une approximation de Boussinesq qui fait intervenir la température et la fraction liquide. De plus le terme de Darcy fait apparaître la perméabilité qui est très fortement liée à la fraction liquide. Notre schéma de résolution devrait donc consister en une résolution couplée de ces équations jusqu'à obtenir la

convergence. Cependant cette approche n'est pas réaliste en 3D car elle impliquerait une augmentation considérable du temps de calcul. De plus lors d'essais menés dans le cadre de la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005], il a été montré qu'une résolution à une seule itération donnait des résultats de bonne qualité en comparaison d'un couplage itératif complet. Cette étude a été réalisée avec l'équivalent 2D de THERCAST, R2SOL. Il semblerait toutefois que le couplage complet soit nécessaire dans le cas de la simulation des canaux ségrévés. Toutefois, le couplage à une itération est aussi capable de les prédire même si la précision est moindre et leur apparition plus difficile. Notre stratégie de couplage sera donc la suivante : à chaque incrément nous résoudrons successivement les équations de la thermique, du soluté et de la mécanique en prenant en compte les valeurs les plus récentes des variables servant au couplage. Ainsi notre méthode est similaire à un couplage complet mais nous ne faisons qu'une seule itération. Le déroulement d'un incrément suit alors le diagramme présenté sur la Figure 2-26, lorsque l'on ajoute l'étape de remaillage.

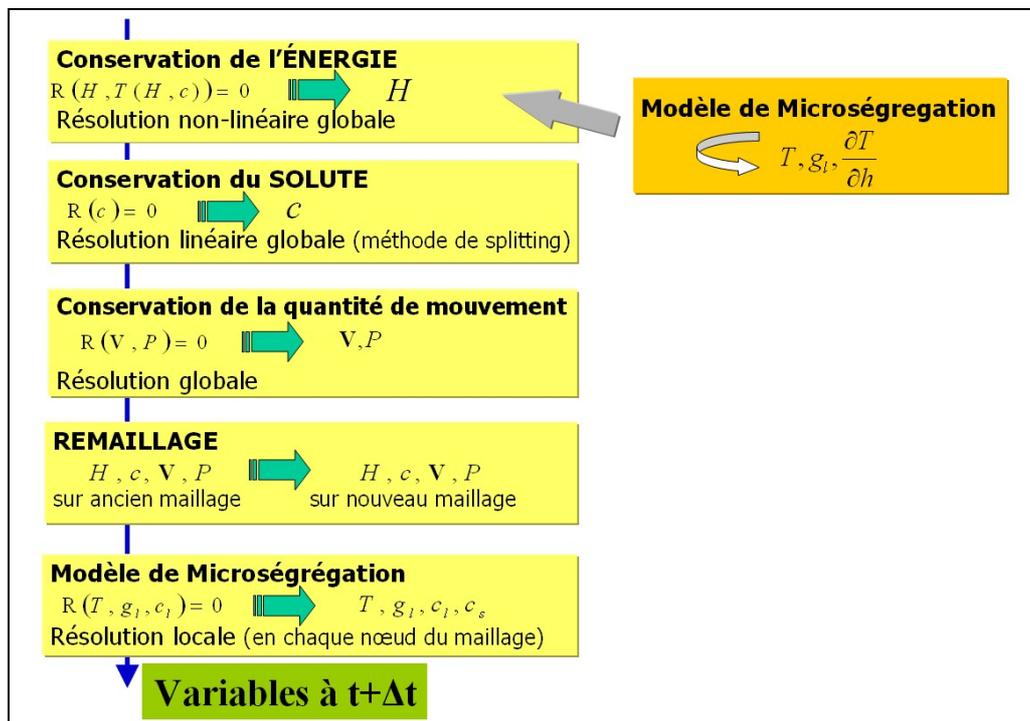


Figure 2-26 : Diagramme de résolution d'un incrément

Maintenant que nous avons vu les modèles utilisés dans ce travail nous allons dans les deux chapitres qui suivent découvrir le remaillage adaptatif et la stratégie spécifique qui a été développée au cours de cette thèse. Pour finir, nous appliquerons notre logiciel sur un cas expérimental de petite cavité pour l'alliage Pb-48%Sn et l'alliage Sn-5%Pb et aussi sur des calculs sur des lingots d'acier de grande taille. A partir de ces simulations, nous effectuerons des comparaisons avec d'autres codes et analyserons nos simulations sous les aspects thermique, mécanique et macroségrégation.

Chapitre 3 Adaptation de maillage pour la macroségrégation

| | | |
|------------|---|-----|
| Chapitre 3 | Adaptation de maillage pour la macroségrégation..... | 75 |
| 3.1. | Définitions générales concernant les maillages | 76 |
| 3.1.1. | Définitions d'un maillage..... | 76 |
| 3.1.2. | Définition d'une métrique | 78 |
| 3.1.3. | Présentation du mailleur MTC | 80 |
| 3.1.4. | Définition du remaillage adaptatif..... | 82 |
| 3.2. | Problématique du remaillage en solidification avec macroségrégation..... | 83 |
| 3.2.1. | Effet du maillage sur la prédiction de l'écoulement | 83 |
| 3.2.2. | Effet du maillage sur la prédiction du front de solidification | 84 |
| 3.2.3. | Effet du maillage sur la prédiction de la macroségrégation..... | 85 |
| 3.3. | Génération d'une métrique adaptée..... | 87 |
| 3.3.1. | Estimation d'erreur et remaillage adaptatif..... | 88 |
| 3.3.2. | Génération d'une taille de maille locale..... | 96 |
| 3.3.3. | Génération des coefficients d'anisotropie | 103 |
| 3.4. | Stratégie de remaillage | 106 |
| 3.4.1. | Détermination de la période de remaillage | 106 |
| 3.4.2. | Détermination de la métrique..... | 107 |
| 3.4.3. | Avantages et inconvénients..... | 108 |
| 3.5. | Amélioration de la stratégie de remaillage..... | 110 |
| 3.5.1. | Principe de l'extraction de maillage..... | 110 |
| 3.5.2. | Contrôle automatique du nombre d'éléments | 113 |
| 3.5.3. | Evolution des valeurs seuil du critère RGV..... | 114 |
| 3.5.4. | Evolution de la période de remaillage..... | 115 |
| 3.6. | Paramétrisation automatique du remaillage | 115 |
| 3.6.1. | Approximations pour la zone pâteuse | 116 |
| 3.6.2. | Définition du critère de vitesse à partir d'une corrélation de couche limite .. | 118 |
| 3.7. | Application de la stratégie de remaillage | 126 |

Au cours du développement des modules de macroségrégation dans THERCAST, plusieurs cas de calculs ont été testés sur différents lingots avec différents maillages. Ces tests ont mis en évidence qu'il était nécessaire d'appliquer des règles de bon sens lors de la génération du maillage initial, par exemple en raffinant le maillage à proximité des parois et dans la zone de refroidissement pour bien capter les forts gradients thermiques initiaux. Toutefois il est rapidement devenu clair que si cette approche permettait d'obtenir d'assez bons résultats sur de petits lingots, elle devenait irréaliste pour des lingots de plusieurs tonnes. Le remaillage adaptatif étant devenu nécessaire, une étude a été lancée pour déterminer les critères de remaillage les plus appropriés dans le cas de la simulation de la macroségrégation.

Ainsi dans ce chapitre, après avoir présenté les principales définitions concernant les maillages, nous verrons brièvement les particularités du remailleur MTC développé au Cemef. Ensuite un calcul simple nous montrera l'effet important du maillage sur la simulation numérique de la macroségrégation. Enfin nous expliquerons la philosophie du remaillage adaptatif et la stratégie développée au cours de cette étude. Un cas d'application du remaillage illustrera le fonctionnement de cette méthode.

3.1. Définitions générales concernant les maillages

Avant de présenter la stratégie d'adaptation de maillage et les particularités du remailleur utilisé, il convient de préciser quelques définitions permettant de percevoir les bases mathématiques de cette discipline. Une approche plus exhaustive de la génération des maillages est présentée dans [FREY, 1999]. La plupart des définitions présentées ici en sont extraites.

3.1.1. Définitions d'un maillage

Pour définir correctement un maillage, il est nécessaire de définir deux sous-ensembles.

Soit S un ensemble fini de points de \mathbb{R}^3 . L'enveloppe convexe de S , définit un domaine Ω de \mathbb{R}^3 . On note K tout simplexe (tétraèdre en 3D) et on considère cette entité comme un ensemble connexe et fermé. Alors un recouvrement τ_r de Ω au moyen de simplexes (ou recouvrement simplicial) correspond à la définition suivante :

Définition d'un recouvrement :

τ_r est un recouvrement simplicial de Ω si les conditions suivantes sont vérifiées :

- L'ensemble des sommets des éléments τ_r est exactement S
- $\Omega = \overline{\bigcup_{K \in \tau_r} K}$, où K est un simplexe
- L'intérieur de tout élément K de τ_r est non vide
- L'intersection de l'intérieur de deux éléments est vide

A partir de cette définition, on peut définir une triangulation :

Définition d'une triangulation :

τ_r est une triangulation de Ω si τ_r est un recouvrement et si de plus la condition suivante est satisfaite :

- L'intersection de deux éléments de τ_r est réduite :
 - o Soit à l'ensemble vide
 - o Soit à un sommet, une arête ou une face commun aux deux éléments en question

Considérons maintenant la discrétisation d'un volume à l'aide d'éléments.

Soit Ω un domaine borné de \mathfrak{R}^3 , il s'agit ici de construire une triangulation conforme de ce domaine. Une telle triangulation sera appelée un maillage de Ω et sera noté τ_h .

Définition d'un maillage :

τ_h est un maillage de Ω si :

- $\Omega = \overline{\bigcup_{K \in \tau_h} K}$
- L'intérieur de tout élément K de τ_h est non vide
- L'intersection de l'intérieur de deux éléments est vide

Le maillage est dit conforme si on ajoute la condition suivante :

- L'intersection de deux éléments de τ_h est
 - o L'ensemble vide
 - o Un sommet, une arête ou une face communs aux deux éléments en question

Ces définitions nous permettent déjà de voir une partie de la problématique de la représentation géométrique de volume par des éléments simples. En effet alors que la définition d'une triangulation est basée sur un contour convexe de points, la seconde correspond à la représentation d'un volume. Ces deux approches se rejoignent lorsque l'on considère un volume convexe dont la surface a été discrétisée. Cependant les volumes étudiés sont bien souvent très complexes et le traitement des zones concaves peut parfois être un problème pour les générateurs de maillages. Nous verrons donc dans la suite comment MTC, le mailleur topologique développé au Cemef résout ce type de problèmes.

Un autre point important à noter est le critère de non chevauchement des maillages. En effet lorsque l'on résout un problème numériquement il est important qu'une zone de l'espace ne corresponde pas à deux éléments sans quoi il pourrait apparaître des pertes ou des sources d'énergie non physiques. Par contre le critère de conformité n'est pas un élément obligatoire pour un maillage et cela est largement utilisé dans certaines techniques de raffinement de maillages comme l'illustre la Figure 3-1.

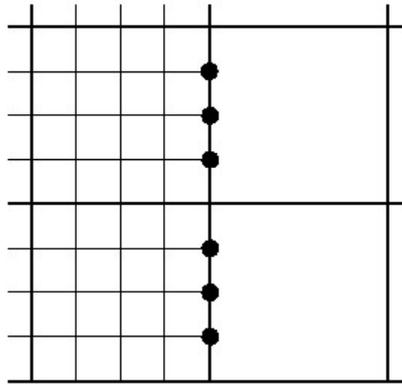


Figure 3-1 : Illustration d'un raffinement de maillage non-conforme [KAMPFER, 2002]

La génération d'un maillage est une opération complexe que nous n'aborderons que très rapidement lorsque nous décrirons le mailleur MTC. Mais un aspect important dans la génération d'un maillage est que l'on essaye en général d'optimiser le maillage généré, c'est-à-dire d'avoir des éléments aussi réguliers que possible. Cela correspond à des tétraèdres équilatéraux pour un espace normé standard. Cependant il est possible de raffiner le maillage dans certaines zones en utilisant la même méthode d'optimisation mais en l'appliquant sur un espace Riemannien pour lequel la mesure de la distance est définie localement. Cette mesure locale est appelée métrique.

3.1.2. Définition d'une métrique

Puisque la mesure des distances est généralement nécessaire à l'optimisation des maillages, il convient de rappeler quelques définitions.

Définition d'une distance :

On appelle distance toute application $d : \mathfrak{R} \times \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}_+$ telle que $\forall (x, y) \in \mathfrak{R}^2 :$

$$\begin{aligned} x = y &\Leftrightarrow d(x, y) = 0 \\ d(x, y) &= d(y, x) \\ d(x, y) &\leq d(x, z) + d(z, y) \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Définition d'une norme :

On appelle norme sur \mathfrak{R} toute application N de \mathfrak{R} dans \mathfrak{R}_+ telle que $\forall (x, y) \in \mathfrak{R}^2 :$

$$\begin{aligned} N(x) &= 0 \Leftrightarrow x = 0 \\ N(x + y) &\leq N(x) + N(y) \\ N(\lambda x) &= \lambda N(x) \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

Définition du produit scalaire :

On définit le produit scalaire comme un application bilinéaire f , telle que $\forall (x, y) \in (\mathfrak{R}^n)^2 :$

$$f(x, y) = \langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i \quad (3.1.3)$$

Ces définitions générales permettent d'introduire des notions de longueur plus générales que la longueur usuelle de l'espace euclidien classique. En effet la notion de produit scalaire peut être étendue de la manière suivante.

Définition d'une métrique :

On suppose qu'en tout point P de \mathfrak{R}^3 est donné un tenseur de métrique, sous la forme d'une matrice $M(P)$, (3x3) symétrique définie positive. Si le champ de tenseur ainsi défini est continu, il induit alors une structure riemannienne \mathfrak{R}^3 qui permet de redéfinir le produit scalaire comme suit :

$$\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle_{M(P)} = {}^t \vec{x} M(P) \vec{y} \quad (3.1.4)$$

Alors de manière similaire on peut définir une norme :

$$\|\vec{x}\| = \sqrt{\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle_{M(P)}} = \sqrt{{}^t \vec{x} M(P) \vec{x}} \quad (3.1.5)$$

Ces différentes définitions nous permettent de mesurer alors des distances et des longueurs d'arc. Ainsi si l'on considère la courbe paramétrique γ , sa longueur L est calculée en utilisant la formule suivante :

$$L(\gamma) = \int_0^1 \|\gamma'(t)\| dt = \int_0^1 \sqrt{{}^t \gamma'(t) M(\gamma(t)) \gamma'(t)} dt \quad (3.1.6)$$

La distance entre deux points devient alors la borne inférieure de la longueur des courbes qui les joignent.

Il est important de noter dans cette formule que la métrique M qui sert à calculer le produit scalaire peut être une fonction de la position spatiale. Le calcul des distances devient alors beaucoup plus complexe même si il peut être simplifié, par exemple on peut poser comme hypothèses que la métrique est constante dans chaque élément de notre maillage pour obtenir une approximation des distances. D'autres hypothèses plus précises ont été développées ainsi que des outils de manipulation de métriques mais ces points particuliers ne sont pas nécessaires à la compréhension de la méthode de remaillage présentée ici et nous renvoyons pour ces points à [GRUAU, 2004].

Forme matricielle de la métrique :

La métrique a été définie comme une matrice (3x3), or du fait qu'elle soit symétrique définie positive, il existe une base dans laquelle elle peut être diagonalisée. Il est donc possible de décomposer la métrique M sous la forme suivante :

$$M = R \cdot \begin{pmatrix} 1/h_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/h_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/h_3^2 \end{pmatrix} \cdot R \quad (3.1.7)$$

On voit ainsi apparaître une matrice de rotation qui représente la direction du maillage. D'autre part les coefficients diagonaux ont été écrits de cette manière car ils mettent ainsi en valeur les tailles h_i de la métrique dans chacune des directions. En effet si un élément respecte ces tailles dans chacune des directions alors il sera équilatéral au sens de la métrique M et donc le maillage correspondant sera optimal pour la métrique M .

La métrique est aussi fréquemment représentée par une ellipse en 2D (un ellipsoïde en 3D) comme l'illustre la Figure 3-2. Cette représentation permet de mieux visualiser la forme des éléments que l'on devrait obtenir en appliquant une telle métrique avec le mailleur.

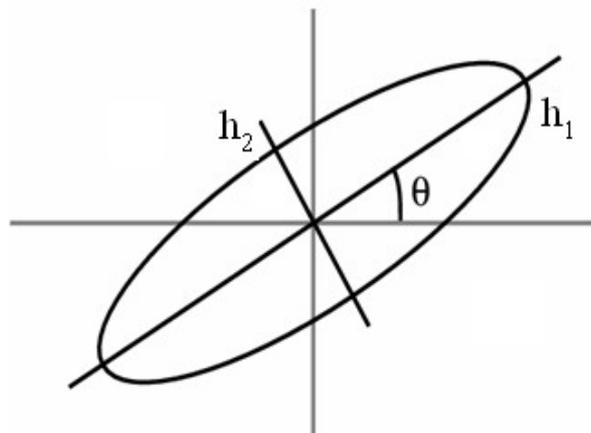


Figure 3-2 : Représentation d'une métrique 2D

3.1.3. Présentation du mailleur MTC

Le mailleur MTC utilise une méthode d'optimisation topologique que nous allons présenter rapidement. Une description plus complète est disponible dans [COUPEZ, 2000] et [GRUAU, 2004].

Définition d'une topologie de maillage :

La première définition à prendre en compte est celle de topologie qui pour un maillage est l'ensemble des éléments qui le composent. La définition d'une topologie de maillage est différente :

Soit S un ensemble fini de points de \mathfrak{R}^3 délimitant un domaine Ω pas forcément convexe, soit τ un ensemble de simplexes dont les sommets appartiennent à S et notons F l'ensemble des faces de ces simplexes. τ est une topologie de maillage si et seulement si :

- Chaque face de F partage un ou deux éléments de τ mais pas plus
- $(S, \partial\Omega)$ est un maillage de la frontière de $\partial\Omega$

Dans cette définition des éléments peuvent avoir une intersection de leur intérieur non nulle. L'ensemble des éléments ne forment donc pas un maillage a priori mais peuvent se recouvrir et sortir même du domaine dans des zones concaves.

On a donc seulement la relation suivante : $\Omega \subset \bigcup_{K \in \tau} K$.

Optimisation de la topologie :

Ainsi une topologie de maillage est un maillage si et seulement si les simplexes K sont non dégénérés et si : $\sum_{K \in \tau} |K| = |\Omega|$. On appelle ce critère le critère de volume minimal.

MTC fonctionne donc par optimisation d'une topologie initiale basée sur un maillage de la surface obtenue séparément. Bien entendu au cours du procédé d'optimisation du volume on privilégie les éléments qui ont la meilleure qualité calculée à partir de la métrique locale.

La Figure 3-3 présente le résultat de cette optimisation progressive de topologie de maillage qui permet d'obtenir un maillage final de bonne qualité.

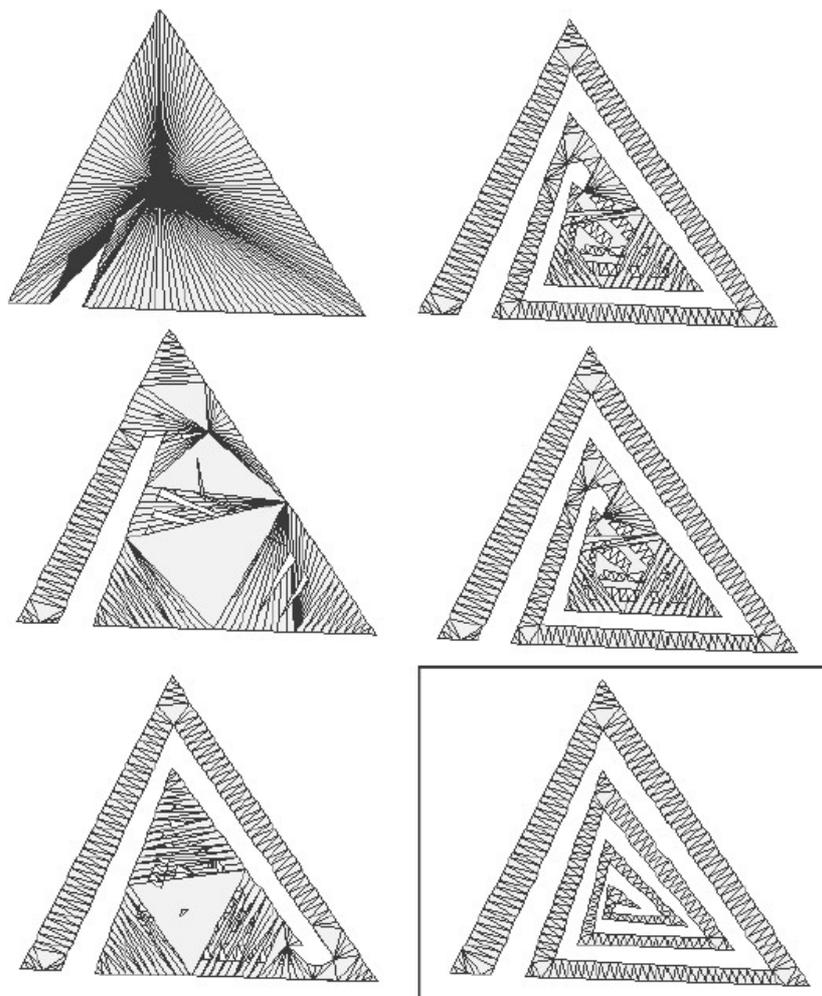


Figure 3-3 : Génération d'un maillage 2D par optimisation topologique [GRUAU, 2004]

3.1.4. Définition du remaillage adaptatif

Le remaillage adaptatif peut être défini comme une redéfinition de la discrétisation spatiale du domaine d'étude en fonction de la solution numérique obtenue sur un précédent maillage. L'objectif est d'avoir a posteriori un maillage qui est approprié à la résolution numérique des équations avec le maximum de précision possible.

Cette première définition induit déjà quelques remarques d'ordre général. En premier lieu, il convient de remarquer que l'adaptation se fait en fonction d'une résolution numérique et n'est donc pas indépendante de la méthode de résolution. Il se peut qu'une résolution nécessite par exemple une taille d'élément plus faible qu'une autre résolution pour avoir tout de même une précision équivalente dans les résultats. En second lieu, cette approche est particulièrement efficace sur des problèmes stationnaires pour lesquels on peut conduire une adaptation du maillage progressive qui produit alors une solution de grande qualité. Dans le cas de la résolution d'un problème instationnaire, le maillage ne sera pas toujours adapté à la solution que l'on est en train de calculer, il y a aura toujours un décalage entre le maillage et la solution numérique. Cela induira par la suite une discussion sur la définition d'une période adéquate de remaillage.

Enfin, et cette remarque n'est pas la moindre, l'adaptation de maillage est basée sur une solution numérique obtenue sur un maillage initial. Ainsi ce premier maillage est parfois d'une importance cruciale parce qu'il ne permet pas forcément la capture de certains phénomènes particuliers qui n'auront alors par la suite aucune chance d'apparaître puisque le maillage s'adaptera à cette première solution. Il est donc essentiel de bien définir le maillage initial et de s'assurer que le remaillage adaptatif répond bien aux attentes en matière de précision et aussi de qualité de la solution. Ce couplage fort entre la solution numérique et le maillage est très important lorsque l'on souhaite appliquer un maillage adaptatif qui évolue au cours du calcul.

On peut schématiser la procédure d'adaptation de la manière suivante :

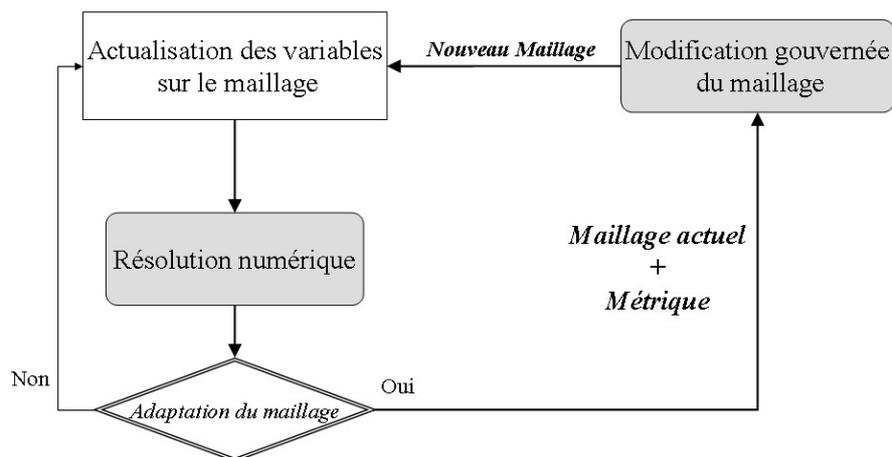


Figure 3-4 : Diagramme de remaillage adaptatif

3.2. Problématique du remaillage en solidification avec macroségrégation

La résolution d'un problème couplé aussi complexe que la solidification nécessite la prise en compte de différents aspects dans le remaillage. En effet plusieurs problèmes numériques ou physiques nécessitent une adaptation particulière du maillage. Dans cette partie nous allons donc prendre connaissance de la problématique du remaillage en solidification à travers trois points particuliers apparus au cours des différents tests. Le premier point est l'effet du maillage sur l'écoulement, il est en effet évident que le maillage aura un effet notable sur la solution des équations de Navier-Stokes. Dans le second point, on entre déjà au cœur de notre problématique en analysant rapidement l'effet du maillage sur le front de solidification et les conséquences néfastes d'un maillage grossier sur la fraction liquide et la ségrégation à travers le couplage des équations. Enfin nous verrons comment un maillage trop grossier, qui produit quand même une solution de bonne qualité, c'est-à-dire sans oscillations de la fraction liquide ou de la vitesse, ne permet pas de capturer la macroségrégation.

Cette première approche de la problématique du remaillage est loin d'être exhaustive, de nombreux problèmes numériques ne sont pas présentés mais il est essentiel d'être bien conscient que le maillage va conditionner le pas de temps et peut conduire à des divergences dans la résolution de la mécanique impliquant un arrêt du programme ou une diminution très importante des pas de temps conduisant à des temps de calculs très importants.

3.2.1. Effet du maillage sur la prédiction de l'écoulement

L'effet du maillage sur la solution numérique des équations de Navier-Stokes est un sujet déjà bien documenté et il est clair que la capture de la couche limite dynamique nécessite un maillage très fin près des parois. Cet aspect, très étudié dans le domaine de l'aéronautique, a conduit à la mise en place de lois de paroi, de décalage virtuel de paroi et d'autres artefacts permettant une prise en compte de la couche limite sans nécessairement la simuler directement. Dans notre cas ces approches ne peuvent être employées car la « paroi » représentée par le front de solidification est mobile et il est très important de simuler l'écoulement dans cette zone car c'est ici que le transport de soluté est prépondérant. Il est donc essentiel de bien capturer efficacement l'écoulement dans ces zones particulières.

On peut illustrer l'effet du maillage sur le cas de la cavité entraînée utilisé précédemment pour comparer les méthodes de résolution des équations de Navier-Stokes. Le tracé des courbes de vitesses (Figure 3-5) sur la section horizontale pour deux maillages différents montre ainsi des disparités importantes.

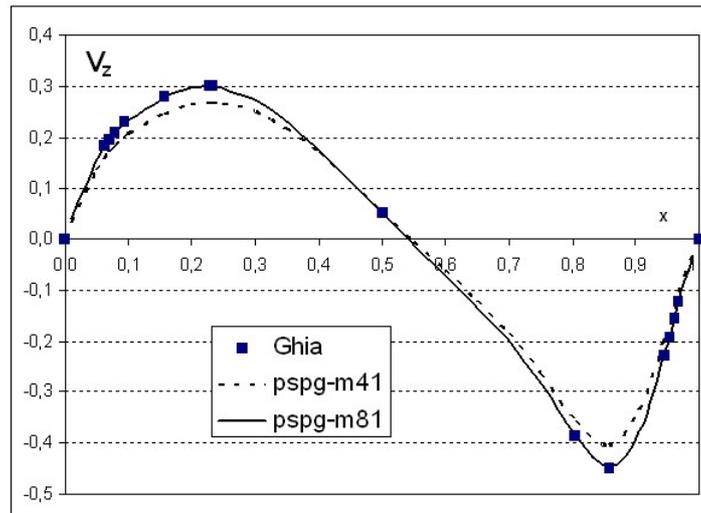


Figure 3-5 : Courbe de la vitesse verticale sur la section centrale horizontale de la cavité entraînée à $Re=400$, pour la méthode de résolution SUPG-PSPG, sur les maillages m41 et m81

3.2.2. Effet du maillage sur la prédiction du front de solidification

Une des difficultés rencontrée lors de l'étude de la macroségrégation a été d'obtenir une solution raisonnable de l'écoulement à proximité et dans la zone pâteuse. En effet les variations très importantes du terme de Darcy dans l'équation de la quantité de mouvement induisent un mauvais conditionnement de la matrice de raideur. Il apparaît alors nécessaire d'avoir un maillage assez fin dans cette zone pour que les variations de la fraction liquide et donc de la perméabilité ne soient pas trop importantes à l'intérieur d'un même élément.

Les calculs de la Figure 3-6 montrent ainsi que la forme du front de solidification est très fortement influencée par la taille de maille. Le premier maillage comporte 47731 éléments, le second 55710 éléments et le dernier 336078 éléments. On peut ainsi remarquer qu'une faible augmentation du nombre d'éléments dans la zone critique permet d'améliorer de manière importante la qualité de la solution. Cette amélioration est particulièrement nette sur les courbes de ségrégation du maillage où les singularités ont presque complètement disparu.

D'autre part, cet exemple illustre aussi le couplage fort entre la forme du front de solidification et les variations de la concentration moyenne. Les irrégularités dans la fraction liquide reflètent des irrégularités dans la vitesse ce qui induit un mouvement du soluté et donc des singularités de concentration moyenne qui fausseront d'autant plus la suite des calculs.

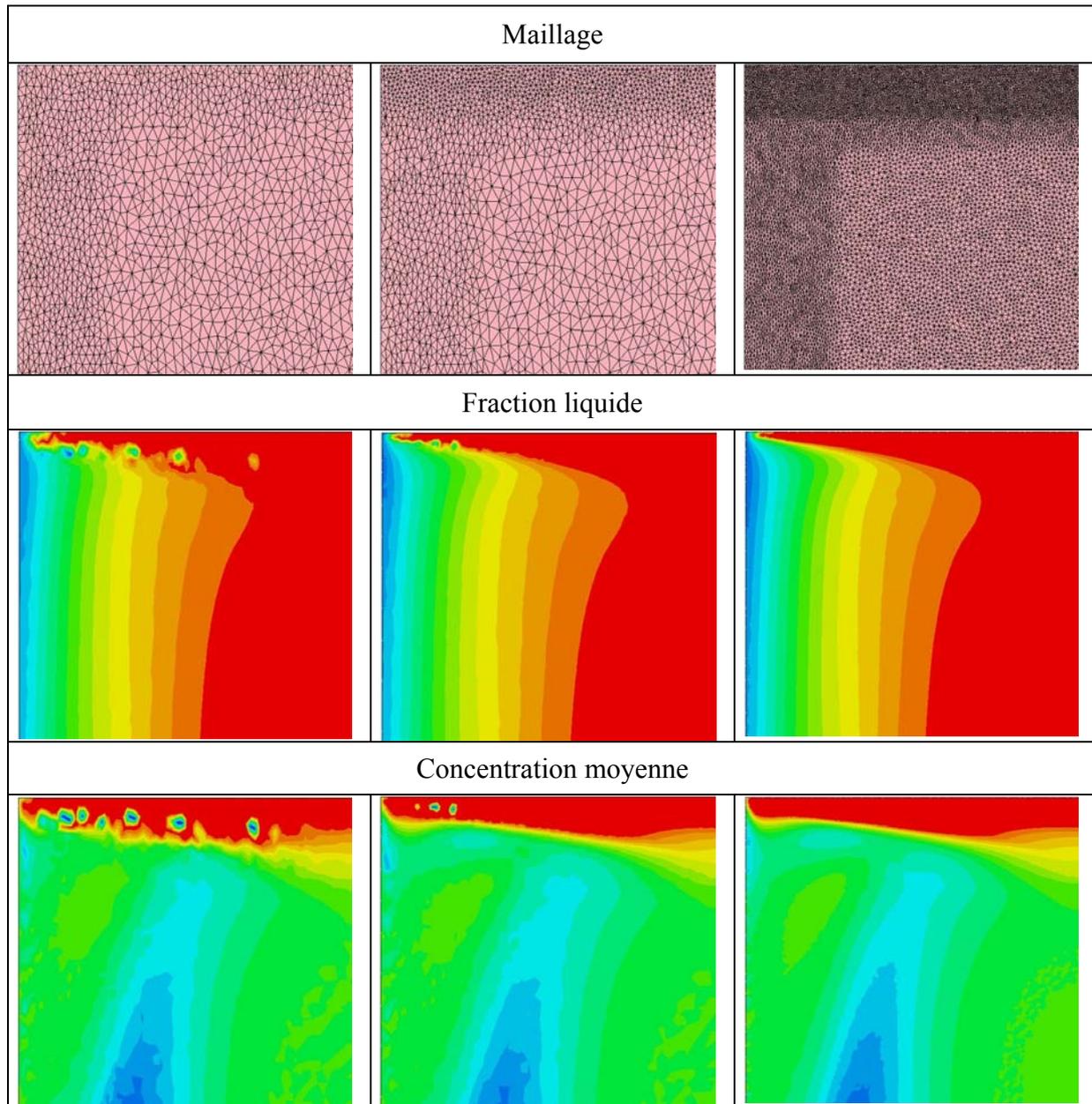


Figure 3-6 : Illustration de l'effet du maillage fixe sur le front de solidification (portion supérieure gauche d'une cavité rectangulaire refroidie par la paroi gauche)

3.2.3. Effet du maillage sur la prédiction de la macroségrégation

La nécessité d'un maillage adapté est essentielle dans la zone pâteuse pour que l'on puisse capturer le transport de soluté des parties en train de solidifier vers la poche liquide. Cette redistribution est à la base de la macroségrégation et sans cette partie la ségrégation ne présente plus que des oscillations locales qui sont dues uniquement à des irrégularités thermiques qui induisent des accumulations locales de soluté.

Lors des étapes pour passer de la simulation d'un petit lingot pseudo-2D à la simulation d'un process industriel qui comprend un lingot de plusieurs tonnes entouré de

moules et de réfractaires, différents cas ont été testés. Le cas suivant illustre bien le problème que l'on rencontre lors de ce changement d'échelle. Il s'agit pourtant d'un lingot 3D de taille intermédiaire mais déjà les problèmes dus à la taille de maille sont très nets.

La Figure 3-7 présente la géométrie du lingot dont nous simulerons seulement une portion cylindrique de 30°. Le moule est refroidi par un coefficient constant d'échange convectif avec l'air. La surface libre du lingot est considérée comme adiabatique. Sur la Figure 3-7, le maillage initial est représenté ainsi que le maillage adapté après 50s de refroidissement.

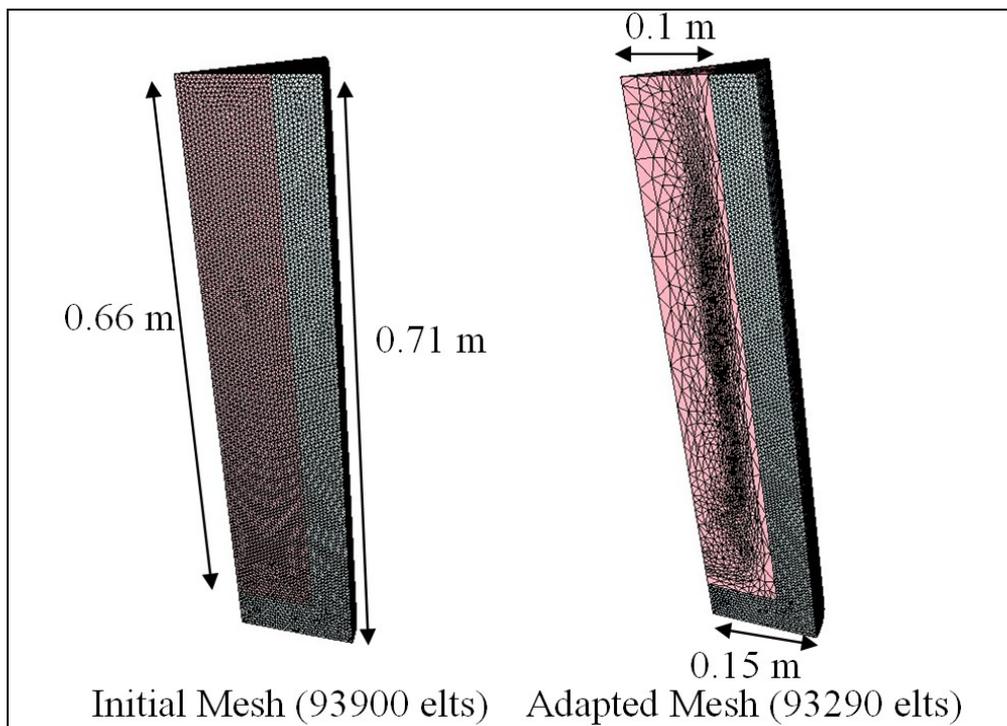


Figure 3-7 : Schéma du lingot test intermédiaire, maillage fixe et maillage adapté après 50s de refroidissement

En effet dans ce test, on compare les solutions sur un maillage fixe et sur un maillage adaptatif anisotrope généré avec la stratégie d'adaptation que nous allons présenter dans le paragraphe suivant. On peut noter que le nombre d'éléments des deux maillages est équivalent. Pourtant lorsque l'on visualise les courbes d'écart de concentration moyenne (Figure 3-8), une très nette différence apparaît. Alors que les résultats sur le maillage fixe montrent seulement des oscillations non significatives, sur le maillage adapté on peut déjà voir apparaître certaines tendances et les zones de ségrégation positive et négative sont clairement visibles.

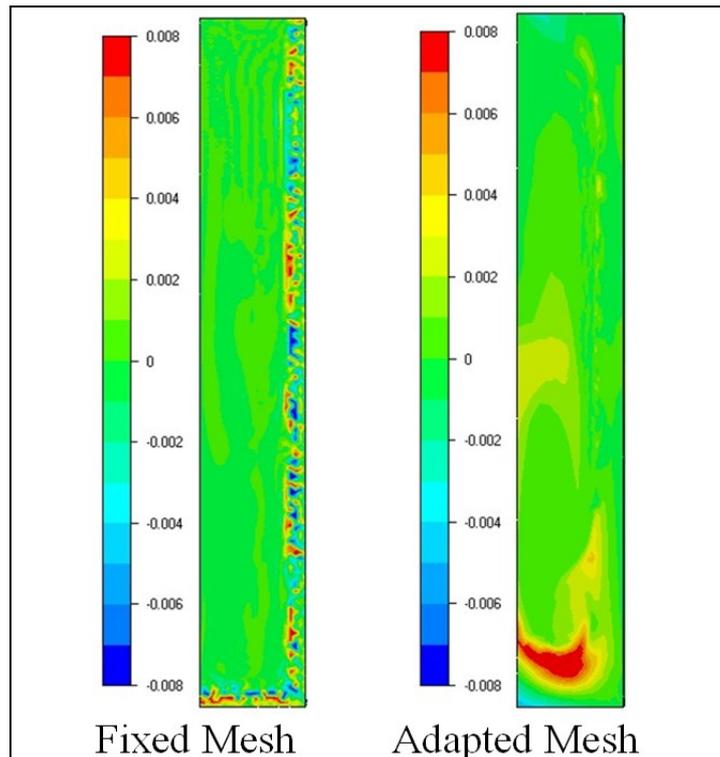


Figure 3-8 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) sur le lingot test intermédiaire pour le maillage fixe et le maillage adapté, pour un alliage Fe-0.38%C, après 50s de refroidissement

Ce test nous permet de conclure à la nécessité du maillage adaptatif pour la simulation de la macroségrégation sur des lingots de taille importante. D'autre part ce calcul démontre aussi que lors de la résolution de la ségrégation il apparaît numériquement des oscillations dans la solution. Ces oscillations peuvent donc conduire à des divergences dans les calculs si elles apparaissent dans une zone instable ou le couplage avec les autres équations va conduire à une aggravation de la singularité. Une bonne solution basée sur un maillage fin permet d'éviter ce type de problème.

3.3. Génération d'une métrique adaptée

L'objectif de la résolution numérique est de trouver une solution approchée aussi proche que possible de la solution réelle. Dans cette optique, on cherche donc à minimiser l'erreur que l'on commet en approchant notre domaine par une discrétisation spatiale à l'aide du maillage. Ainsi la méthode classique d'adaptation de maillage est basée sur une estimation de l'erreur et ensuite une optimisation du maillage au sens de cette erreur. Nous allons donc rapidement présenter quelques travaux récents dans ce domaine sur des applications proches de notre problème de macroségrégation. Ensuite nous verrons pourquoi cette approche n'a pas été utilisée ici et nous décrirons finalement la méthode de génération de métrique qui a été développée.

3.3.1. Estimation d'erreur et remaillage adaptatif

L'estimation de l'erreur d'une solution numérique d'un problème physique est un domaine vaste et complexe du fait de la diversité des approches pour obtenir une bonne approximation. Le critère de mesure de l'erreur est bien souvent spécifique à un type de problématique et n'est pas souvent généralisable de manière immédiate. Pour se faire une première idée du type de travaux dans ce domaine, on pourra se reporter à la thèse de R. Boussetta [BOUSSETTA, 2005] qui présente une application de l'estimation d'erreur à un procédé de forgeage. On y trouvera une description bien plus détaillée de la théorie et de l'application pratique que les quelques lignes qui vont suivre. Cependant quelques concepts de base doivent être présentés pour éclaircir les justifications de l'approche de remaillage que nous avons choisie.

Définition de l'erreur :

Soient f et f_h les solutions exacte et approchée par les éléments finis d'une équation. L'erreur ponctuelle pour cette fonction f peut être définie comme suit :

$$e_h^f = f - f_h \quad (3.3.1)$$

Où l'indice h indique la solution éléments finis.

A proximité de singularités, cette valeur peut devenir très grande alors que globalement la solution est acceptable. Il est donc nécessaire de mesurer l'erreur d'une autre manière. On utilise alors couramment des normes représentant l'intégrale de valeurs scalaires. L'utilisation d'une intégrale permet de supprimer l'effet de ces singularités et d'avoir une estimation de l'erreur plus globale.

Voyons maintenant quelques exemples de normes :

$$\text{Norme } L^2 : \|f\|_{L^2} = \left(\int_{\Omega} f^2 d\omega \right)^{1/2} \quad (3.3.2)$$

$$\text{Norme } H^1 : \|f\|_{H^1} = \left(\int_{\Omega} \left(f^2 + \sum_{i=1}^3 \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|^2 \right) d\omega \right)^{1/2} \quad (3.3.3)$$

En plus de ces normes aux définitions générales, il existe aussi des normes définies pour des problèmes particuliers, ainsi la norme en énergie suivante dédiée à l'étude des écoulements et de la déformation des structures.

$$\text{Norme en énergie} : \|v\|_E = \left(\int_{\Omega} \sigma(v) : \dot{\epsilon}(v) d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.3.4)$$

L'erreur est alors mesurée en appliquant ces normes :

$$e_h^f = \|f - f_h\| \quad (3.3.5)$$

Toutefois cette définition est difficilement utilisable en pratique car elle nécessite une connaissance de la fonction exacte, elle n'est donc utilisée que pour des cas de validation académique sur des géométries simples. Pour s'affranchir de ce problème, on est conduit à utiliser des estimations de l'erreur.

Méthodes d'estimation de l'erreur

On définit θ_h comme une estimation de l'erreur $\|e_h\|$ si :

$$\exists(\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{R}^2 / \alpha_1 \theta_h \leq \|e_h\| \leq \alpha_2 \theta_h \quad (3.3.6)$$

Deux approches principales existent pour l'estimation d'erreur basée sur les résidus et l'estimation d'erreur par recouvrement [ZIENKIEWICZ, 2000]. Ces deux méthodes évaluent l'erreur a posteriori à partir d'une solution obtenue sur un maillage initial. Il existe aussi des méthodes qui fournissent une estimation a priori de l'erreur basée sur la géométrie, le maillage, le type d'éléments et des résultats théoriques de précision. Cependant cette méthode est délicate à mettre en œuvre et est plus souvent utilisée pour obtenir des taux de convergence.

Estimateur d'erreur basé sur les résidus :

Ce type d'estimateur repose sur une résolution de l'équation différentielle pour l'erreur. En effet, on peut calculer à l'intérieur de chaque élément une erreur qui est la solution de l'équation différentielle sur cet élément avec pour second membre le résidu de la solution éléments finis. Il est par contre généralement nécessaire de connaître les flux sur les faces de l'élément. Cette technique d'estimation d'erreur implique donc une reconstruction du flux qui est normalement inconnu. Un exemple d'application de cette technique est présenté au chapitre 14 dans [ZIENKIEWICZ, 2000], nous allons reprendre cet exemple pour illustrer cette approche.

Considérons l'équation de diffusion de la chaleur en statique et en stationnaire :

$$-\nabla \cdot (\kappa \nabla T) = Q \quad (3.3.7)$$

Pour ce problème, la mesure de l'erreur par la norme en énergie s'écrit :

$$\|e_h\| = \left(\int_{\Omega} (\nabla T) \kappa \nabla T d\Omega \right)^{1/2} \quad (3.3.8)$$

Considérons maintenant un élément i intérieur au domaine, en remplaçant la solution éléments finis T_h dans l'équation (3.3.7) et en la soustrayant à cette même équation, on obtient :

$$-\nabla \cdot (\kappa \nabla e) = r_i \quad (3.3.9)$$

où r_i est le résidu éléments finis : $r_i = \nabla \cdot (\kappa \nabla T_h) + Q$

avec comme condition aux limites sur la frontière de l'élément :

$$-(\kappa \nabla e) \cdot \mathbf{n} = q - q_h \quad (3.3.10)$$

où q est le flux de chaleur sortant de l'élément, \mathbf{n} étant la normale sortante.

Pour résoudre ce problème il est nécessaire de connaître le flux normal exact ce qui n'est pas le cas en général. On cherche alors à obtenir une estimation de ce flux, q^* , par recouvrement en prenant en compte l'élément et ses voisins. La solution approchée des équations précédentes est l'estimateur d'erreur résiduel de l'élément. De nombreuses techniques permettent d'obtenir un recouvrement du flux, cependant on peut garantir l'existence d'une solution si le flux est calculé de telle manière que le résidu satisfasse l'équation suivante :

$$\sum_j \left(\int_{\Omega_i} N_j r_i d\Omega + \int_{\Gamma_i} N_j (q^* - q_h) d\Gamma \right) = 0 \quad (3.3.11)$$

où j indique les nœuds de l'élément i . On obtient ainsi une équation par élément.

Le point essentiel de cette technique est la reconstruction du flux qui va déterminer la qualité de l'estimateur d'erreur en chaque élément. Cette technique a donc des points communs avec la technique suivante qui pousse plus loin la technique de recouvrement.

Estimateur d'erreur par recouvrement :

Pour obtenir la valeur de l'erreur il est nécessaire de connaître la solution exacte or cela est rarement possible. La technique de recouvrement permet d'obtenir une estimation plus précise de la solution exacte et on l'utilise donc en lieu et place de la valeur exacte, l'estimateur d'erreur s'écrit alors :

$$\|e\| \approx \|e^*\| = \|f^* - f_h\| \quad (3.3.12)$$

Où l'exposant * indique la solution obtenue par recouvrement.

De nombreuses techniques de recouvrement sont disponibles, on peut citer celles présentées dans [ZIENKIEWICZ, 2000] : méthode SPR (Superconvergent Patch Recovery), méthode REP (Recovery by Equilibration of Patches) ou aussi la méthode MPR (Minimal Patch Recovery) décrite dans [BOUSSETTA, 2005].

Les techniques de recouvrement couramment employées utilisent une propriété d'augmentation de la vitesse de convergence qui est appelée superconvergence. Cet aspect est le point clé de la compréhension de cette méthode d'estimation d'erreur. En certains points la qualité de la solution du gradient est meilleure que dans le reste de l'élément. Cela est illustré sur la Figure 3-9 qui montre les points optimums pour un calcul 1D. Cette propriété est généralisable au 3D et il existe des points à l'intérieur de l'élément pour lesquels l'erreur sur la prédiction du gradient est plus faible. D'autre part en ces points, la diminution de l'erreur est plus rapide que partout ailleurs. C'est ce que l'on appelle la superconvergence.

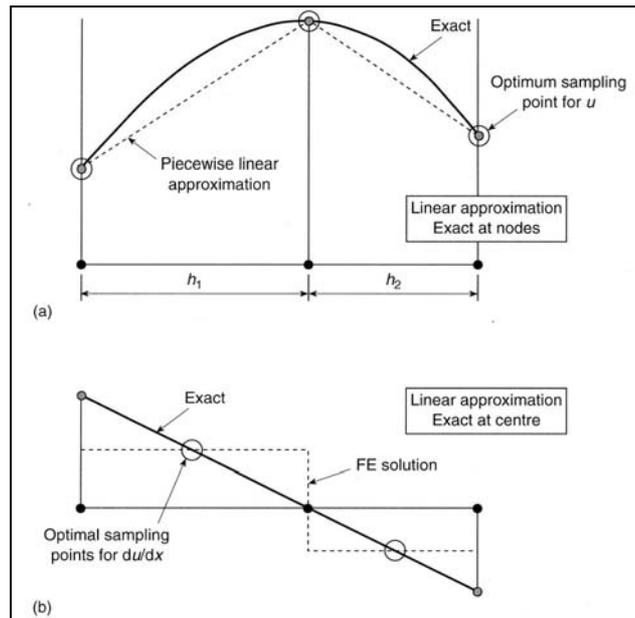


Figure 3-9 : Points optimum de recouvrement (a) fonction (b) gradient pour un élément linéaire 1D [ZIENKIEWICZ, 2000]

Cette propriété est alors employée pour obtenir une meilleure approximation de la solution en utilisant les valeurs en ces points particuliers pour obtenir ensuite une solution qui nous permette de calculer une estimation de l'erreur. Du fait que l'erreur décroît plus vite en ces points la solution y est alors plus proche de la solution exacte c'est pourquoi on se base sur ces points pour retrouver une solution globale.

Ainsi l'estimateur d'erreur fournit des informations sur l'erreur locale et globale. Ces informations sont ensuite utilisées pour calculer la métrique locale. Pour qu'un maillage soit optimal il suffit que l'erreur soit répartie uniformément sur tous les éléments. L'optimisation du maillage peut s'effectuer suivant deux approches complémentaires. La première consiste à imposer l'erreur à un certain seuil et à minimiser le nombre d'éléments, la seconde consiste à imposer un nombre d'éléments et à minimiser l'erreur.

Dans les paragraphes qui suivent nous allons voir comment ces techniques sont employées en solidification ou dans la résolution d'écoulements. Ainsi nous aurons une meilleure vision de leur intérêt et de leur implémentation dans un code de prédiction de la macroségrégation.

Application des estimateurs d'erreur à un calcul Navier-Stokes

Dans le domaine de la CFD (Computational Fluid Dynamics), de nombreux problèmes requièrent l'adaptation de maillage en particulier pour traiter les singularités comme les ondes de choc. Certes il existe des méthodes de stabilisation qui permettent de traiter ces phénomènes mais l'accroissement de la précision dans ces zones de fortes variations nécessite l'augmentation du nombre de nœuds. Il est alors primordial d'identifier ces zones et de bien gérer la répartition des nœuds entre les parties raffinées et le reste du domaine. Le maillage adaptatif est donc tout spécialement indiqué pour traiter ce genre de problème. Dans l'article [ALMEIDA, 2000], une stratégie de remaillage adaptatif anisotrope est présentée et testée de manière détaillée. Nous allons donc résumer rapidement leur méthode adaptative de génération de maillage anisotrope.

D'après Almeida *et al.*, lorsque les éléments sont très étirés il est difficile d'appliquer directement les méthodes classiques de recouvrement, c'est pourquoi ils les appliquent sur un domaine normalisé en fonction de la métrique locale $M(N)$:

$$\mathbf{M}(N) = \frac{1}{s(N) \cdot h(N)} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \frac{1}{h(N)} \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 \quad (3.3.13)$$

Où h est la taille de maille et s le facteur d'étirement (stretching) dans la direction du vecteur \mathbf{e}_1 . L'algorithme de calcul par recouvrement du hessien sur le patch modifié par la métrique est présenté dans le Tableau 3-1. Toutefois l'obtention de ce hessien n'est pas suffisant car en général cette matrice n'est pas définie positive. On génère alors une nouvelle matrice :

$$\mathbf{G} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{Q}^T \quad (3.3.14)$$

Où \mathbf{Q} est la matrice des vecteurs propres de Hr et $\mathbf{\Lambda}$ la matrice diagonale des valeurs absolues croissantes des valeurs propres de Hr .

L'estimateur d'erreur anisotrope est alors défini par :

$$\eta_T = \left\{ \int_{\Omega_T} (\mathbf{G}(x_0)(x-x_0) \cdot (x-x_0))^p d\Omega \right\}^{1/p} \quad (3.3.15)$$

Où T est un élément du maillage.

L'estimateur de l'erreur globale est obtenu par :

$$\eta = \left\{ \sum_{T \in \tau_h} (\eta_T)^p \right\}^{1/p} \quad (3.3.16)$$

Dans l'article [ALMEIDA, 2000], la procédure de génération d'un maillage optimal est aussi décrite mais nous ne nous attarderons pas dessus. Cette brève présentation de la méthode de génération de calcul de l'erreur nous a déjà permis de nous rendre compte de la complexité du problème en particulier pour les maillages très anisotropes. Il est en effet très important dans ce type d'approches de bien maîtriser les techniques de recouvrement pour obtenir une évaluation de l'erreur de bonne qualité et ne pas perdre d'informations sur des zones critiques.

Tableau 3-1 : Algorithme de recouvrement du gradient [ALMEIDA, 2000]

| | |
|-------|---|
| (i) | Définir le patch associé au nœud N |
| (ii) | Construire le tenseur de métrique $M(N)$ à partir du maillage autour du point N , des tailles de maille et des vecteurs d'orientation |
| (iii) | Transformer les éléments du patch |
| (iv) | Calculer le gradient en chaque nœud du maillage transformé |
| (v) | Utiliser l'algorithme de recouvrement pour calculer le gradient au nœud N |
| (vi) | Transformer le gradient recouvert pour le ramener sur le domaine de départ $\rightarrow Hr$ |

Les auteurs montrent ainsi que la mise en place d'un estimateur d'erreur est une opération complexe qui demande des validations importantes. La structure de leur validation comprend trois grandes étapes : validation de la méthode de recouvrement sur une fonction exacte, validation sur un cas simple par comparaison avec une solution analytique, validation sur des cas proches du problème physique étudié.

Ainsi dans un premier temps, on cherche à montrer que l'erreur estimée est de bonne qualité. C'est pourquoi on sélectionne une fonction qui varie rapidement et on lui applique l'estimateur d'erreur. Comme on connaît la solution d'ensemble et la solution en chacun des nœuds, on peut ainsi évaluer l'efficacité de l'estimateur qui doit nous donner une erreur correspondant à l'erreur de discrétisation. Le test est donc effectué sur plusieurs maillages. Après le test de différentes techniques de recouvrement, l'estimateur d'erreur est utilisé pour calculer une métrique et adapter le maillage. On vérifie ainsi que le maillage adapté final permet bien de réduire l'erreur et s'accorde à la fonction exacte utilisée.

La validation fondamentale de l'algorithme de recouvrement et de l'estimateur d'erreur ayant été faite, il est alors nécessaire de tester le couplage avec la résolution numérique. Dans ce but on résout un problème comportant une solution analytique. Il est alors une fois de plus possible de connaître une solution exacte et ainsi d'estimer correctement les erreurs réelles et de les comparer avec les résultats de l'estimateur d'erreur. D'autre part l'adaptation du maillage est aussi réalisée conformément à la solution. On peut donc observer la convergence de la solution et du maillage vers la solution exacte. Dans chacun de ces calculs, les maillages adaptés comportent des éléments très étirés pour tester les particularités de l'estimateur anisotrope.

Pour finir la validation, des simulations d'écoulements compressibles sont effectuées. En particulier, le cas du choc supersonique sur une plaque plane est étudié. Ce cas classique et bien documenté permet de vérifier la capture du choc et son bon positionnement. La capture de cette singularité dont la position est a priori inconnue permet de valider complètement le couplage entre la résolution des équations, l'estimateur d'erreur, le calcul de la métrique et la génération du maillage.

Cet exemple démontre d'une part la complexité de la mise en place d'un estimateur d'erreur anisotrope pour un calcul Navier-Stokes, qui est plus simple que les calculs de macroségrégation. D'autre part la validation progressive de cette approche nécessite une grande rigueur et de nombreux calculs pour bien tester les différentes étapes et les couplages entre la solution et la génération d'un nouveau maillage.

Application des estimateurs d'erreur à un calcul de solidification

L'objectif des premières méthodes de raffinement de maillage en solidification était la capture de la position de l'interface de solidification ou de la zone pâteuse. Ainsi [PALLE, 1996] définit son estimateur d'erreur à partir du flux de chaleur qui sera discontinu dans la zone de solidification du fait du rejet de la chaleur latente. Les auteurs parviennent ainsi à identifier les zones à fort gradient et imposent un raffinement du maillage dans ces zones par subdivision des éléments. Cette approche est utilisée pour simuler des cas 2D en éléments finis. Les résultats sont validés sur un cas test 1D de solidification d'un alliage par comparaison avec les courbes de température et les courbes de concentration qui peuvent être calculées analytiquement. Pour obtenir une meilleure qualité du maillage et mieux capturer les effets de transport de soluté, de nouveaux estimateurs d'erreur ont été développés qui prennent en compte aussi les gradients de concentration. Dans [KRUGER, 2003], les auteurs construisent un tel estimateur d'erreur basé sur la température et la concentration en démontrant qu'il s'agit bien d'un estimateur d'erreur. Ces démonstrations très mathématiques

permettent de prouver que l'estimateur est efficace, ce qui est démontré par la suite sur un cas test pour lequel l'erreur est connue. Après avoir montré aussi que l'erreur diminue plus rapidement lorsque l'on adapte le maillage avec un nombre de nœuds croissants, les auteurs effectuent une première simulation d'un problème physique. Il s'agit de la solidification d'une dendrite en 2D avec un maillage éléments finis. La Figure 3-10 montre le maillage adapté de la dendrite et la courbe de fraction solide. Cette méthode permet donc bien de prédire la complexité de la forme de la dendrite en minimisant le nombre d'éléments utilisés. Cependant, elle n'est pas forcément adaptée à une autre problématique de la solidification qui nous intéresse soit la solidification de lingots. En effet les auteurs ne présentent pas de calcul de ce type et les points critiques ne sont pas les mêmes dans ces deux approches, non seulement l'échelle est très différente mais l'objectif du remaillage l'est aussi puisque pour les dendrites il s'agit de capturer au mieux la forme géométrique alors que pour les lingots, il s'agit avant tout de prédire le champ de concentration.

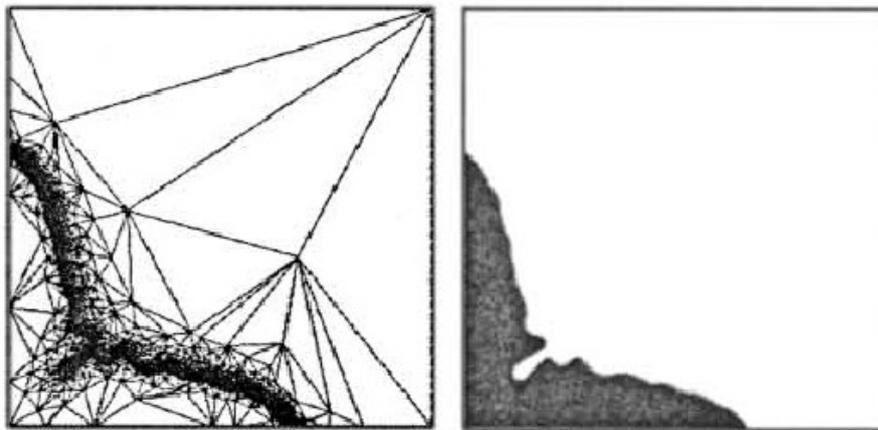


Figure 3-10 : Adaptation de maillage pour un calcul de dendrites avec une méthode de champ de phase (maillage, fraction solide) [KRUGER, 2003]

Toutefois d'autres auteurs ne sont intéressés à la solidification de lingots mais, à notre connaissance, aucun auteur n'a présenté d'estimateur d'erreur adapté à la macroségrégation en lingotière en éléments finis. Les volumes finis sont par contre plus largement utilisés pour la simulation de la solidification. Lan *et al.* [LAN, 2002] utilisent un estimateur d'erreur basé sur les flux de chaleur et les flux de masse et donc n'intégrant pas la concentration mais leur approche pourrait être étendue. A partir de ces estimateurs, ils utilisent eux aussi une subdivision locale des éléments rectangulaires. Par contre ils ont testé leur programme sur plusieurs cas tests : la cavité de Rayleigh, des calculs sur une sphère solide dans une cavité ou une répartition de sphères, solidification de type Bridgman, solidification 1D, creuset et dendrites. La variété des exemples traités montre la polyvalence de leur méthode. Plusieurs des exemples sont particulièrement intéressants pour notre étude. Le cas de solidification 1D repris de [PALLE, 1996] permet une comparaison avec une solution analytique et a aussi l'avantage de pouvoir être rapproché des premiers instants de la solidification lors de la formation de la première peau dans un lingot. D'autre part le cas du creuset permet de voir les caractéristiques intéressantes de leur technique de remaillage. Sur la Figure 3-11, les isothermes permettent de positionner la zone pâteuse puisque au-delà de cette zone le gradient de température dans le liquide est beaucoup plus faible. En comparant avec la représentation du maillage on peut se rendre compte que l'adaptation de maillage par estimateur d'erreur a conduit à un raffinement principalement localisé dans la zone pâteuse avec un raffinement qui s'étend aussi un peu dans la phase liquide sans doute pour prendre en compte les effets de

couche limite qui apparaissent vers le front de solidification. Ces exemples 2D illustrent les possibilités de l'estimateur d'erreur dans des cas proches de ceux étudiés ici. Cependant une fois de plus il n'y a pas d'application sur des calculs de macroségrégation.

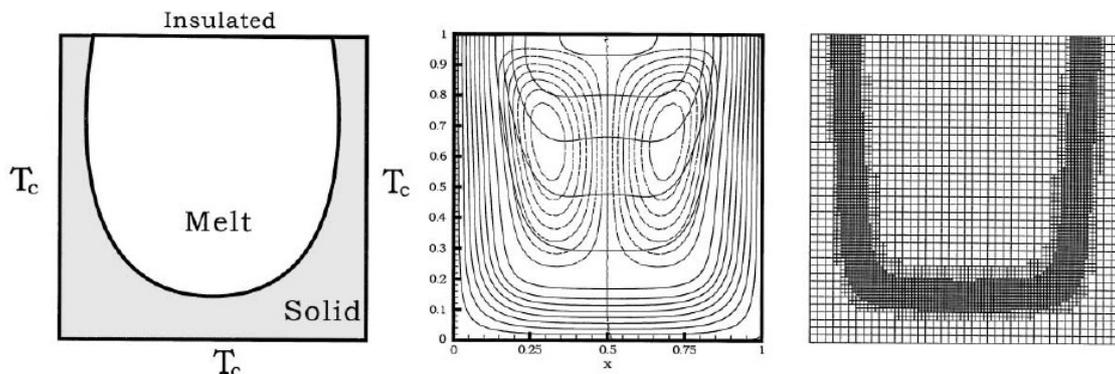


Figure 3-11 : Adaptation de maillage en solidification en creuset (schéma, isothermes et lignes de courant, maillage) [LAN, 2002]

Pour finir ce tour d'horizon du remaillage avec estimateur d'erreur en solidification, on peut noter les travaux de Belhamadia *et al.* [BELHAMADIA, 2004] qui se focalisent plus sur les potentialités du remaillage anisotrope. Dans cet article, les auteurs montrent ainsi sur un exemple de refusion d'une bulle solide l'efficacité de l'adaptation anisotrope dans la capture d'une interface mobile dans un calcul éléments finis basé sur une méthode de champ de phase. L'étirement très important des éléments perpendiculairement au gradient permet tout de même de mener à bien le calcul et diminue grandement le nombre d'éléments. Il apparaît donc justifié dans notre approche d'utiliser aussi des éléments très étirés dans certaines zones ayant une direction prépondérante.

Pour résumer l'état des lieux, différents travaux ont été menés pour traiter le problème de la solidification en appliquant des remaillages avec estimateur d'erreur. Cependant actuellement aucune étude ne traite de la macroségrégation en lingot. Cela s'explique par la difficulté à mettre en place et à valider une méthode d'estimateur d'erreur dans ce cas. Mais aussi par le fait que la macroségrégation sur lingot est encore un domaine de recherche en développement pour lequel il est difficile de calibrer les modèles. La comparaison avec les résultats expérimentaux est très complexe et dans ces conditions le traitement par estimateur d'erreur est une approche sans doute trop complexe pour le moment.

Une approche plus simple semble requise dans un premier temps pour obtenir une série de tendance et de résultats qui permettront par la suite de caler les modèles d'estimateur d'erreur rendant alors le code plus efficaces et plus général. Cette approche a d'ailleurs été choisie par [KAMPFER, 2002]. Son approche consiste à remailler effectivement la zone pâteuse et aussi en avant du front de solidification ce qui correspond aux résultats de [LAN, 2002]. Il utilise pour cela une subdivision locale qui génère un maillage non conforme ce qui est assez difficile à traiter en éléments finis. Notre approche, si elle s'inspire de ces travaux, utilisera toutefois un maillage conforme et le remaillieur topologique MTC. D'autre part, nous appliquerons aussi d'autres critères apparus nécessaires au cours des tests mis en place pour étudier l'effet du remaillage sur la macroségrégation. Ces essais ont été menés simultanément sur THERCAST et sur R2SOL [LIU, 2005]

Difficultés et complexité pour l'application à la macroségrégation

Avant d'écarter complètement la méthode par estimateur d'erreur dans cette thèse, voyons quelles sont les difficultés ou les problèmes qui nous poussent à cette décision. La principale raison est la complexité et le temps requis pour mettre en place de manière rigoureuse une méthode par estimateur d'erreur. L'introduction dans THERCAST de l'aspect macroségrégation en utilisant le remaillage adaptatif apparaît déjà un travail assez important et pour le mener à bien il a été important de se concentrer sur la résolution de notre problème. L'introduction de méthode par estimateur d'erreur dans le traitement d'un problème physique représentant une thèse en soi, il nous a semblé préférable de mettre en place une stratégie de remaillage qui fonctionne et permette d'obtenir des premiers résultats. Dans un travail ultérieur, il sera intéressant de clarifier ce remaillage en définissant et testant de manière poussée un estimateur d'erreur anisotrope assez général pour s'adapter à la physique couplée, caractéristique de la solidification avec ségrégation.

Le deuxième point critique est la rigueur de la méthode de l'estimateur d'erreur qui peut devenir une faiblesse lors de travaux de recherche. En effet, la prédiction de la macroségrégation en 3D par éléments finis est un domaine avec beaucoup d'inconnues et cela peut nécessiter un contrôle plus direct du développeur pour ajuster au mieux le maillage directement aux variables physiques du calcul. L'utilisation d'une méthode de remaillage plus modulaire permet alors d'étudier plus facilement la réaction du code sur ces calculs nouveaux et de mieux estimer l'effet du maillage. La stratégie que nous avons développée ici a donc comme principal avantage d'être très souple et de pouvoir être contrôlée aisément par l'utilisateur averti.

Enfin le dernier point est la qualité de la solution servant à l'adaptation de maillage. Dans un calcul utilisant un estimateur d'erreur, la solution sera guidée fermement par les résultats des incréments précédents. Cela peut conduire à la non capture de certains phénomènes, notre méthode devrait elle permettre d'imposer un raffinement du maillage dans certaines zones même si la solution ne présente pas encore des caractéristiques nécessitant un remaillage. Ainsi on limite légèrement le couplage entre la solution et le maillage adapté pour s'affranchir des éventuels problèmes qui pourrait apparaître localement ou ponctuellement.

Si l'estimateur d'erreur a beaucoup d'avenir dans la prédiction de la macroségrégation en solidification, il semble toutefois nécessaire de passer par des étapes intermédiaires utilisant des méthodes de remaillage plus souples, plus contrôlables et moins directement dépendantes de la solution.

3.3.2. Génération d'une taille de maille locale

Notre approche est basée sur un calcul de la taille de maille locale faisant intervenir plusieurs variables caractérisant la solution. Etant donné que notre objectif est une bonne description de l'écoulement, l'application d'un maillage fin dans la zone pâteuse et tout cela pour le calcul de la macroségrégation, nous avons identifié quatre paramètres qui devraient permettre de définir notre taille de maille locale. Les trois paramètres utilisés seront :

- La norme du gradient de fraction liquide $\|\nabla g_l\|$
- La norme du gradient de la norme de la vitesse $\|\nabla(\|\mathbf{V}\|)\|$
- La norme du gradient de concentration moyenne $\|\nabla c\|$

On suppose donc que la résolution thermique ne nécessite pas d'adaptation de maillage supplémentaire et qu'elle est donc moins restrictive que les conditions imposées par la suite. En effet généralement la résolution thermique ne pose pas de problème à part dans le traitement du choc thermique initial mais celui-ci est assez rapidement absorbé et peut à la limite être traité en générant un maillage initial bien adapté.

Pour chacun des critères, une taille de maille objective est calculée. La taille de maille objective est la taille que nous souhaitons avoir localement sur le nouveau maillage. C'est cette information (en fait plus généralement il s'agit d'une métrique) qui est envoyé au remaillieur qui essaye ensuite d'optimiser le maillage pour atteindre l'objectif fixé.

Notons V_{cr} la valeur de notre critère. Pour chaque critère, nous définissons deux valeurs seuil S_1 et S_2 et deux tailles de maille que nous noterons h_1 et h_2 . Alors notre taille de maille locale est égale à :

$$h = \begin{cases} h_2 & \text{si } V_{cr} > S_2 \\ \frac{S_2 - V_{cr}}{S_2 - S_1} \cdot (h_1 - h_2) + h_2 & \text{si } S_2 \geq V_{cr} \geq S_1 \\ h_1 & \text{si } V_{cr} < S_1 \end{cases} \quad (3.3.17)$$

Ainsi lorsque l'on trace l'évolution de la taille de maille en fonction du critère choisi (Figure 3-12), la taille de maille objective varie linéairement entre les deux valeurs seuil avec une saturation aux deux extrémités.

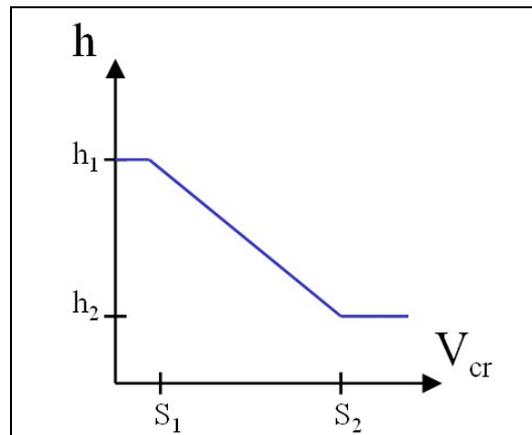


Figure 3-12 : Evolution de la taille de maille en fonction du critère et paliers de saturation

Toutefois lorsque le critère est en dessous de la valeur S_1 , on applique parfois une taille par défaut qui est généralement supérieure à la valeur h_1 . Ainsi, une taille par défaut est définie pour le domaine qui s'appliquera partout sauf dans la zone pâteuse où une seconde taille par défaut est définie. On obtient donc une discontinuité dans l'application de la taille de maille. Cependant le mailleur va construire des maillages avec une évolution plus régulière et de plus, nous appliquons un lissage à notre champ de taille de maille objective.

A partir de nos trois critères, nous obtenons donc en chaque point du domaine trois valeurs de la taille de maille objective. La valeur qui sera conservée pour être transmise ensuite au remaillieur est le minimum de ces trois valeurs. En effet seul le critère le plus critique doit être conservé.

Ces valeurs des bornes et des tailles de maille seront les points les plus critiques de cette stratégie et devront donc être déterminées avec soin. Une faible variation d'une borne peut conduire à une extension importante de la zone remaillée finement ce qui est souvent inutile et coûteux en temps de calcul.

Nous allons maintenant voir comment dans le détail sont calculées ces valeurs de taille de maille à partir de chacun de nos trois critères.

Critère RGC (Raffinement avec le Gradient de Concentration) :

Ce raffinement prend en compte les valeurs du gradient de la concentration moyenne c . La taille de maille objective sera uniforme et égale à h_c^1 pour les éléments dépassant la valeur seuil unique $\|\nabla c\|_{s_1}$ défini pour ce paramètre. On obtient alors la formule :

$$h = h_c^1 \quad \text{si } \|\nabla c\| \geq \|\nabla c\|_{s_1} \quad (3.3.18)$$

Notons que la valeur du gradient est obtenu pour chaque élément et est constante par élément puisque nous utilisons des tétraèdres linéaires. Ainsi, pour ce critère et pour les autres aussi, nous allons parcourir les éléments et déterminer dans chacun d'eux la valeur du gradient ce qui nous permettra de calculer une taille de maille objective. Ensuite, en chacun des nœuds, on affectera la taille de maille objective qui vient d'être calculée si elle n'est pas supérieure à celle actuelle allouée au nœud, qui provient d'un gradient sur un autre élément ou qui est la taille par défaut du domaine.

L'application de ce critère ne va servir qu'à affiner le maillage dans des zones de fortes variations de la concentration. Il s'agit en fait d'une condition qui n'est pas très fréquente mais sert à traiter en particulier le phénomène d'accumulation de soluté dans le canal liquide pour les cas Hebditch-Hunt présentés dans la suite. Ce raffinement peut aussi être applicable lorsqu'une masse de soluté est transportée dans le bain liquide par l'écoulement. En effet l'arrivée de ce liquide riche en soluté dans un milieu à composition initiale peut parfois générer de forts gradients.

Critère RGGL (Raffinement avec le Gradient de fraction liquide GL) :

Le raffinement de maillage dans la zone pâteuse va se faire principalement selon un critère dépendant du gradient de la fraction liquide mais aussi en effectuant une correction des tailles de maille pour avoir une évolution plus régulière. Cela se fait en deux étapes : calcul de la taille de maille en fonction du gradient de la fraction liquide, ensuite correction de cette valeur en appliquant un facteur multiplicatif représenté sur la Figure 3-13 dont l'équation est : $F = (1 - e^{-5g_l})^{-1}$. Ainsi la taille de maille objectif sera égale à $h_{obj} * F$. Bien entendu si la taille de maille par défaut de la zone pâteuse est plus petite que celle calculée ici, elle sera appliquée. Ce raffinement n'est appliqué que dans la zone pâteuse ($gl > 0$ et $gl < 0.99$). L'objectif de l'application du facteur multiplicatif est de grossir régulièrement la taille de maille dans la zone à l'approche de la zone solide de manière à éviter les changements brusques de taille de maille.

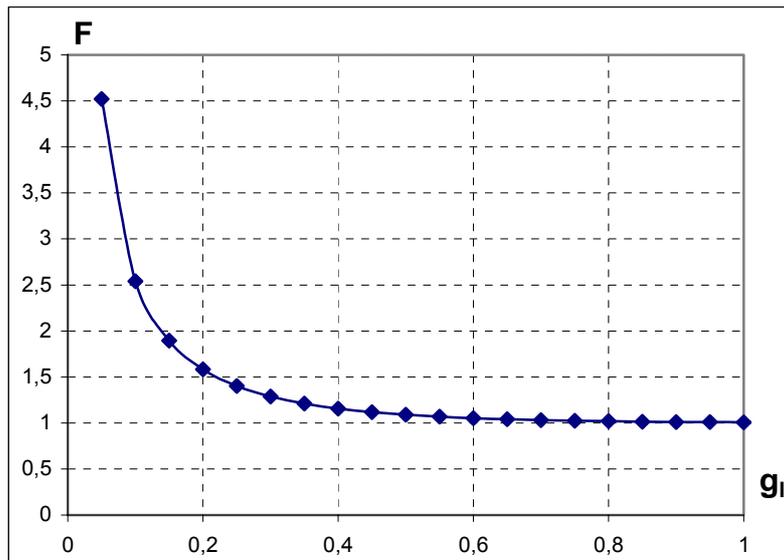


Figure 3-13 : Coefficient correctif des valeurs de taille de maille dans la zone pâteuse

Critère RGV (Raffinement avec le Gradient de Vitesse) :

Le raffinement en gradient de vitesse sert en particulier à la capture des zones de couche limite aussi bien à proximité des parois que du front de solidification. Normalement le critère sur le gradient de la norme de la vitesse devrait permettre de localiser ces zones et donc d'améliorer le maillage à proximité du front de solidification et vers les parois. Les zones de formation des vortex secondaires devraient aussi être remaillées finement par ce critère.

Le calcul de la taille de maille suivant ce critère se fait d'après l'équation (3.3.17) en imposant toutefois la taille de maille par défaut, soit :

$$h = h_{def} \quad \text{si} \quad \|\nabla(\|\mathbf{V}\|)\| < \|\nabla(\|\mathbf{V}\|)\|_{S_1} \quad (3.3.19)$$

où l'indice S_1 indique la valeur seuil 1 pour ce critère.

Lissage des tailles de maille objectives

Après avoir obtenu des tailles de maille en appliquant ces trois critères, on effectue pour chacun d'eux un lissage de manière à fournir au remaillageur une métrique suffisamment régulière. Pour réaliser ce remaillage deux approches ont été testées.

La première approche consiste en l'application successive de « transport » de la valeur d'un nœud à un élément. Ces étapes induisent une régularisation des valeurs par l'effet des prises de moyennes successives. En effet, dans cette méthode on applique plusieurs fois une séquence de deux étapes. La première étape est de calculer à partir des valeurs aux nœuds, la valeur au centre de l'élément en prenant la moyenne sur des valeurs aux nœuds. La deuxième étape est le calcul d'une nouvelle valeur en chaque nœud à partir des valeurs au centre des éléments qui viennent d'être calculées. Ainsi la valeur au nœud est définie comme la moyenne des valeurs sur les éléments qui l'entourent. On voit que chacune de ces étapes va avoir tendance à uniformiser la taille de maille. Ces « transports » successifs des valeurs sont illustrés sur la Figure 3-14. Ainsi à chaque aller-retour des valeurs entre le centre de l'élément et les nœuds, le lissage affecte une couche d'éléments supplémentaire puisque l'information ne se propage

à chaque étape qu'aux nœuds faisant partie du même élément. Toutefois cet effet est rapidement décroissant et ne modifie donc les valeurs qu'à une courte distance dépendant de la taille de maille locale. D'autre part le nombre de transports successifs est difficile à déterminer a priori. Cela a conduit à l'introduction d'une nouvelle méthode.

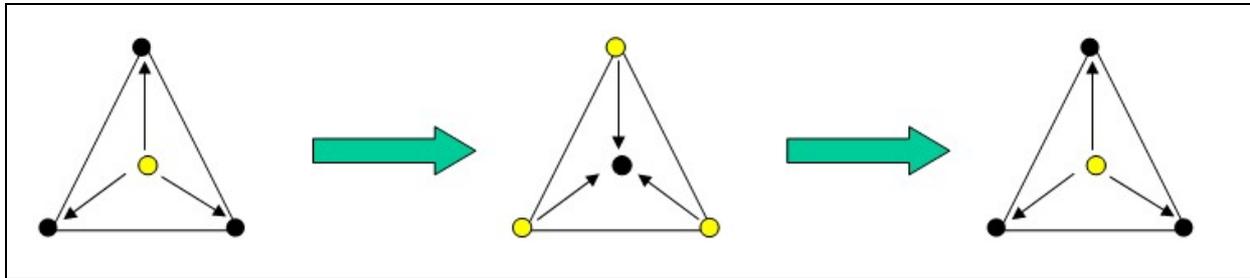


Figure 3-14 : Transports successifs des valeurs des tailles de maille pour le lissage

La deuxième méthode consiste à traiter les valeurs des tailles de maille objective comme une variable diffusive. En fait, la variable résolue sera plus exactement le logarithme de la taille de maille pour avoir des valeurs du même ordre de grandeur alors que les tailles de maille peuvent varier d'un facteur 20. L'équation à résoudre est alors la suivante :

$$\frac{\partial \ln(h)}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla (\ln(h))) \quad (3.3.20)$$

où ε est un coefficient de diffusion fixé empiriquement à 10^{-3} . Cette équation étant adimensionnée la résolution numérique utilise un pas de temps de 1s. De plus, on impose un flux nul sur toutes les faces extérieures.

La résolution de cette équation de diffusion pour la variable $\ln(h)$ nous donnera un champ de taille de maille plus régulier. Cette méthode impose donc la résolution d'une équation supplémentaire mais a l'avantage d'être stable, efficace et aisément généralisable. D'autre part le temps de calcul utilisé pour résoudre cette équation supplémentaire est totalement négligeable par rapport à la durée du remaillage.

L'obtention d'une taille de maille à la variation régulière facilite le travail du remailleur qui ne supporte pas de grandes variations locales de taille de maille. L'application du lissage permet donc de supprimer l'apparition de problèmes dans le remaillage et rend donc c'est approche beaucoup plus stable. Dans la version actuelle de THERCAST, le calcul peut être lancé sans que le module de remaillage pose problème à aucun moment. L'automatisation du remaillage est donc efficace.

Application au cas test Sn-5%Pb :

L'application des méthodes de calcul des tailles de maille sur le cas Sn-5%Pb permet d'obtenir le maillage pseudo-2D de la Figure 3-15 après 10s de calcul. Ce cas test correspond à notre premier cas d'application et ses caractéristiques seront donc décrites dans le premier paragraphe du chapitre 4. Les critères de remaillage utilisés pour cette application sont présentés dans le Tableau 3-2 avec un coefficient multiplicateur égal à 0.9 à $t=10s$.

Tableau 3-2 : Paramètres du remaillage

| | |
|------------------------------------|-------------------------------------|
| <u>Paramètres généraux :</u> | <u>Paramètres du critère RGW :</u> |
| Taille par défaut : 0.002 m | Seuil : 100 wt%/m |
| Nb d'éléments objectif : 100 000 | Taille : 0.0003 m |
| <u>Paramètres du critère RGV :</u> | <u>Paramètres du critère RGGL :</u> |
| Seuil_1 : 0.2 s^{-1} | Seuil_1 : 10 m^{-1} |
| Seuil_2 : 1.0 s^{-1} | Seuil_2 : 50 m^{-1} |
| Taille_1 : 0.0004 m | Taille_1 : 0.0003 m |
| Taille_2 : 0.0002 m | Taille_2 : 0.0002 m |
| | Taille par défaut : 0.001 m |

Les zones d'applications d'un maillage fin selon les différents critères sont présentées sur la Figure 3-15 ainsi que le maillage isotrope à $t=10\text{s}$. La Figure 3-16 montre la répartition des tailles de maille objectif dans l'ensemble du domaine.

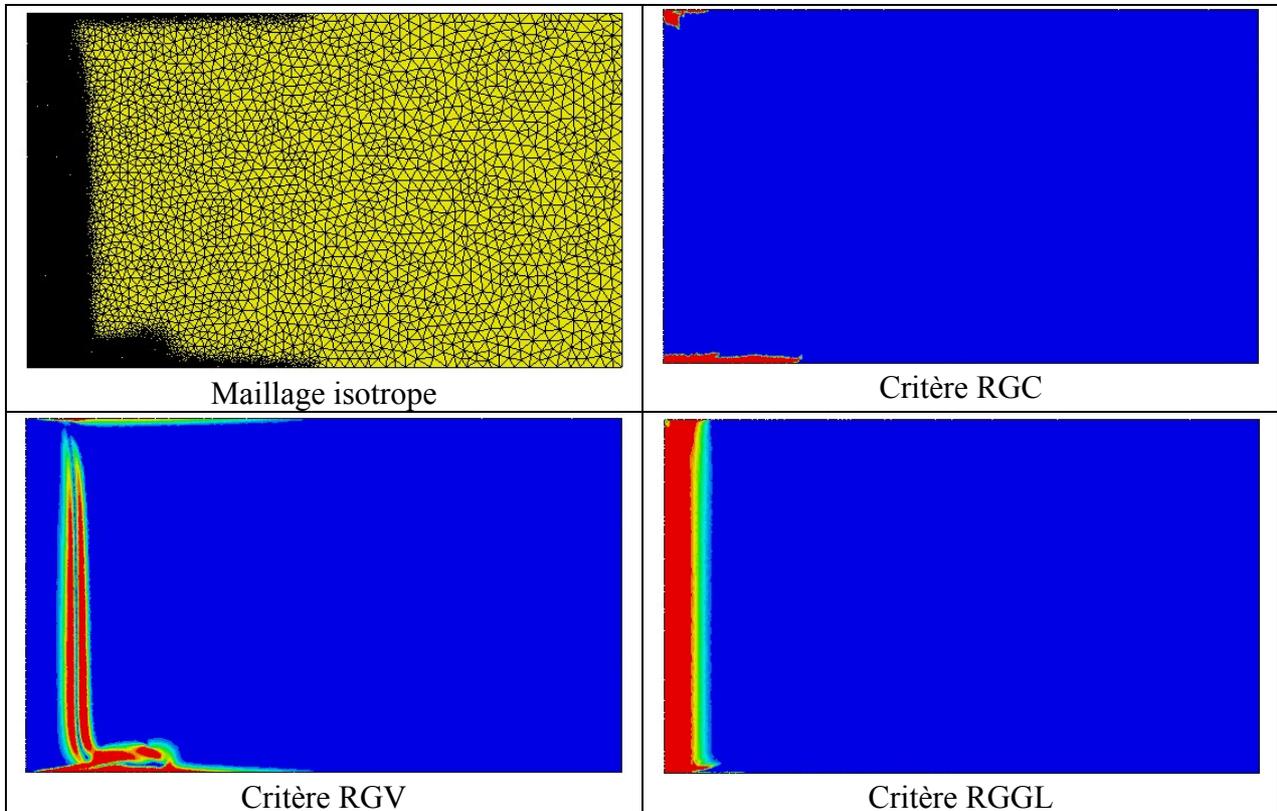


Figure 3-15 : Maillage adaptatif et zones d'application du maillage fin en fonction des critères RGC, RGV et RGGL

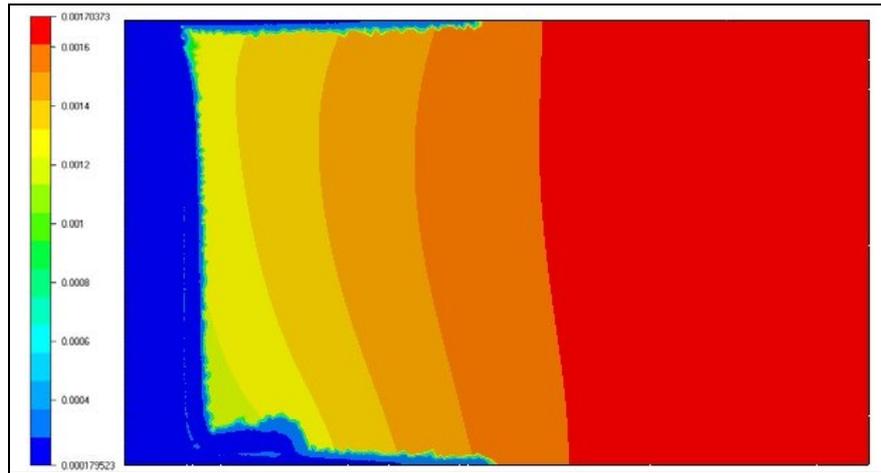


Figure 3-16 : Tailles de maille objectif

Les résultats obtenus avec cette technique de remaillage peuvent ensuite être comparés à ceux obtenus sur un maillage fixe très raffiné.

Maillage adaptatif : 110477 éléments, 37533 nœuds

Maillage très raffiné : 336078 éléments, 112699 nœuds

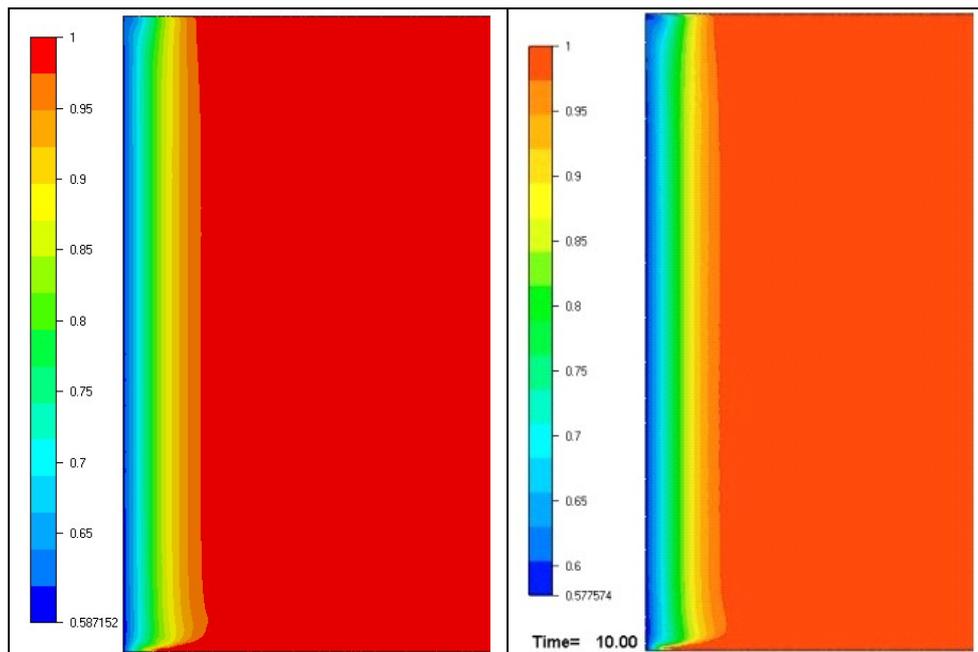


Figure 3-17 : Fraction liquide à 10s (Maillage adaptatif à gauche et très raffiné à droite)

Cette technique de remaillage permet d'obtenir un front de solidification très régulier comme le montre la Figure 3-17. Cependant l'épaisseur solidifiée dans le coin inférieure gauche est plus importante avec le maillage adaptatif car le raffinement du maillage dans cette zone prend du temps et donc la solidification se produit en partie alors que le maillage n'est pas encore très fin dans cette zone.

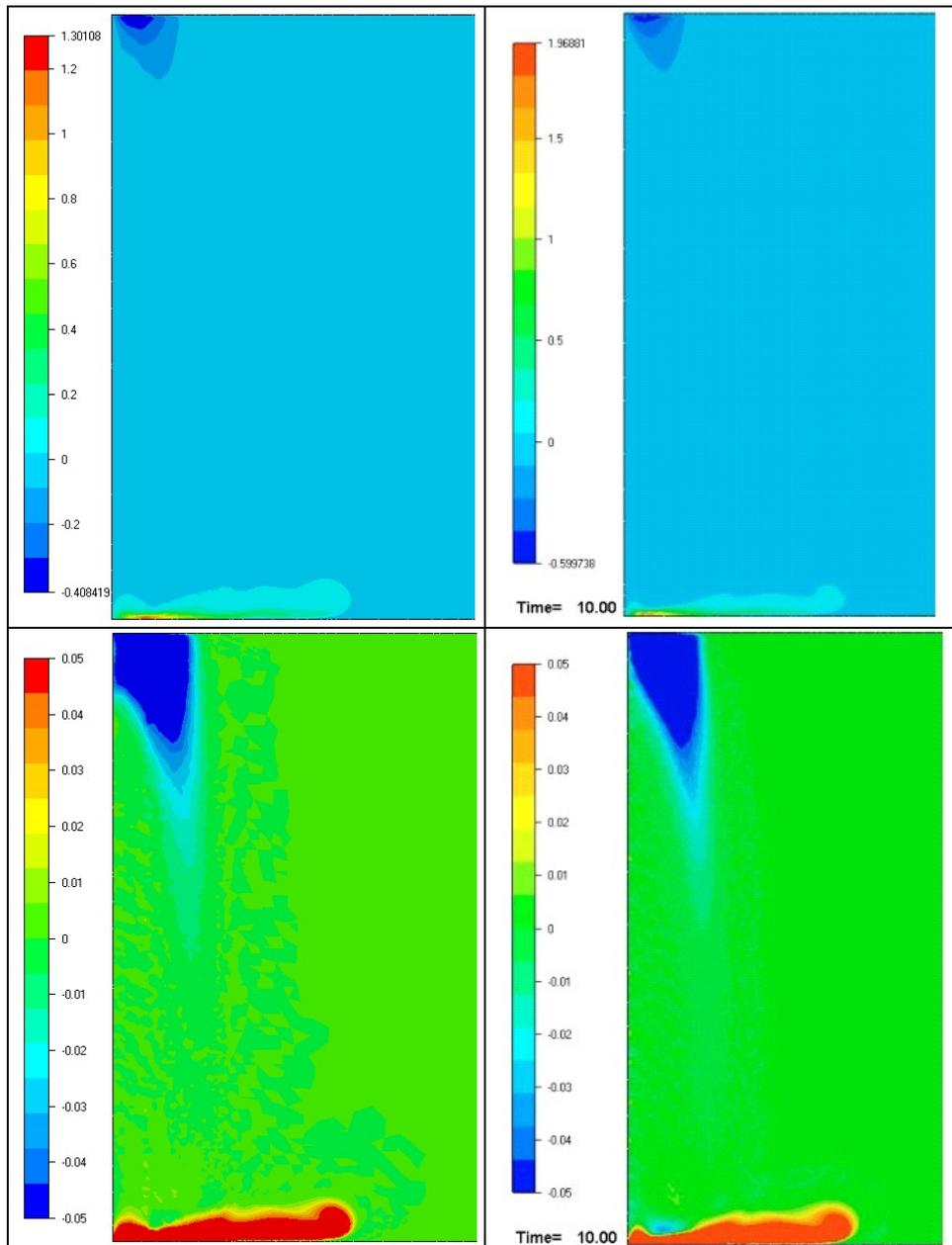


Figure 3-18 : Ecart de concentration moyenne à 10s (Maillage adaptatif à gauche et très raffiné à droite, échelle naturelle en haut et échelle modifiée en bas)

Les temps de calcul sont de 22h08min pour le maillage très raffiné et de seulement 8h24min pour le remaillage adaptatif.

D'autre part les résultats de la Figure 3-18 montrent qu'en utilisant le maillage adaptatif, on semble apte à reproduire la même précision dans les résultats en diminuant le temps de calcul. Par contre, on note aussi un effet diffusif du remaillage avec une diminution des amplitudes des écarts de concentration moyenne

3.3.3. Génération des coefficients d'anisotropie

La deuxième étape pour la création de la métrique, après le calcul de la taille de maille, est la définition de l'anisotropie. Nous allons caractériser l'anisotropie au moyen de

deux valeurs : un vecteur direction et un facteur d'étirement. On peut donc remarquer que les tailles de maille dans deux directions seront identiques. En général le maillage sera étiré dans les directions perpendiculaires à notre vecteur direction. Comme le montre une représentation 2D d'un élément sur la Figure 3-19, on applique la taille de maille h dans la direction du vecteur direction et une taille différente perpendiculairement.

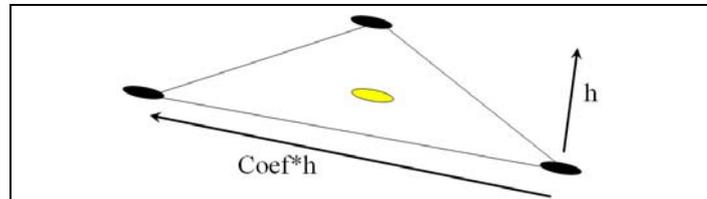


Figure 3-19 : Illustration de l'étirement d'un élément

Cette approche a donc pour conséquence de ne pas pouvoir traiter différemment les deux autres directions ce qui pourrait être un avantage dans certains cas où la solution présente des uniformités dans deux directions. Cependant ce maigre avantage ne justifie pas la complexité additionnelle qu'il faudrait introduire. Dans nos cas de calcul, une seule direction est généralement prépondérante par exemple la vitesse dans le bain liquide ou le gradient de fraction solide dans la zone pâteuse.

Avant de détailler la méthode d'obtention de ces valeurs, arrêtons nous un instant sur l'intérêt fondamental de l'anisotropie dans notre cas. La capacité de pouvoir étirer les éléments permet une résolution plus efficace, d'une part parce que le nombre d'éléments pour représenter une solution est moindre, et donc on peut atteindre une plus grande précision. Mais l'adaptation du maillage à la solution est aussi plus précise. Lorsqu'une variable doit être uniforme dans une direction l'élément va être grand dans cette direction ce qui laisse peu de place aux oscillations numériques. La résolution numérique va donc se concentrer dans les directions principales et éviter des termes perturbateurs. Ainsi la direction d'un écoulement et la forme des isothermes seront prédites de manière plus précise. Cela est valable dans les cas de conduction unidirectionnelle ou dans des vortex stables et étirés. Bref des zones pour lesquelles les gradients ne changent presque pas de direction. L'exemple le plus parlant est sans doute le cas de l'écoulement de type couche limite qui se forme près de la surface refroidie d'un lingot. Toutes les vitesses sont orientées vers le bas par la convection naturelle et le gradient thermique est perpendiculaire à la surface. Il est donc possible et très efficace d'étirer les éléments dans la direction verticale. On peut ainsi diviser le nombre d'éléments dans ces zones d'un facteur 5 sans perdre la qualité de la solution.

Ces avantages incontestables des maillages anisotropes sont obtenus lorsque que l'anisotropie est effectivement basée sur les variables critiques de chaque zone. Ainsi notre méthode résout différemment la zone solide, la zone liquide et la zone pâteuse.

Anisotropie dans la zone liquide

La zone liquide est dominée par l'écoulement et la vitesse est donc notre indicateur d'anisotropie. La méthode de calcul du vecteur directeur et du coefficient d'étirement est identique dans chaque zone, nous ne la présenterons donc que pour cette zone.

Le vecteur vitesse au centre de l'élément nous fournit donc le vecteur direction après une normalisation pour obtenir un vecteur unitaire. Le calcul de l'étirement se fait ensuite sur un critère de « rotation ». On cherche en fait à déterminer si localement l'écoulement tourne.

Dans cette optique, nous utilisons un critère très simple résumé sur la Figure 3-20 qui présente un cas 2D. A partir des vitesses en chaque nœud et de la vitesse au centre, qui est la moyenne des valeurs aux nœuds, on calcule ainsi un cosinus de l'angle maximal de rotation entre le vecteur au centre et les vecteurs aux nœuds. Ce critère, qui est très simple, a montré son efficacité dans chacun de nos cas test.

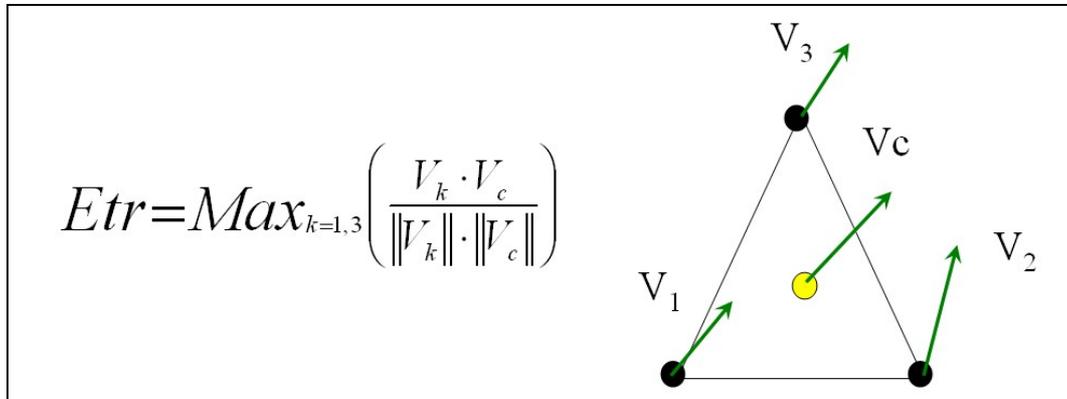


Figure 3-20 : Calcul du coefficient d'étirement dans la zone liquide

Si ce cosinus est supérieur à 0.866 qui correspond à un angle de 30°, la zone est considérée comme anisotrope. Le coefficient d'étirement de l'élément qui modifiera la taille de maille varie alors linéairement entre 1 (maillage isotrope) et une valeur maximale définie par l'utilisateur mais égale par défaut à 6. La valeur 1 étant appliquée pour une valeur inférieure ou égale à 0.866 et la valeur maximale pour un cosinus de 1 soit un alignement parfait des vitesses. Ce coefficient d'étirement est appliqué dans la direction de notre maillage. Ainsi la taille de maille dans la direction du maillage sera $h \cdot \text{coef}$ et h dans les directions orthogonales. Ceci n'est le cas que dans la zone, dans la zone pâteuse et dans la zone solide l'étirement s'applique dans les directions perpendiculaires à la direction du maillage (comme l'illustre le cas présenté sur la Figure 3-19).

Anisotropie dans la zone pâteuse

Le traitement de la zone pâteuse est similaire sauf que notre indicateur d'anisotropie est maintenant le gradient de fraction liquide. Il nous sert à déterminer la direction du maillage et le coefficient d'étirement de manière similaire au cas précédent. Toutefois dans cette zone et dans la suivante l'étirement du maillage se fait dans les deux directions secondaires étant donné que l'on souhaite raffiner dans l'épaisseur de la zone pâteuse.

Anisotropie dans la zone solide

Ici l'anisotropie est déterminée par le gradient de la concentration de manière identique à la zone pâteuse. Ce choix a été fait pour optimiser la conservation des informations de macroségrégations en adaptant le maillage sur cette variable.

Nous avons vu comment dans chaque zone de notre domaine, un vecteur de direction et un coefficient d'anisotropie sont calculés. A partir de ces données on obtient de manière simple notre métrique. En effet à partir de la taille de maille et du coefficient d'étirement on calcule une première matrice :

$$M_{local}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 1/h^2(\vec{x}) & 0 & 0 \\ 0 & 1/[coef * h^2(\vec{x})] & 0 \\ 0 & 0 & 1/[coef * h^2(\vec{x})] \end{pmatrix} \quad (3.3.21)$$

Ensuite on effectue un changement de base, la nouvelle base est définie à partir du vecteur direction en générant une base orthogonale. La matrice de changement de base est définie alors comme suit :

$$M_{base} = \begin{pmatrix} \vec{V}_{dir} & \vec{V}_{dir}^{\perp 1} & \vec{V}_{dir}^{\perp 2} \end{pmatrix} \quad (3.3.22)$$

La métrique dans le repère d'origine est alors obtenue par l'application de cette matrice de changement de base :

$$M_{final}(\vec{x}) = M_{base}^T \cdot M_{local}(\vec{x}) \cdot M_{base} \quad (3.3.23)$$

Cette matrice est calculée en chaque nœud, après un lissage pour passer des valeurs aux éléments à une valeur nodale, et envoyée ensuite telle quelle au remaillieur MTC. On suppose que la régularité des tailles de maille est suffisante et que les changements dans les directions ou les étirements sont assez lents. Toutefois lorsque le remaillieur rencontre des zones avec des changements rapides dans la direction principale cela conduit à la génération d'éléments isotropes. Cela est notable en particulier dans la zone limite entre la zone pâteuse et l'écoulement rapide dans le bain liquide qui comporte généralement des vortex.

3.4. Stratégie de remaillage

3.4.1. Détermination de la période de remaillage

La stratégie de remaillage développée dans un premier temps était assez simple. Elle consistait en un remaillage périodique, imposé par l'utilisateur, de l'ensemble du domaine (qui est constitué seulement de la pièce en train de se solidifier, les moules ne sont pas remaillés). L'utilisateur devait donc optimiser manuellement cette période qui était constante pendant tout le déroulement du calcul. Il était toutefois possible de la changer en stoppant le calcul et le relançant après avoir modifié cette variable, le calcul étant repris là où on l'avait stoppé. Le choix de la période de remaillage s'effectue sur deux critères : la vitesse d'évolution de la solution et le temps de calcul. Le premier critère consiste à remailler suffisamment souvent pour que la résolution du milieu pâteux ne s'effectue pas dans une zone de maillage grossier. L'avance du front de solidification conditionne donc en partie cette période de remaillage. Il faut aussi tenir compte de la vitesse de modification de l'écoulement. La forme de l'écoulement peut évoluer très rapidement et si le maillage n'est pas

suffisamment fin dans les zones critiques, la valeur du pas de temps utilisé peut être trop grande et conduire à une mauvaise résolution de l'équation de la mécanique. Cela conduit dans les cas les plus critiques à des problèmes numériques dus à l'inadéquation du pas de temps par rapport à la taille de maille locale. Le deuxième critère est bien sûr le temps de calcul. Le remaillage du domaine est assez coûteux et il est donc nécessaire de l'effectuer le moins souvent possible. Toutefois il s'agit là plus d'un critère d'optimisation du code que réellement d'un critère qui affecte la qualité de la solution. En première approche il vaut mieux privilégier un remaillage fréquent pour garder un maillage bien adapté à la solution.

3.4.2. Détermination de la métrique

Ainsi après avoir déterminé si l'incrément en cours allait subir un remaillage, le programme entrait dans le module de calcul de la métrique. Nous avons vu précédemment qu'il s'effectuait en deux étapes. Dans un premier temps la taille de maille locale est calculée suivant trois principaux critères plus un déraffinement contrôlé par les écarts de concentration moyenne dans la zone solide. La deuxième étape consiste en un calcul de la direction et de l'étirement du maillage. Toutes ces informations sont ramenées aux nœuds et permettent de calculer une métrique locale. Cette structure de construction de la métrique est présentée sur la Figure 3-21.

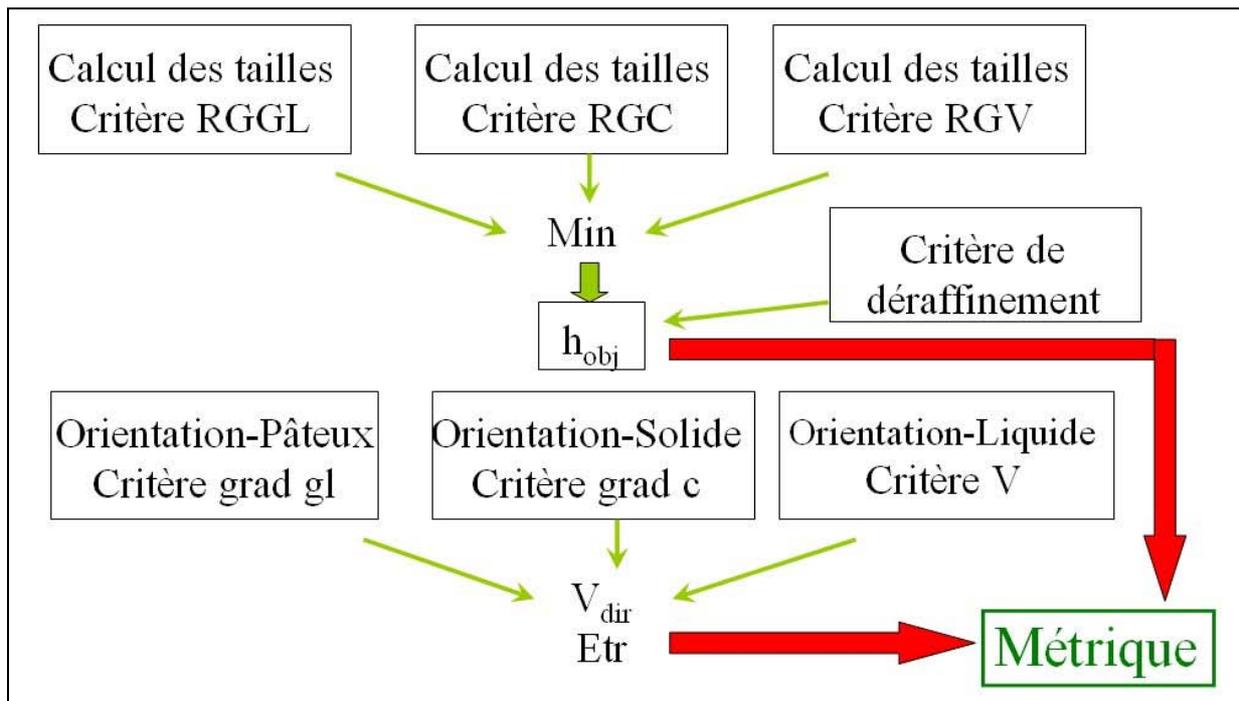


Figure 3-21 : Schéma de la génération de la métrique locale

Lorsque la métrique est connue en chaque nœud, le programme fait appel au remaillieur MTC développé au Cemef. L'étape de remaillage est donc complètement transparente du point de vue de l'utilisation de THERCAST. Pourtant il convient de connaître en partie les limitations de ce remaillieur pour éviter des problèmes lors des calculs très longs sur les lingots qui conduisent à de très nombreux remaillages dans des conditions variées. Un des points importants appris avec l'expérience et des essais, est la nécessité d'avoir une métrique assez régulière pour laquelle les variations ne sont pas trop importantes d'un nœud à un autre. D'autre part les variations rapides d'un remaillage à l'autre peuvent aussi provoquer

des erreurs. Il a été en particulier observé près de la frontière des cas pour lesquels le nouveau maillage présente des irrégularités importantes qui affectent le calcul de manière notable.

Ces conditions ont conduit à appliquer des remaillages assez fréquents et aussi à utiliser des méthodes de lissage après le calcul des tailles de maille.

3.4.3. Avantages et inconvénients

Les principaux avantages de cette première approche sont d'une part une bonne efficacité de la méthode de remaillage qui a permis d'obtenir de très bons résultats sur les lingots simplifiés pseudo-2D (qui seront présentés dans le chapitre d'application). L'utilisation d'une période de remaillage constante est adaptée aux débuts de solidification pour lesquels les évolutions de la zone pâteuse et de l'écoulement restent pendant une période assez longue très similaires. L'utilisation des trois critères permet aussi une bonne capture des zones qui nous paraissaient sensibles lors des études préliminaires. Il semble donc que ces trois critères soient suffisants pour traiter ce problème. La Figure 3-22 montre ainsi la bonne adaptation du maillage dans trois cas représentatifs : une capture de la zone pâteuse pour le critère RGGL, une capture de la couche limite dynamique et de sa déviation pour le critère RGV et un champ de concentration moyenne pour le critère RGC.

Même si la base de la méthode semble assez saine, quelques inconvénients sont toutefois apparus. Le premier d'entre eux peut à la fois être un avantage et un inconvénient, en effet l'application de nombreux remaillages impliquant une étape de transport des variables sur le nouveau maillage par une interpolation dans un élément induit un effet lissant sur les solutions qui, s'il a tendance à améliorer la stabilité du code, conduit aussi à des difficultés pour la capture de canaux ségrégés. C'est une des raisons majeures pour laquelle, aucune étude de canaux ségrégés ne sera présentée dans ce manuscrit. Il semblerait en effet qu'il soit assez difficile de bien contrôler le remaillage pour capturer correctement l'apparition de canaux ségrégés de manière vraiment précise et fiable. Un autre inconvénient est le temps de calcul qui reste assez important comparativement à la résolution des équations. C'est certes une faiblesse du remaillieur MTC mais il est possible d'améliorer la situation car il ne devrait pas être nécessaire d'effectuer le remaillage complet du domaine mais seulement de quelques zones critiques. C'est ainsi que dans les améliorations nous verrons l'introduction d'une extraction topologique permettant de remailler seulement ces zones. Enfin un dernier point a attiré notre attention lors de l'application du remaillage sur un lingot. En fin de solidification, les valeurs seuils pour le critère RGV ne semblaient pas très adaptées. En fait, l'évolution de l'écoulement conduit à un ralentissement très notable des vitesses et donc aussi à une diminution des gradients ce qui conduit à une absence de remaillage lorsque la vitesse devient trop faible.

Un dernier aspect de la technique de remaillage était aussi contraignant. En effet lors de la définition par l'utilisateur des valeurs seuil et des tailles de maille correspondantes à chacun des critères, il n'était pas facile de savoir quel allait être l'effet sur la taille du maillage. En particulier des tailles de maille trop faibles conduisant à des maillages contenant beaucoup trop d'éléments. D'autre part ce nombre d'éléments pouvait évoluer de manière importante au cours du calcul. Il est donc apparu nécessaire de trouver une approche permettant de contrôler le nombre d'éléments du maillage.

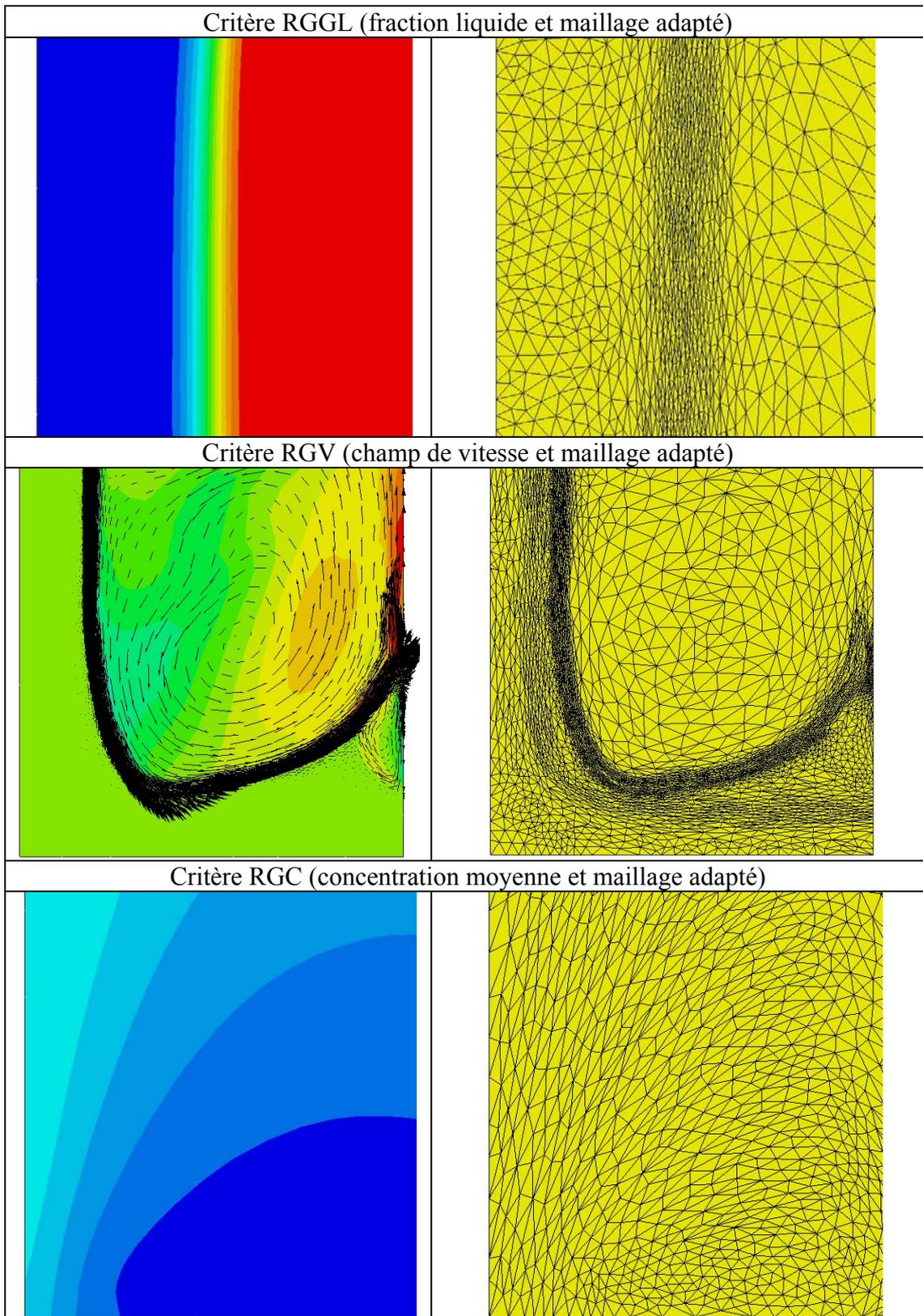


Figure 3-22 : Illustration de l'effet des trois critères sur le maillage

3.5. Amélioration de la stratégie de remaillage

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que plusieurs points pouvaient être améliorés dans notre stratégie de remaillage. Les essais menés sur cette méthode ont révélé quatre points importants à améliorer : une évolution de la période de remaillage et une extraction de maillage pour optimiser le temps dépensé par le remaillage, un contrôle automatique du nombre d'éléments pour mieux contrôler l'évolution du maillage et enfin une amélioration du critère RGV en faisant évoluer les valeurs seuil.

3.5.1. Principe de l'extraction de maillage

Un des avantages du mailleur MTC est la possibilité de remailler des volumes disjoints de manière automatique. Il devient alors possible de fournir au remaillleur seulement les portions de domaine dont la solution a subi une forte variation. L'extraction de ces zones puis leur remaillage permet d'éviter un remaillage complet du domaine même si localement la solution a beaucoup variée. D'autant plus que le remaillage de petites portions disjointes est très rapide. Par contre la régularité du maillage n'est pas assurée et il reste quand même nécessaire de faire un remaillage global de manière périodique. Toutefois le maillage étant déjà bien adapté à la solution, le remaillage global en est largement facilité.

L'exécution de cette extraction de maillage s'effectue suivant quelques étapes génériques que nous allons détailler. En premier lieu, il convient d'identifier les éléments qui doivent être remaillés. Pour cela plusieurs critères sont utilisés qui concernent la taille de maille, l'orientation du maillage et son étirement. Pour pouvoir déterminer l'évolution de ces paramètres il est nécessaire de les sauvegarder lorsque les nœuds sont remaillés. Ces variables sont donc stockés dans les fichiers de résultats. Il est alors possible à tout incrément de comparer la métrique actuellement nécessaire avec la métrique utilisée pour générer le maillage en un nœud ou en un élément.

Variation des paramètres déclenchant un remaillage local :

- taille de maille objective multipliée ou divisée par 2
- variation de l'étirement de +/- 50%
- changement de direction du maillage supérieure à 30°

Grâce à ces critères seront sélectionnés les éléments à remailler. Lorsque un nœud de l'élément remplit ces conditions l'élément doit être remaillé. Toutefois pour que le remaillage soit efficace on ne peut pas extraire seulement ces nœuds, il est préférable d'agrandir un peu ces zones.

La définition des portions à remailler se fait suivant deux approches successives. La première consiste à prendre deux couches d'éléments au voisinage des éléments sélectionnés. La deuxième étape applique un lissage qui tend à régulariser la forme des portions et ainsi à éviter des zones angulaires, des isthmes, ou des éléments isolés à proximité d'une portion à remailler. Ce lissage est effectué comme précédemment en résolvant une équation de diffusion.

La dernière étape de l'extraction consiste à envoyer ces informations au remaillleur qui va mailler ces portions du domaine en conservant fixes les nœuds du contour des portions de manière à faire le raccord avec le reste du domaine inchangé.

L'application de l'extraction de maillage permet de diminuer grandement le temps de calcul dédié au remaillage lorsque les pas de temps ne sont pas trop importants car alors la solution évolue seulement localement et les zones extraites sont de faibles dimensions.

La Figure 3-23 illustre l'extraction de maillage au cours d'un calcul de solidification sur un lingot refroidi ici par les parois droite et en bas par la présence d'un moule. Cette figure indique les tailles de maille objectives utilisées pour générer le maillage présenté à droite. On peut déduire de ces deux images que les zones qui sont extraites à ce moment là sont principalement situées dans la zone pâteuse et dans le liquide à proximité du front de solidification.

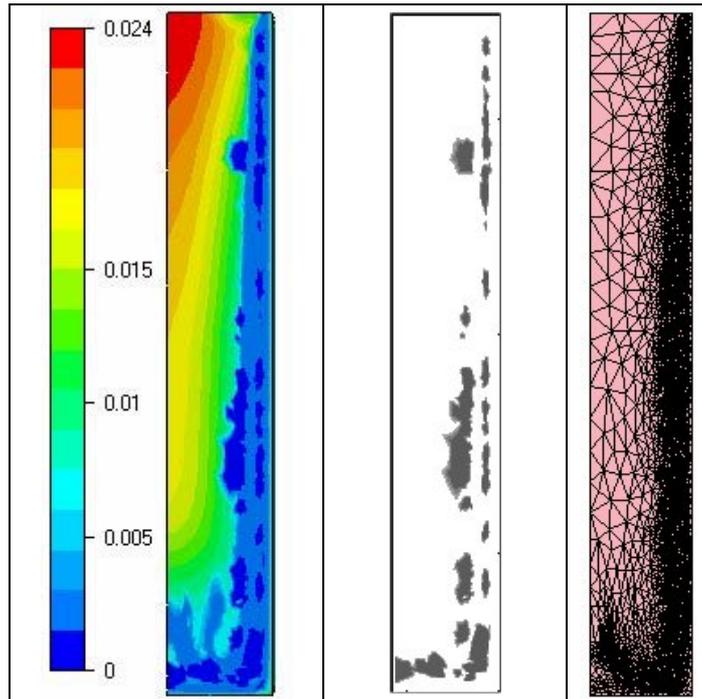


Figure 3-23 : Affichage de la taille de maille, des zones extraites et maillage

L'extraction de maillage se fait principalement en fonction de la taille de maille. La Figure 3-24 montre ainsi que les zones concernées par les critères de changement de direction de maillage et d'étirement sont principalement situées dans la zone liquide et donc affectent peu d'éléments puisque le maillage est plus grossier dans le liquide (mis à part à proximité du front de solidification). Par contre le critère de taille correspond à des éléments de la plus petite taille (en bleu sur la Figure 3-25). Cela est confirmé lorsque l'on compare le nombre de nœuds extraits (cf. Tableau 3-3). Des nœuds sont détectés conjointement par les différents critères et ces zones se recoupent. Toutefois on peut aussi se rendre compte que les zones prédites sont parfois plus vastes lorsqu'un seul critère est appliqué comme le montrent les deux bulles de remaillage qui sont plus petites lorsque tous les critères sont appliqués. Cela vient sans doute du fait de l'application du lissage qui s'effectue de manière différente dans les deux cas.

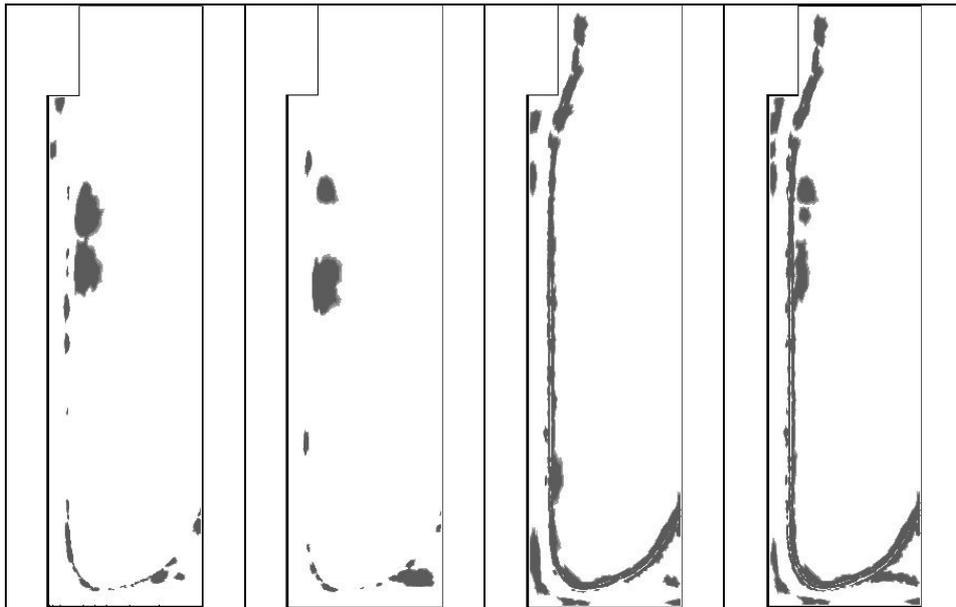


Figure 3-24 : Affichage des zones extraites en appliquant l'extraction avec seulement le critère de direction, d'étirement, de taille et enfin en combinant tous les critères (simulation sur lingot simplifié)

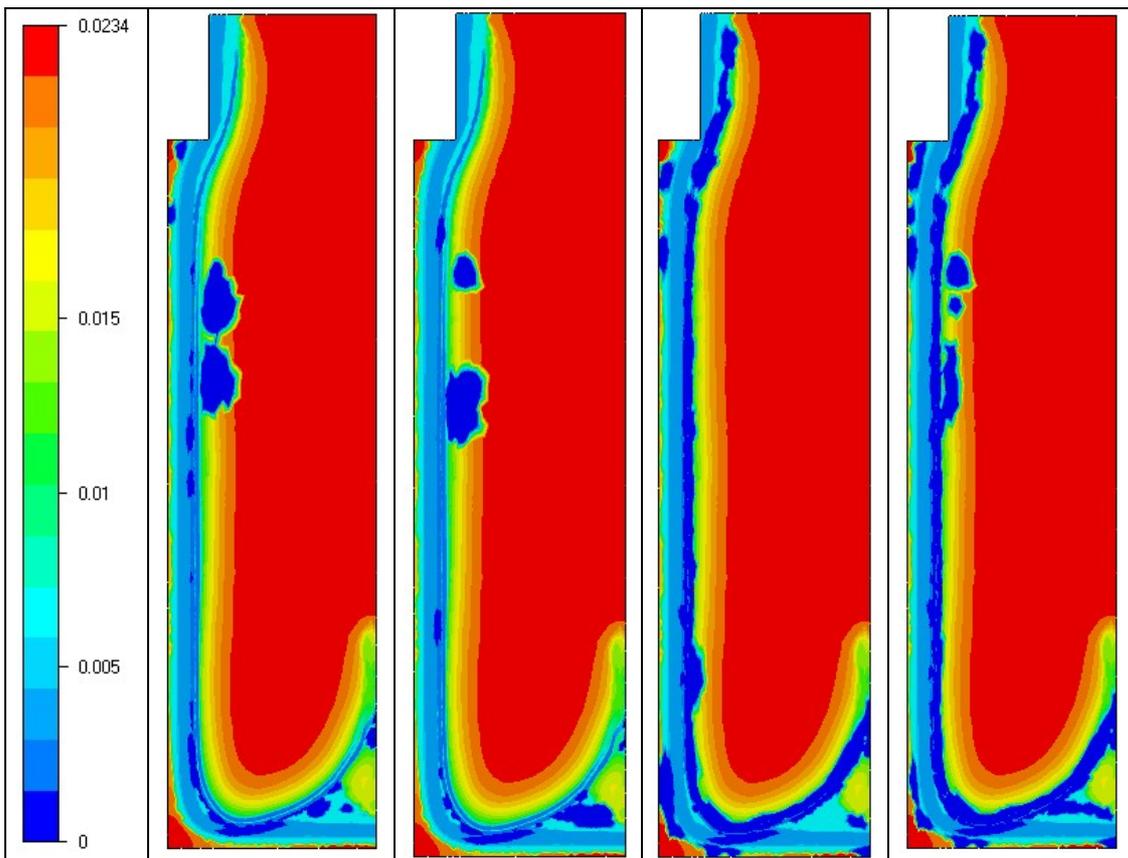


Figure 3-25 : Affichage de la taille de maille en appliquant l'extraction avec seulement le critère de direction, d'étirement, de taille et enfin en combinant tous les critères (simulation sur lingot simplifié)

Tableau 3-3 : Effets des critères sur le nombre de nœuds extraits

| Critère | Pourcentage de nœuds extraits |
|-----------|-------------------------------|
| Direction | 10% |
| Etirement | 6.8% |
| Taille | 36.7% |
| Tous | 40.9% |

Globalement ces cartes d'extraction révèlent que les zones qui évoluent le plus sont la zone pâteuse et surtout, à cet instant particulier, l'écoulement en avant du front de solidification et dans sa continuité. En effet dans ce calcul l'écoulement de type couche limite le long de la paroi est dévié par l'apparition de vortex. C'est dans cette zone à forte vitesse et aussi à forts gradients que se concentrent les modifications des tailles de maille dues principalement à des changements rapides de la vitesse locale.

3.5.2. Contrôle automatique du nombre d'éléments

Une amélioration importante voire même essentielle apportée à la stratégie de remaillage a été l'introduction d'un contrôle automatique du nombre d'éléments. Cette amélioration est importante pour plusieurs raisons. La première raison est qu'elle permet de conserver pendant l'ensemble de la simulation des tailles de maillage, de fichiers et de temps de calcul uniformes. Ainsi l'utilisateur peut estimer plus facilement le temps nécessaire pour accomplir le calcul et les ressources nécessaires. La seconde raison est que cette amélioration permet un découplage plus net entre les paramètres du remaillage, telles que les tailles de maille min et max dans chaque zone et la taille de maillage que l'utilisateur souhaite employer. En effet si les tailles de maille prescrites sont beaucoup trop petites, la taille du maillage va exploser. Le contrôle automatique du nombre d'éléments apporte ici une simplification de l'approche. Il suffit d'appliquer des critères standardisés que le code va ajuster automatiquement pour obtenir le bon nombre d'éléments.

Le fonctionnement de cette amélioration est en fait assez simple. Lorsque des remaillages sont effectués par extraction ou par remaillage global, le nombre d'éléments se modifie petit à petit. Dès qu'il s'éloigne trop de la valeur objective, soit de 10% environ, la correction des critères de taille s'applique. En effet dorénavant les tailles de mailles calculées par nos différents critères ne sont pas utilisées directement pour le calcul de la métrique mais après une correction. Un facteur multiplicatif est appliqué pour que le nombre d'éléments soit proche de la valeur objective. La relation suivante permet de calculer la nouvelle valeur de ce coefficient multiplicatif :

$$coef_mult = \left(\frac{nb_elt}{nb_elt_obj} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot coef_mult \quad (3.5.1)$$

Pour limiter l'évolution de ce coefficient et éviter une évolution trop brusque du maillage par des corrections successives de ce coefficient, la nouvelle valeur du coefficient multiplicatif ne peut pas être supérieure à 1.2 fois l'ancienne et inférieure à l'ancienne valeur divisée par 1.2. L'adaptation du maillage en début de calcul inclut bien souvent une période transitoire pendant laquelle, le contrôle automatique corrige graduellement les tailles de

maille. Ainsi que le montre la Figure 3-26, la valeur objective de 100 000 n'est pas atteinte immédiatement à partir du déclenchement du remaillage à l'incrément 20. On observe une augmentation très importante du nombre d'éléments en début de calcul. En effet dans cette période la solution varie très rapidement. En particulier les zones affectées par l'écoulement qui s'accélère et l'élargissement de la zone pâteuse induisent un accroissement très important du nombre d'éléments si les tailles ne sont pas modifiées. Le coefficient multiplicatif grandit donc progressivement pour finalement se stabiliser en permettant d'atteindre le nombre d'éléments objectif.

Cette progression a comme conséquence un temps de calcul important en début de simulation à cause de l'adaptation progressive du maillage initial à la solution numérique qui se développe. Il nous a semblé préférable de laisser le maillage croître de manière importante au début pour être sûr de bien capturer les phénomènes à ces temps là, en particulier le choc thermique. Toutefois il serait intéressant de trouver une approche qui permette de guider l'évolution du maillage de manière plus efficace pour gagner en temps de calcul, même si les heures récupérées ici ne sont pas proportionnellement importantes par rapport au temps de calcul global.

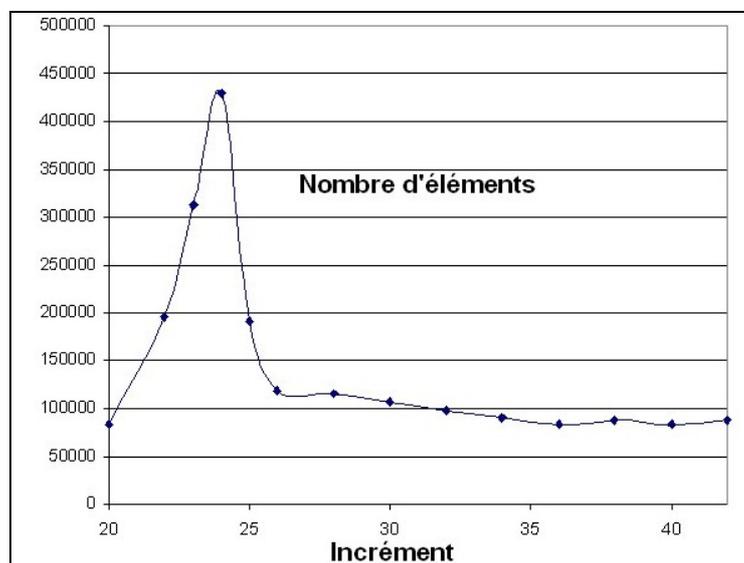


Figure 3-26 : Evolution du nombre d'éléments en début de calcul

3.5.3. Evolution des valeurs seuil du critère RGV

L'évolution de l'écoulement dans un lingot en solidification peut être grossièrement résumée de la manière suivante. La génération d'un écoulement important se fait par la convection naturelle provoquée par le refroidissement. La solidification diminue progressivement la zone liquide et diminue le nombre de Rayleigh. La force motrice diminuant et l'écoulement étant freiné par la présence de la zone pâteuse, la vitesse diminue. Finalement l'écoulement devient négligeable. Cette version simpliste révèle pourtant une faiblesse de notre définition initiale du critère RGV. En effet la valeur de la norme du gradient varie de manière importante du fait que la couche limite dynamique ne change pas énormément d'épaisseur mais par contre la vitesse d'entraînement évolue beaucoup. Puisque le gradient peut être approché par la division de ces deux quantités, on se rend bien compte que si la valeur seuil pour le critère RGV est adaptée à l'écoulement en début de solidification, elle sera beaucoup trop grande ensuite. Cela conduira à un maillage grossier

dans des zones qui mériteraient d'être remaillées plus finement. Il est donc nécessaire de faire évoluer ces valeurs seuil. Cela est particulièrement valable pour la vitesse mais beaucoup moins pour les autres critères. La largeur de la zone pâteuse croît au cours de la solidification mais dans des proportions raisonnables et il n'est donc pas nécessaire de faire des changements dans cette partie.

Il est ainsi clair que la valeur de ces seuils pour le critère RGV doit être directement dépendante de la valeur de la norme de la vitesse. On prendra donc une valeur seuil multipliée par la valeur de la vitesse maximale dans le domaine. Une petite correction a été ajoutée pour éviter de perturber le remaillage par des vitesses excessives qui peuvent apparaître lors de certains problèmes de convergence. L'évolution de cette vitesse maximale est donc contrôlée.

3.5.4. Evolution de la période de remaillage

Lors des premiers calculs, le remaillage était appliqué périodiquement de manière fixe. La présente amélioration a consisté à introduire la possibilité de définir une période qui évolue au cours du temps. Ainsi dans les premiers instants, lors de la formation de la couche limite dynamique et la solidification de la première peau, il est nécessaire de remailler assez fréquemment d'une part parce que les variables évoluent rapidement mais aussi parce que l'on passe d'un maillage initial généralement assez régulier à un maillage adapté à la solution et il est donc primordial d'ajuster au plus vite le maillage à la solution. Ensuite la solidification se poursuit sans que les problèmes soient les mêmes. En effet l'évolution est ensuite beaucoup plus régulière et il est moins nécessaire de remailler.

Un autre critère entre aussi en jeu avec l'application du contrôle du nombre d'éléments et l'extraction de maillage. On applique, en plus des remaillages globaux périodiques, un remaillage global lorsque le nombre d'éléments de la solution est trop éloigné du nombre d'éléments objectifs choisi par l'utilisateur. Dans la limite bien sûr où ce nombre peut être atteint ce qui signifie que le facteur multiplicatif ne soit pas déjà à un de ses extrema. Ainsi par exemple si l'on dépasse le nombre d'éléments imposé mais que le facteur multiplicatif est déjà égal à 2 (la valeur maximale par défaut), les tailles de maille ne peuvent plus être augmentées et il n'est donc pas utile d'appliquer des remaillages qui ne modifieront en rien le nombre d'éléments.

Enfin le dernier cas de déclenchement d'un remaillage « périodique » qui correspond en fait à un remaillage global du domaine est le cas d'une extraction de maillage conduisant à sélectionner plus de 40% des éléments. Dans ce cas là, il semble plus efficace de remailler complètement le domaine. On obtient alors des maillages plus réguliers et qui correspondent aussi mieux à la métrique calculée sans que le temps de calcul soit beaucoup plus important.

3.6. Paramétrisation automatique du remaillage

La définition empirique des paramètres du remaillage a montré son efficacité comme nous le verrons dans les applications du chapitre suivant. Mais cette recherche empirique des paramètres optimaux par l'utilisateur nécessite une pratique et une expérience qui complique l'utilisation du logiciel. Il nous est donc apparu intéressant d'essayer de mettre en place quelques idées permettant de s'affranchir de cette étape de tâtonnements. La paramétrisation automatique du remaillage a donc pour but de fixer l'ensemble des paramètres de remaillage à

partir des données physiques de la simulation aussi bien les données du matériau que les dimensions du lingot. Certains paramètres, comme le nombre d'éléments objectif ou le choix de la période de remaillage, resteront à la charge de l'utilisateur mais ces paramètres sont beaucoup plus faciles à fixer que les valeurs seuil utilisées dans le RGV par exemple. Dans cette partie nous allons donc voir comment une estimation de l'épaisseur minimale et maximale de la zone pâteuse peut être calculée pour ensuite nous intéresser à la formation de la couche limite dynamique et à l'accélération du fluide qui en résulte. Toutefois ce travail mériterait d'être approfondi en testant en particulier différents alliages et en validant plus largement l'intérêt de ces corrélations.

3.6.1. Approximations pour la zone pâteuse

Il est possible de définir théoriquement des valeurs pour cerner les épaisseurs de zone pâteuse qui vont apparaître dans nos calculs. Ici nous présenterons deux cas très simples de conduction thermique, un cas plan et un cas cylindrique, pour déterminer des valeurs minimales et maximales pour la taille de la zone pâteuse.

Cette analyse thermique simple permet de déterminer des points de repère pour le calcul des paramètres de remaillage.

Cas d'un lingot pseudo-2D :

Pour ces calculs on suppose que la température est linéaire dans la zone pâteuse et aussi dans la zone solide.

Solidification de la première peau pâteuse :

Le cas le plus critique est celui pour lequel la paroi du moule reste à température initiale et donc le flux extrait dans le métal est maximal :

$$\phi_{\max} = \frac{T_{\text{metal}}^{\text{ini}} - T_{\text{moule}}^{\text{ini}}}{R} \quad (3.6.1)$$

où R est la résistance de contact.

Or le flux est déterminé par le gradient dans la zone pâteuse :

$$\phi_{\max} = \kappa \frac{T_{\text{metal}}^{\text{liq}} - T_{\text{metal}}^{\text{sol}}}{d_{\text{mush}}} \quad (3.6.2)$$

Il est donc possible de calculer une approximation de la taille de l'épaisseur de la première peau pâteuse :

$$d_{\text{mush}}^{\min} = \kappa R \frac{T_{\text{metal}}^{\text{liq}} - T_{\text{metal}}^{\text{sol}}}{T_{\text{metal}}^{\text{ini}} - T_{\text{moule}}^{\text{ini}}} \quad (3.6.3)$$

Solidification de la dernière portion pâteuse :

Le second cas le plus critique apparaît lorsque l'on finit la solidification avec un gradient de température faible dans la pièce.

On prend maintenant l'hypothèse que la température est linéaire dans l'ensemble de la pièce et du moule. La température varie donc entre la température de liquidus et la température extérieure. On prend comme hypothèse supplémentaire que la conductivité est

identique dans le moule et dans le métal. Cette hypothèse peut être relaxé en calculant la température au contact du moule.

$$\phi = \kappa \frac{T_{metal}^{liq} - T_{ext}}{d_{metal} + d_{moule}} \quad (3.6.4)$$

où d_{metal} et d_{moule} représentent les épaisseurs de ces éléments dans la direction du gradient thermique.

Alors l'épaisseur de la zone pâteuse est égale à :

$$d_{mush}^{max} = (d_{metal} + d_{moule}) \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{T_{metal}^{liq} - T_{ext}} \quad (3.6.5)$$

Cas d'un lingot cylindrique :

Pour un lingot cylindrique, on ne peut plus prendre l'hypothèse d'une température linéaire. Il devient nécessaire de prendre une température de la forme [CARSLAW, 1990] :

$$T(r) = \frac{T_2 \ln(r_2 / r) + T_1 \ln(r / r_1)}{\ln(r_2 / r_1)} \quad (3.6.6)$$

Le flux angulaire est alors égal à :

$$\phi^{ang} = \frac{\kappa}{r} \frac{T_1 - T_2}{\ln(r_2 / r_1)} \quad (3.6.7)$$

Solidification de la première peau pâteuse :

Le flux angulaire extrait maximal est :

$$\phi_{max} = \frac{T_{metal}^{ini} - T_{moule}^{ini}}{R} \quad (3.6.8)$$

où R est la résistance de contact.

Or le flux est déterminé par le gradient dans la zone pâteuse :

$$\phi_{max} = \frac{\kappa}{r_{metal}} \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{\ln(r_{metal} / r_{liq})} \quad (3.6.9)$$

où r_{metal} est le rayon du cylindre de métal liquide

Il est donc possible de calculer une approximation de la taille de l'épaisseur de la première peau pâteuse :

$$dr_{mush}^{min} = r_{metal} \left(1 - \exp \left[\frac{\kappa R}{r_{metal}} \cdot \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{T_{metal}^{ini} - T_{moule}^{ini}} \right] \right) \quad (3.6.10)$$

Solidification de la dernière portion pâteuse :

On conserve l'hypothèse que la conductivité est identique dans le moule et dans le métal.

Par contre le flux présente une singularité pour $r=0$. Il est donc nécessaire de faire une hypothèse différente du calcul précédent. Nous prendrons donc pour ce calcul une position du liquidus à $0.01 * r_{metal}$.

$$T_{metal}^{sol} = \frac{T_{ext} \ln\left(\frac{r_{metal} + r_{moule}}{r_{metal}^{sol}}\right) + T_{metal}^{liq} \ln\left(\frac{r_{metal}^{sol}}{0.01 * r_{metal}}\right)}{\ln\left(\frac{r_{metal} + r_{mould}}{0.01 * r_{metal}}\right)} \quad (3.6.11)$$

où r_{mould} représente l'épaisseur du moule.

Alors l'épaisseur de la zone pâteuse est égale à :

$$r_{metal}^{sol} = \exp\left[\frac{1}{T_{metal}^{liq} - T_{ext}} \cdot \left((T_{metal}^{sol} - T_{ext}) \cdot \ln(r_{metal} + r_{moule}) + (T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}) \ln(0.01 * r_{metal}) \right)\right] \quad (3.6.12)$$

$$dr_{mush}^{max} = r_{metal}^{sol} - 0.01 * r_{metal} \quad (3.6.13)$$

3.6.2. Définition du critère de vitesse à partir d'une corrélation de couche limite

Pour obtenir une approximation du champ de vitesse en début de solidification, on peut utiliser la théorie de formation de couche limite en convection naturelle le long d'une paroi verticale. Le régime dans notre cas est fortement transitoire mais le régime établi constitue une limite supérieure pour la vitesse d'écoulement puisqu'elle ne prend pas en compte le frottement induit par la zone pâteuse. D'autre part en début de solidification la force motrice due à la macroségrégation est négligeable comparativement à la partie thermique. Cette théorie nous fournit alors deux résultats importants provenant de [MARTY, 2001] :

Calcul de l'épaisseur de la couche limite cinétique et de la couche limite thermique en régime établi :

$$\frac{\delta_1}{L} = Gr^{-1/4} = \left(\frac{\nu}{\sqrt{g\beta_T \Delta T L^3}} \right)^{1/2} \quad (3.6.14)$$

$$\frac{\delta_1}{\delta_t} = Pr^{1/2}$$

où L est la hauteur de la plaque

La signification de ces épaisseurs est indiquée sur la Figure 3-27, sur laquelle est aussi représentée l'évolution de la vitesse et de la température, perpendiculairement à la paroi.

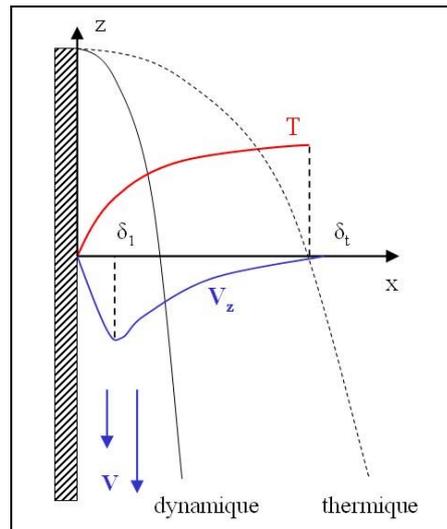


Figure 3-27 : Convection naturelle le long d'une plaque verticale, formation de la couche limite pour un métal liquide ($Pr \ll 1$)

Vitesse maximale en régime établi

$$U = \sqrt{g\beta_T\Delta TL} \quad (3.6.15)$$

Cette vitesse maximale deviendra une limite supérieure pour notre vitesse lors des calculs de paramètres. Ainsi lorsque l'on réactualise le seuil du critère RGV en fonction de la vitesse, la valeur que l'on utilise ne pourra pas dépasser cette valeur seuil.

Il reste maintenant à identifier l'aspect transitoire de la formation de la couche limite dynamique et ses conséquences sur les vitesses et donc sur les critères de maillage. Pour effectuer cette analyse, un nouveau cas test a été généré : un lingot plan en refroidissement latéral par un moule.

Description du lingot plan

Les simulations suivantes ont été réalisées sur un lingot plan de 2m de haut avec un rapport de forme de 5 accompagné d'un moule. Le schéma de la Figure 3-28 présente la géométrie et les conditions aux limites de ce cas ainsi que le maillage du domaine. Le maillage structuré a été généré en utilisant une progression géométrique des tailles de maille avec un facteur 1.1 pour un maillage 51x51 en pseudo-2D. Ce maillage nous permettra donc d'avoir un grand nombre d'éléments dans la zone de contact avec le moule et de garantir ainsi la qualité de la solution tant en thermique qu'en mécanique dans les premiers instants de refroidissement. Les propriétés du matériau sont précisées dans le Tableau 3-4 et le Tableau 3-5.

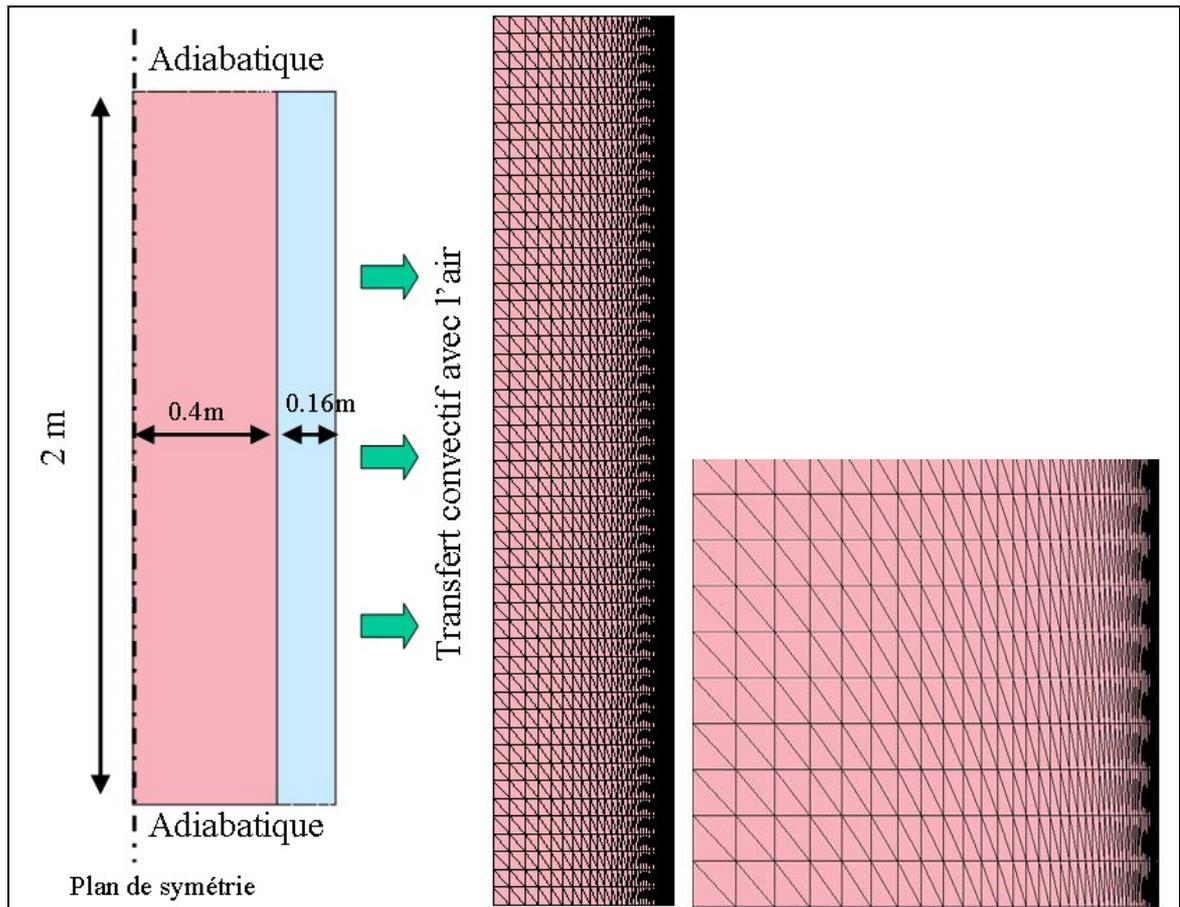


Figure 3-28 : Schéma descriptif du lingot plan, maillage du lingot et zoom en pied du lingot

Tableau 3-4 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 35 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 672 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de liquidus T_l | 1478 °C |
| Température de solidus T_s | 1425 °C |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Température initiale T_0 | 1500 °C |
| Transfert thermique avec le moule | 1000 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 3-5 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 35 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 672 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 20 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Evolution de la couche limite en fonction du temps :

Pour commencer cette étude, nous avons essayé de visualiser la formation de la couche limite et de la zone pâteuse que le maillage fin à la paroi permet de bien capturer. Les courbes suivantes sont prises à $z=1.04$ m, soit à mi-hauteur de la cavité et sur une ligne du maillage pour éviter les interpolations. D'autre part, d'après la forme du lingot et les conditions aux limites, la formation de la zone pâteuse et la génération de la couche limite devraient être homogènes le long de la paroi verticale mais il reste intéressant de prendre une section médiane pour éviter les effets de bord.

La Figure 3-29 montre ainsi la croissance et le décalage de la zone affectée par la couche limite. On observe ainsi nettement une zone étroite de vitesse croissante près de la ligne de liquidus puis une décroissance en norme de la vitesse beaucoup plus modérée à mesure que l'on s'éloigne. La zone affectée a ainsi une épaisseur 1.2 cm à 3.4s et de 2 cm à 10s, dans le même temps la vitesse maximale passe de 0.03 m/s à 0.083 m/s.

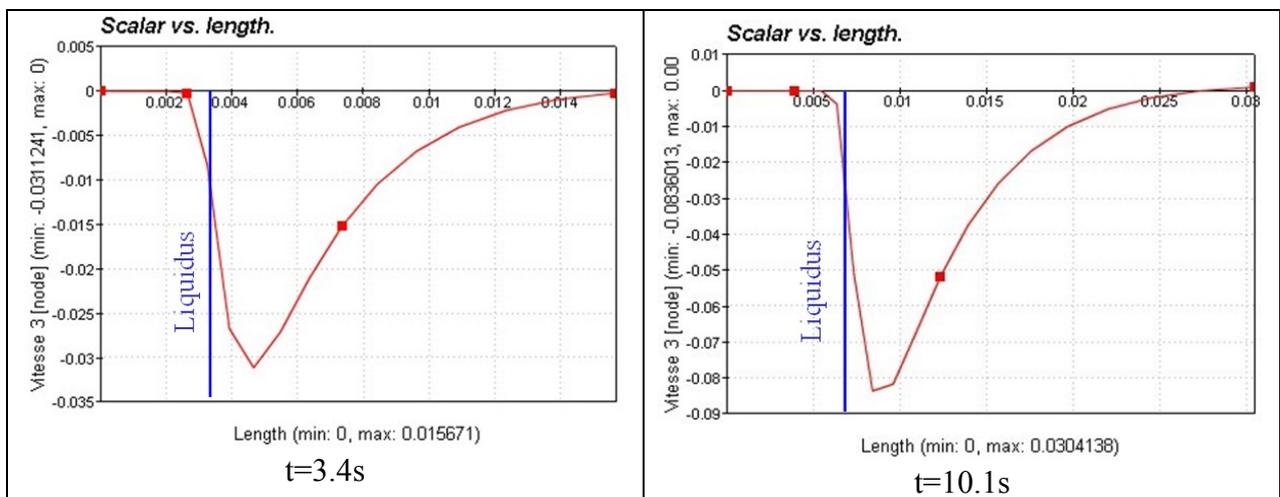


Figure 3-29 : Vitesse verticale en fonction de la distance à la paroi

Ces valeurs peuvent être comparées avec celle que l'on obtient avec la corrélation de couche limite verticale. Cependant il est nécessaire de modifier un peu l'application des formules pour prendre en compte le fait que nous sommes en régime transitoire. Connaissant la vitesse maximale à $t=10.1s$, il est possible de calculer l'épaisseur de la couche limite thermique par la formule suivante [MARTY, 2001] :

$$\frac{\delta_t}{L} = \left(\frac{\alpha}{U \cdot L} \right)^{1/2} \quad (3.6.16)$$

où $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$ est la diffusivité thermique

A partir de cette formule nous obtenons l'épaisseur de la couche limite thermique $\delta_t=1,3$ cm. Ce résultat est bien du même ordre de grandeur que les 2 cm observés précédemment. Toutefois l'écart avec la corrélation provient sans doute de la présence du milieu poreux qui modifie de manière conséquente l'écoulement.

Evolution de la zone pâteuse en fonction du temps :

Le deuxième type de résultats que l'on peut obtenir sur un tel cas est la visualisation de la formation de la zone pâteuse. La mesure de la largeur de la zone en début de solidification nous permettra de confirmer l'approximation de la zone pâteuse présentée précédemment. La Figure 3-30 montre clairement l'élargissement de la zone pâteuse qui n'est complètement formée qu'à partir de 3,4s. A cet instant l'écoulement est déjà non négligeable ce qui justifie d'autant plus l'approximation de la couche limite en convection naturelle puisque l'effet de ralentissement du milieu poreux ne se fait pas fortement sentir immédiatement. On impose en effet une température initiale supérieure de 22°C à la température de liquidus ce qui retarde la solidification.

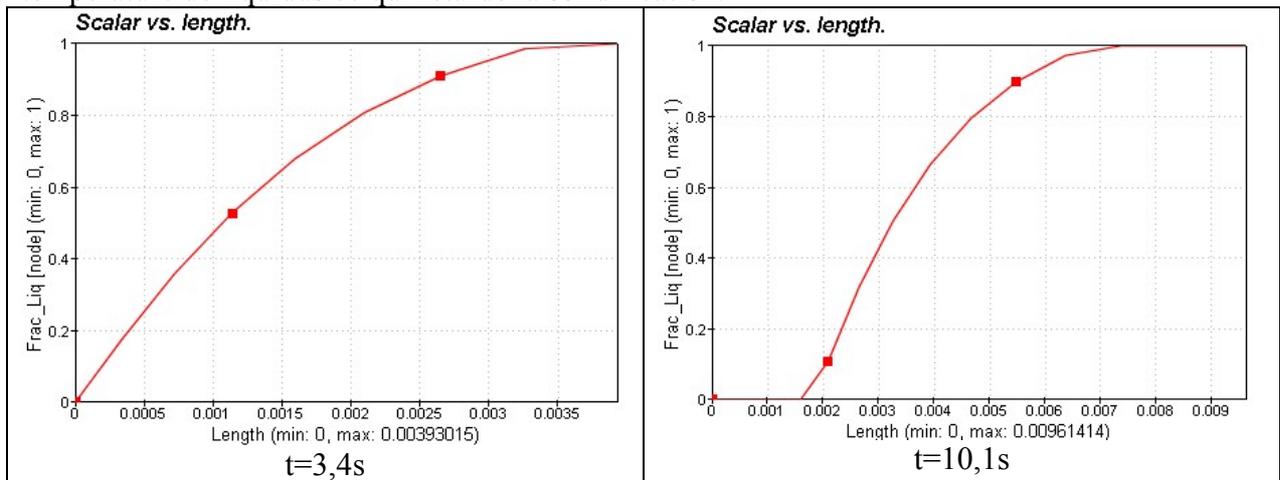


Figure 3-30 : Fraction liquide en fonction de la distance à la paroi

Ces dernières courbes nous permettent d'obtenir une évaluation de la largeur de la zone pâteuse qui est quasiment uniforme le long de la hauteur.

$d_{mush} = 3,5$ mm à $t=3,4s$ qui est le premier pas de temps pour lequel il existe un nœud complètement solide. La zone pâteuse s'élargit ensuite et l'on a $d_{mush} = 5,8$ mm à $t=10,1s$.

L'utilisation de la relation analytique 3.6.3 fournit une valeur pour la taille minimale de la zone pâteuse de 1,48 mm. L'ordre de grandeur est donc bon et la taille mesurée dans la simulation est supérieure à notre valeur théorique. Ce résultat montre donc que l'on peut utiliser cette valeur théorique comme critère de borne inférieure, et même largement inférieur, pour adapter nos valeurs seuil pour le critère RGGL.

Evolution de la vitesse maximale dans le lingot

Après avoir visualisé sur une section l'évolution de la couche limite et de la zone pâteuse, nous allons maintenant nous intéresser à l'accélération de l'écoulement dans les premiers instants du refroidissement. La définition de ce cas induit des conditions qui génèrent un écoulement important en particulier à cause de la surchauffe et de l'isolement du pied de lingot. Ce cas est donc bien adapté pour constituer un cas de référence critique, les calculs sur lingot réel devant donner des évolutions de vitesse plus faibles.

L'accélération du fluide est constante dans les premières secondes de refroidissement comme on peut le voir sur la Figure 3-31. Nous allons donc essayer d'identifier rapidement les paramètres qui nous permettront de déterminer a priori cette accélération. Pour cela plusieurs simulations ont été menées en faisant varier les différents paramètres de la simulation. On suppose que les effets de ces paramètres sont assez uniformes pour que deux

ou trois mesures suffisent à calibrer notre relation finale. Le regroupe les informations concernant cette étude de sensibilité qui nous permettra de déduire une corrélation pour la prédiction de l'accélération de l'écoulement.

Tableau 3-6 : Liste des simulations effectuées sur la sensibilité avec les modifications des paramètres

| Simulation | Modification de paramètre |
|------------|---------------------------|
| Initial | Aucune |
| 1 | $\mu*2$ |
| 2 | $\mu*4$ |
| 3 | $\beta*2$ |
| 4 | $\beta *4$ |
| 5 | $\kappa*2$ |
| 6 | $Cp/2$ |
| 7 | $\rho*2$ |
| 8 | $L/2$ |

Les Figure 3-32 et Figure 3-33 présentent ces différentes simulations et les approximations linéaires correspondantes. μ correspond à la viscosité dynamique, β au coefficient de dilatation thermique, κ à la conductivité thermique, c_p à la capacité calorifique, ρ à la densité, L à la dimension caractéristique soit la hauteur et g à la valeur de la constante de gravité. Les courbes de tendance sont aussi tracées ainsi que l'équation de la droite linéarisant les résultats.

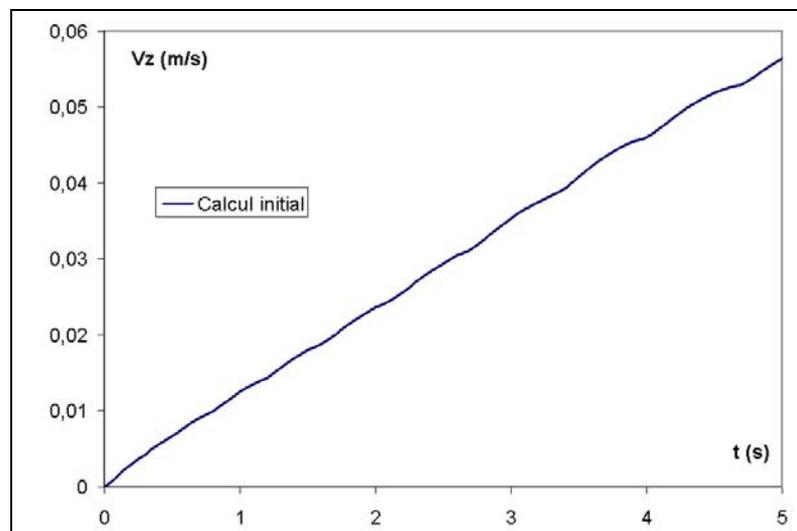


Figure 3-31 : Vitesse verticale maximale en fonction du temps

Les résultats présentés sur ces figures ont ensuite été affinés pour définir ensuite la relation finale. On peut noter par exemple que pour la courbe $\beta*4$, des oscillations dans la vitesse maximale apparaissent plus tôt que pour les autres solutions du fait d'un développement plus rapide de l'écoulement. Ainsi pour déterminer l'approximation linéaire nous n'avons utilisé que les deux premières secondes pour lesquelles l'évolution est quasi linéaire.

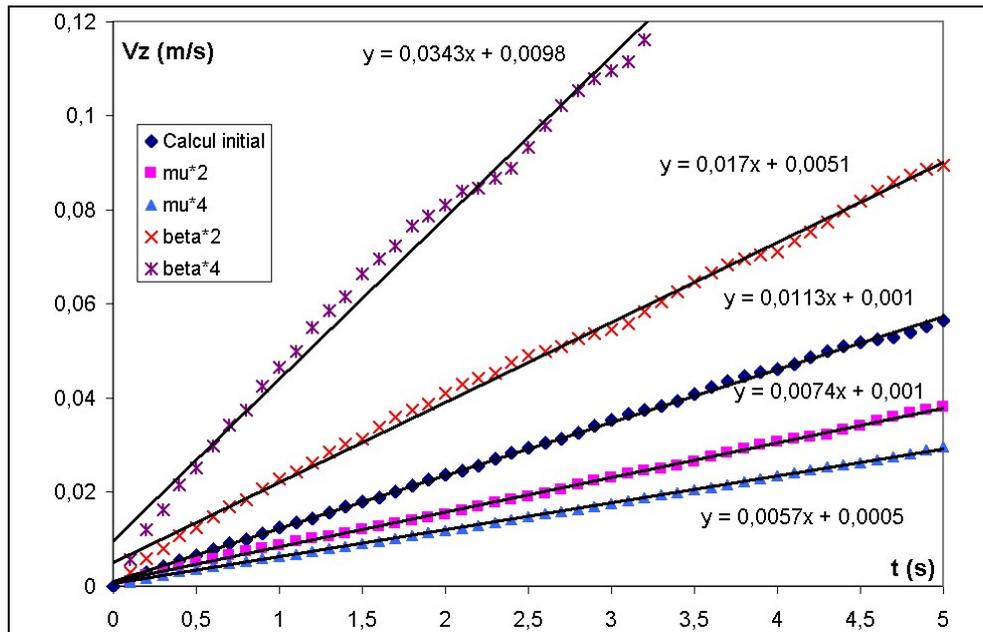


Figure 3-32 : Vitesse verticale maximale en fonction du temps et approximation linéaire en variant la viscosité dynamique et le coefficient de dilatation thermique

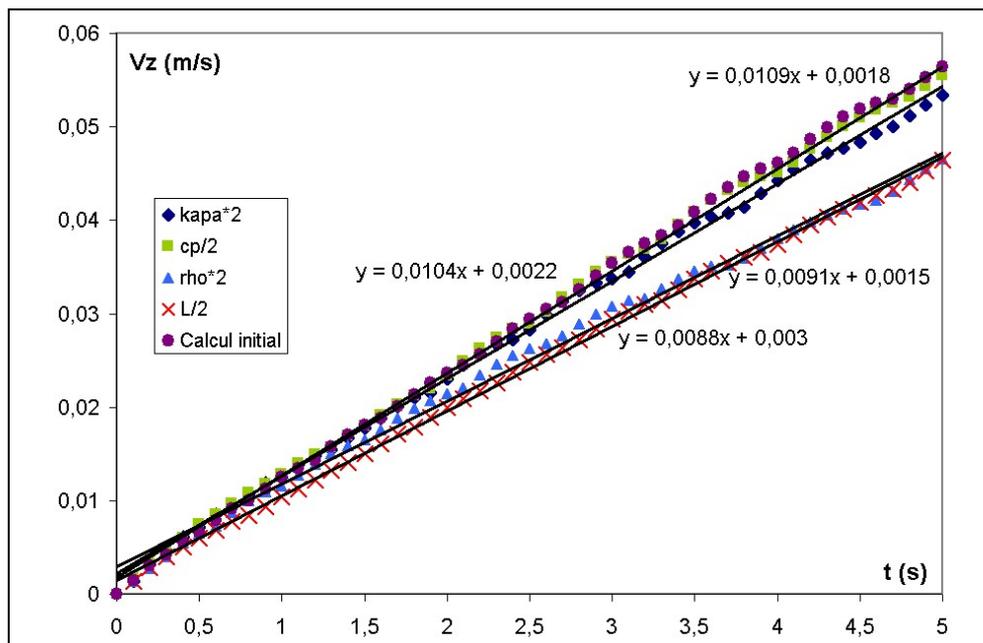


Figure 3-33 : Vitesse verticale maximale en fonction du temps et approximation linéaire en variant la conductivité thermique, la capacité calorifique, la densité, la dimension et la gravité

L'ensemble de ces résultats nous a permis de déterminer une relation qui fournit la valeur de l'accélération du fluide dans ces premiers instants. Les variables κ et c_p n'ont pas montré d'influence notable et seront donc négligées.

Relation de calcul de l'accélération du fluide lors d'un refroidissement sur paroi vertical avec convection naturelle :

$$\frac{dV_{\max}}{dt} = A_{CL} \cdot \rho^{-0.36} \cdot L^{0.36} \cdot \mu^{-0.5} \cdot (\beta_T \Delta T) \quad (3.6.17)$$

avec $A_{CL}=4600$.

Modification dans les valeurs des critères de remaillage :

Enfin l'étape finale consiste à construire, à partir de ces différentes relations et corrélations, une méthode permettant de déterminer nos paramètres de remaillage.

Ainsi, nous avons vu que notre critère seuil sur le gradient de la vitesse évolue en fonction du temps et dépend de la vitesse maximale. Grâce à notre corrélation sur l'accélération de l'écoulement nous allons pouvoir améliorer notre méthode. En effet, nous allons pouvoir contrôler que notre vitesse maximale ne correspond pas à une vitesse locale excessive correspondant à un problème numérique temporaire. Pour cela on limite la vitesse de changement de la vitesse maximale à l'accélération calculée précédemment, de plus la vitesse maximale est aussi bornée par la vitesse en régime établi de l'écoulement de type couche limite. Ces corrections n'interviennent pas sur les variables vitesse provenant de la résolution de la mécanique mais bien dans le calcul des critères de remaillage.

La deuxième utilisation de nos calculs est l'utilisation des valeurs minimales de l'épaisseur de la zone pâteuse d_{mush} . Cette valeur peut être utilisée pour calculer les valeurs seuil des gradients mais aussi les tailles de maille comme le montre l'exemple suivant :

Exemple :

Valeur du coefficient A qui représente le maximum du gradient de fraction liquide : $A=1/d$ où d désigne la taille minimale de la zone pâteuse

La valeur seuil maximale du critère RGGL est alors définie égale à $A/3$ et la valeur minimale égale à $A/10$

Les tailles de maille dans la zone pâteuse sont alors définies de la manière suivante : la taille minimale est égale à $d/4$, la taille maximale à d et la taille par défaut dans la zone pâteuse à $2*d$.

Ces informations sont regroupées dans le Tableau 3-7.

Tableau 3-7 : Paramétrisation automatique du remaillage pour le critère RGGL

| <u>Paramètres du critère RGGL :</u> |
|--|
| Seuil_1 : $A/10 \text{ m}^{-1}$ |
| Seuil_2 : $A/3 \text{ m}^{-1}$ |
| Taille_1 : $d/4 \text{ m}$ |
| Taille_2 : $d \text{ m}$ |
| Taille par défaut : $2*d \text{ m}$ |
| où d est la taille minimale de la zone pâteuse et $A=1/d$ |

Ces résultats pourraient être complétés par une évaluation de l'épaisseur de la couche limite dynamique par une corrélation du type de celle utilisée pour l'accélération. On pourrait alors prédire aussi les valeurs des tailles de maille pour le critère RGV à partir de relations basées directement sur les données physiques ce qui faciliterait le travail de l'utilisateur lors de la mise en donnée.

3.7. Application de la stratégie de remaillage

Lors de la validation de la résolution de la mécanique, nous avons utilisé comme cas de référence la cavité entraînée. Nous allons ici réutiliser cet exemple pour démontrer la pertinence de l'application de notre stratégie de remaillage adaptatif. Si cet écoulement assez simple ne permet pas de tester l'ensemble des critères, il a l'avantage de nous permettre une comparaison avec des résultats de référence, en utilisant différents maillages. Le schéma de la cavité et le champ de vitesse sont rappelés sur la Figure 3-34. Les parois sont en contact collant avec le fluide sauf la surface supérieure pour laquelle on impose une vitesse d'entraînement constante et parallèle à la paroi.

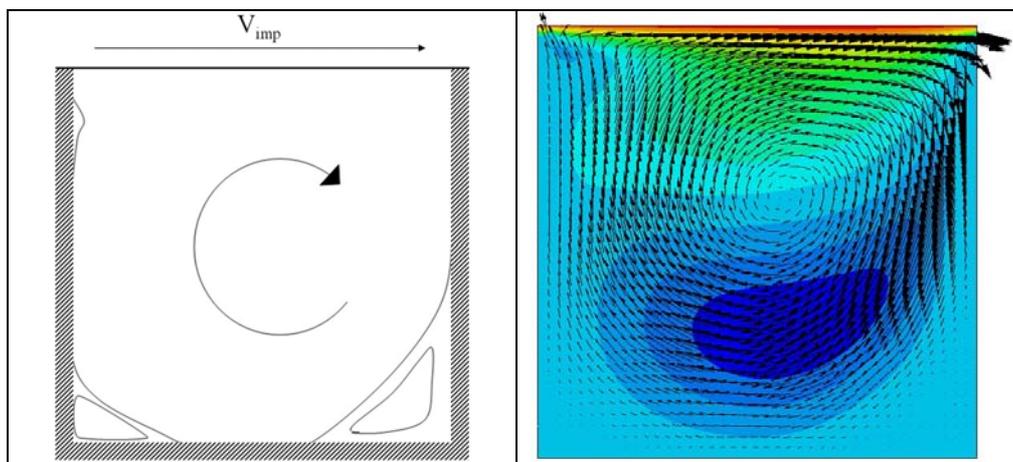


Figure 3-34 : Schéma du cas test de la cavité entraînée et champ de vitesse V_x et vecteur vitesse sur le maillage structuré m41 (41x41x2)

Lorsque l'on applique le remaillage adaptatif, seul le critère RGV est utile ici : on obtient le maillage de la Figure 3-35. Lorsqu'on le compare au maillage initial, il est évident que le maillage s'est bien adapté à l'écoulement. En particulier les couches limites, avec des forts gradients de vitesse à proximité de la paroi entraînée et sur le haut de la paroi droite, ont conduit à un raffinement important du maillage. De plus on décèle la forme de l'écoulement en observant la partie principale du maillage qui s'est étiré dans la direction de la vitesse. Ainsi le point fixe central est repéré par une zone isotrope car la direction du vecteur change rapidement puisque le fluide est en rotation autour de ce point. Les deux vortex secondaires qui apparaissent dans les coins sont aussi visibles.

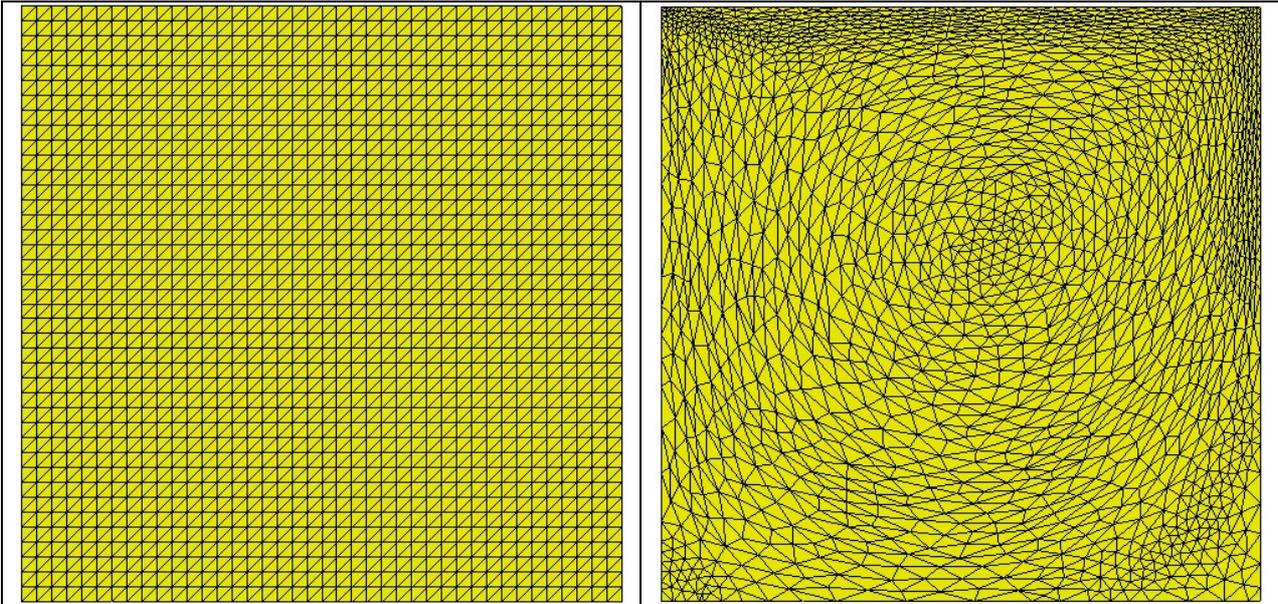


Figure 3-35 : Maillage structuré initial m41 soit 41x41x2 nœuds (soit 9600 éléments) et le maillage adaptatif à 350s (9848 éléments)

Toutefois ces considérations qualitatives ne sont pas suffisantes pour démontrer l'efficacité de notre remaillage. Pour cela nous avons comparé les vitesses verticales sur la section centrale horizontale. La Figure 3-36 montre ainsi que les résultats sont très proches. De plus lorsque l'on zoome vers le pic de vitesse positive, on s'aperçoit que la courbe obtenue avec remaillage est plus proche des résultats de référence que le maillage structuré de départ mais aussi qu'un maillage structuré qui comprend deux fois plus d'éléments. Nous pouvons donc conclure que l'application du remaillage conduit à une amélioration notable de la précision de notre solution sur ce cas de référence.

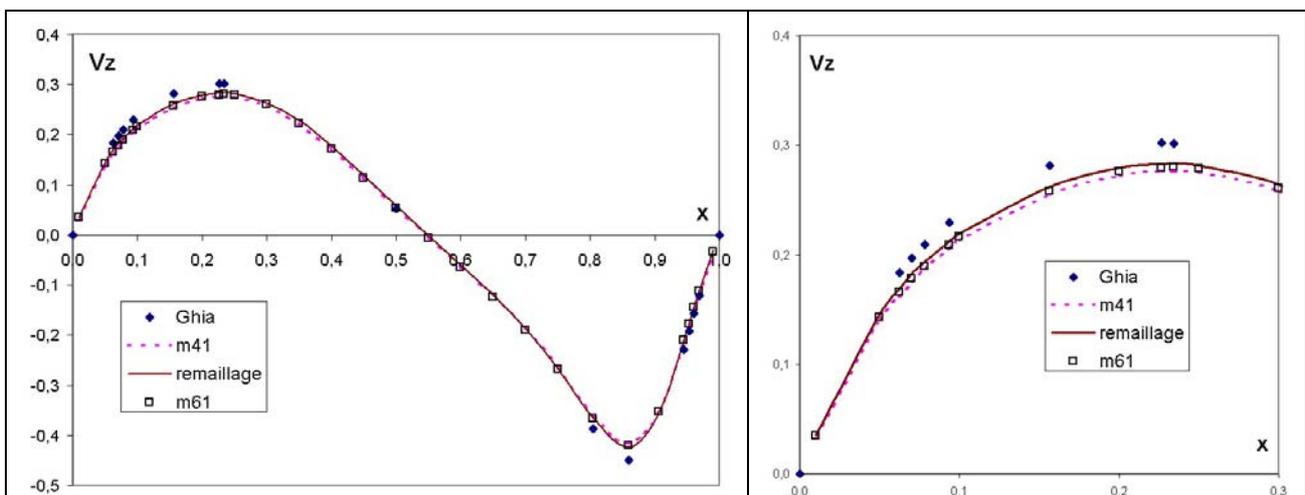


Figure 3-36 : Vitesse verticale sur la section médiane horizontale (zoom à droite) pour le maillage m41 (9600 éléments), m61 (21600 éléments), avec remaillage (9848 éléments) et le résultat de référence [GHIA, 1982]

Chapitre 4 Simulation de la macroségrégation sur différents lingots

| | | |
|------------|--|-----|
| Chapitre 4 | Simulation de la macroségrégation sur différents lingots | 129 |
| 4.1. | Application aux cas test expérimentaux de Hebditch-Hunt..... | 130 |
| 4.1.1. | Présentation des cas test expérimentaux de Hebditch-Hunt..... | 130 |
| 4.1.2. | Etude de la solidification de l'alliage Pb-48%Sn..... | 132 |
| 4.1.3. | Etude de la solidification de l'alliage Sn-5%Pb..... | 137 |
| 4.2. | Application de l'approche pseudo-2D sur un lingot Fe-0.38%C..... | 147 |
| 4.2.1. | Présentation du lingot plan..... | 147 |
| 4.2.2. | Etude de l'écoulement..... | 149 |
| 4.2.3. | Etude de la macroségrégation | 153 |
| 4.3. | Application sur un lingot benchmark 3D pour un alliage Fe-0.38%C..... | 158 |
| 4.3.1. | Présentation du lingot benchmark | 158 |
| 4.3.2. | Solidification du lingot benchmark : premiers calculs..... | 159 |
| 4.3.3. | Analyse des résultats obtenus après 180s de refroidissement pour différentes simulations | 161 |
| 4.3.4. | Conclusion partielle..... | 169 |
| 4.4. | Analyse de la solidification sur un lingot 3D cylindrique avec moule | 170 |
| 4.4.1. | Présentation du lingot intermédiaire | 170 |
| 4.4.2. | Etude de l'effet du choc thermique sur la solidification et la vitesse dans l'écoulement..... | 171 |
| 4.4.3. | Etude de la thermique du lingot | 173 |
| 4.4.4. | Etude de l'écoulement..... | 175 |
| 4.4.5. | Etude de la macroségrégation | 176 |

Dans ce chapitre, nous allons appliquer les modèles décrits précédemment pour simuler la macroségrégation. De plus nous verrons aussi les effets de l'utilisation de la stratégie de remaillage anisotrope. Plusieurs cas test différents seront présentés, le premier lingot est de petite dimension et va nous servir à effectuer des comparaisons avec des résultats expérimentaux et d'autres de code de calcul. Ensuite nous étudierons successivement trois lingots de plus grandes dimensions : un lingot plan, un lingot similaire à un lingot industriel et enfin un lingot de plus petite taille permettant une analyse numérique plus poussée.

En préliminaire de cette étude de l'application de THERCAST sur plusieurs cas test, il nous paraît important de noter que les analyses présentées dans ce qui suit sont des interprétations des résultats obtenus. En particulier l'interprétation de l'évolution de la macroségrégation dans le lingot est bien souvent faite à partir de l'écoulement principal. Or une partie non négligeable de cette ségrégation a lieu directement dans la zone pâteuse. Ainsi l'analyse plus en détail des écoulements dans la zone pâteuse pourrait modifier certaines de nos conclusions. Les conclusions présentées ici ne sont en rien définitives mais constituent plutôt une tentative d'explication des observations de nos simulations, un travail préliminaire qu'il conviendrait d'affiner et de valider plus largement.

D'autre part, dans la présentation des équations, nous avons utilisé une concentration moyenne volumique, du fait de l'hypothèse d'une masse volumique constante, nous présenterons dans nos résultats des concentrations massique (en pourcentage de masse : wt%).

4.1. Application aux cas test expérimentaux de Hebditch-Hunt

4.1.1. Présentation des cas test expérimentaux de Hebditch-Hunt

Hebditch et Hunt ont réalisé une expérience de solidification sur deux alliages plomb-étain et étain-plomb dans les années 70. Leurs mesures ont porté en particulier sur la macroségrégation (cf. [HEBDITCH, 1974]). Ces résultats ont servi de référence pour plusieurs articles de validation et de comparaison de codes de calcul ([AHMAD, 1998], [DESBIOLLES, 2003]). Nous avons donc aussi sélectionné ce cas test pour effectuer des comparaisons avec les résultats de la thèse de Weitao Liu menée sur R2SOL en parallèle de ce travail [LIU, 2005] et avec les résultats de SOLID, code de volumes finis développé au LSG2M, laboratoire de l'école des mines de Nancy [AHMAD, 1998].

Le lingot utilisé dans ces expériences est de petite taille et refroidie latéralement. La Figure 4-1 précise les dimensions et les conditions aux limites. Les parois sont supposées adiabatiques sauf sur la paroi latérale gauche qui est soumise à une condition de type convection. De plus la faible épaisseur de la cavité contraint fortement l'écoulement qui devrait se rapprocher d'une configuration 2D. Cependant l'effet de frottement des parois pourrait limiter la vitesse de l'écoulement. Nous testerons donc dans les simulations qui suivent l'effet de la prise en compte de l'ensemble du domaine par rapport à une approximation 2D. Les caractéristiques des deux alliages utilisés dans ces expériences sont indiquées dans le Tableau 4-1, elles proviennent de [AHMAD, 1998]. On peut noter que la forte concentration de l'alliage Pb-48%Sn risque de conduire à une solidification eutectique à cause de l'enrichissement local en soluté (cf. Figure 4-2). D'autre part l'écoulement devrait être très différent dans les deux simulations car les forces motrices dues à la concentration en

soluté sont de signe opposées. Le cas Sn-5%Pb aura donc un front de solidification qui pourra être instable ce qui peut conduire à la formation de canaux ségrévés.

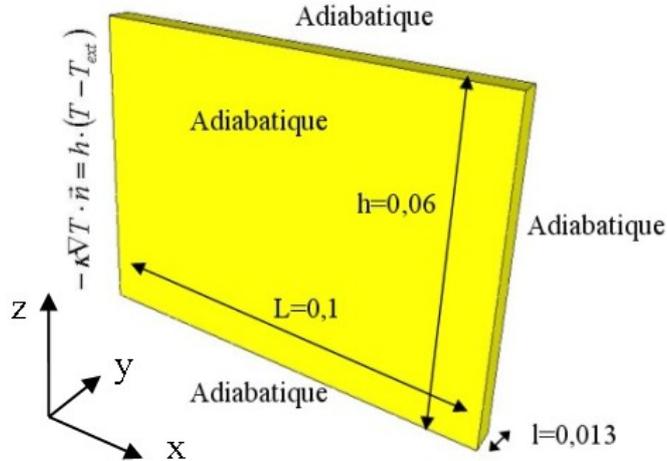


Figure 4-1 : Schéma de la cavité du cas test Hebditch-Hunt

Tableau 4-1 : Caractéristiques des alliages du cas test Hebditch-Hunt

| | Pb-48%Sn | Sn-5%Pb |
|---|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 9000 kg m ⁻³ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 50 W m ⁻¹ K ⁻¹ | 55 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 200 J kg ⁻¹ K ⁻¹ | 260 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 10 ⁻³ Pa s | 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 10 ⁻⁴ K ⁻¹ | 6 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 53550 J kg ⁻¹ | 61000 J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du metal pur T_{ls} | 327.5 °C | 232 °C |
| Température eutectique T_{eut} | 183 °C | 183 °C |
| Pente du liquidus m | -2.334 K (wt%) ⁻¹ | -1.286 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.307 | 0.0656 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 40 μm | 65 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.5 10 ⁻³ (wt%) ⁻¹ | -5.3 10 ⁻³ (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 216 °C | 226 °C |
| Concentration initiale c_0 | 48 wt% | 5 wt% |
| Coefficient de transfert thermique h | 400 W m ⁻² K ⁻¹ | 300 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 25 °C | 25 °C |

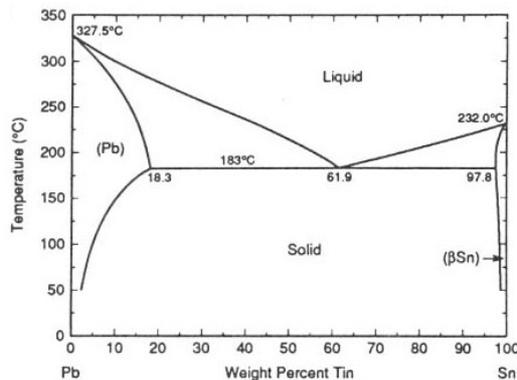


Figure 4-2 : Diagramme de phase de l'alliage Plomb-Etain

4.1.2. Etude de la solidification de l'alliage Pb-48%Sn

La plupart de nos tests ont été effectués sur l'alliage Pb-48%Sn car il présente moins de particularités que l'alliage Sn-5%Pb qui conduit à l'apparition de canaux ségrégués comme nous le verrons dans la suite. Ce cas va donc nous servir de base pour tester les différentes méthodes de résolution, l'effet du pas de temps automatique ou le choix d'une approximation 2D de la cavité. Nous comparerons nos résultats avec les résultats expérimentaux et le code volumes finis SOLID.

Comparaison entre les simulations 2D/3D et validation

Dans les deux premières simulations que nous allons présenter, nous avons choisi d'utiliser un maillage non structuré, la résolution SUPG-PSPG et un pas de temps automatique. Le pas de temps automatique est fixé par les variations de température d'un incrément sur l'autre. On impose que cette variation soit comprise entre deux valeurs seuils fixées par l'utilisateur. On ajuste ensuite le pas de temps pour respecter ce critère. Cela conduit à une augmentation progressive du pas de temps avec la solidification car le refroidissement s'affaiblit avec la baisse de température de la paroi. L'augmentation progressive du pas de temps conduit à une diminution du temps de calcul. Ainsi ces paramètres de simulation correspondent aux paramètres d'un cas standard et nous permettrons donc d'évaluer le code dans sa configuration par défaut pour ensuite voir les effets des autres paramétrages possibles.

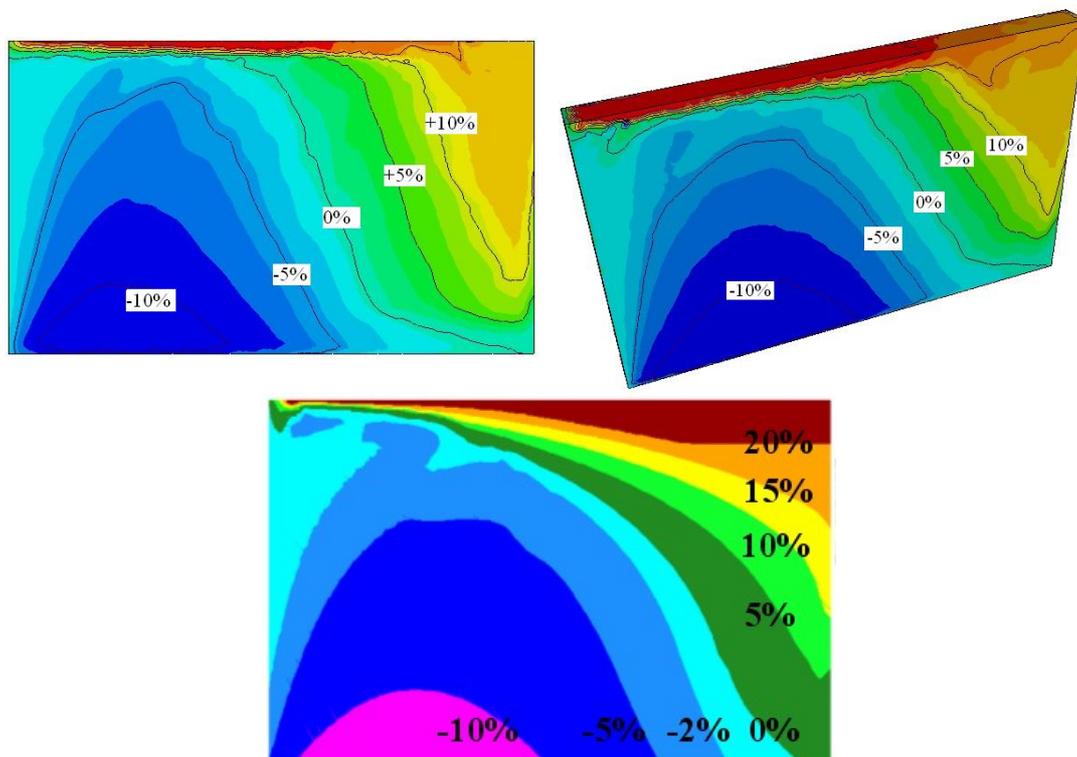


Figure 4-3 : Courbes d'écart relatif de concentration moyenne à 400s pour l'alliage Pb-48%Sn, simulation pseudo-2D (en haut à gauche), simulation 3D (en haut à droite) et simulation 2D avec SOLID en bas

La Figure 4-3 montre ainsi que les résultats sont similaires selon que l'on effectue une simulation pseudo-2D (qui n'a qu'un seul élément dans l'épaisseur et qui est borné par deux plans de symétrie) ou une simulation complètement 3D qui représente la moitié de la cavité. Ces résultats après 400s de solidification sont aussi très comparables à ceux obtenus avec SOLID même si des différences de concentration maximale apparaissent nettement dans le coin supérieur droit.

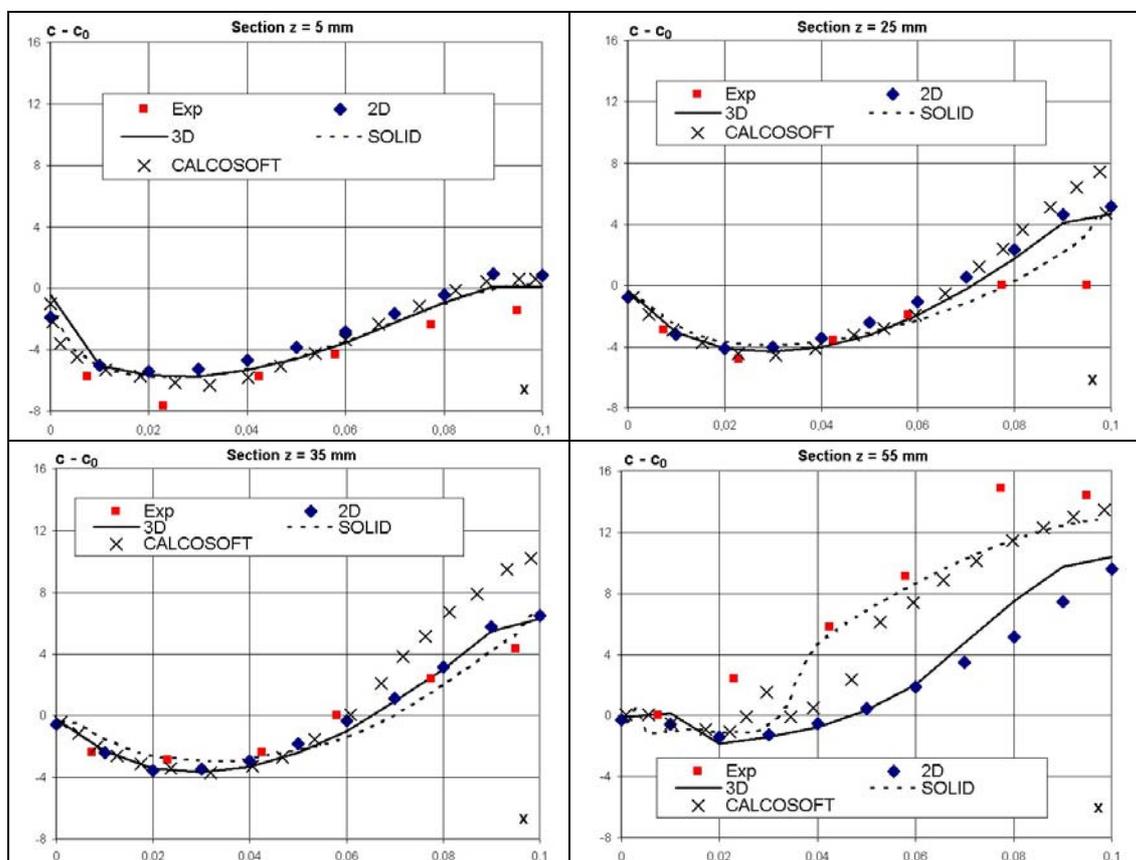


Figure 4-4 : Courbes d'écart de concentration (en wt%) sur les sections horizontales, comparaison entre les simulations 2D/3D THERCAST, les résultats expérimentaux et ceux de SOLID et CALCOSOFT à la fin de la solidification pour l'alliage Pb-48%Sn

Pour compléter cette analyse des résultats, on peut étudier les courbes de concentration sur des sections horizontales à la fin de la solidification soit après environ 1200s. La Figure 4-4 présente ainsi une comparaison entre nos deux simulations, les résultats expérimentaux et les résultats de SOLID mais aussi avec les résultats obtenus par un autre code éléments finis 3D, CALCOSOFT, présenté dans [DESBIOLLES, 2003]. Les écarts sont globalement assez faibles sur les trois sections les plus basses ($z=5$ mm, 25 mm et 35 mm). Par contre dans la section la plus haute ($z=55$ mm) on observe une ségrégation plus faible dans les résultats de THERCAST que dans ceux des deux autres codes. Toutefois on peut aussi noter que CALCOSOFT prédit des ségrégations plus importantes sur toutes les sections. Les raisons de ces écarts ne sont pas complètement claires, il conviendrait d'étudier plus finement l'évolution de l'écoulement dans chacune de ces simulations pour voir les écarts et déterminer ainsi les causes de ce résultat final. Cependant globalement les prédictions de THERCAST sont en bon accord avec les résultats expérimentaux si l'on excepte la zone particulière du canal liquide qui se forme en haut de la cavité. En effet l'accumulation de soluté en haut près de la paroi conduit à une diminution de la température du liquidus et donc à une solidification

plus tardive ce qui modifie considérablement l'écoulement dans cette zone. Toutefois la masse globale de soluté est bien conservée tout au long du calcul.

Comparaison des schémas de résolution de la mécanique

Nous avons déjà comparé les schémas de résolution de la mécanique sur le cas test de la cavité entraînée mais la nécessité de tester de nouveaux modèles provient des résultats que nous avons obtenus sur cet alliage lors des premières simulations. En effet, comme le montre la Figure 4-5, les résultats avec la résolution initialement présente dans THERCAST présente des oscillations très importantes à proximité du canal liquide vers la paroi supérieure. Cela induit des ségrégations très importantes qui varient très rapidement. Ces singularités sont purement numériques et disparaissent lorsque l'on utilise un schéma plus stable comme le schéma SUPG-PSPG. La Figure 4-5 montre ainsi l'amélioration importante apportée aux courbes de ségrégation par l'introduction d'un schéma de résolution de la mécanique plus performant et plus stable.

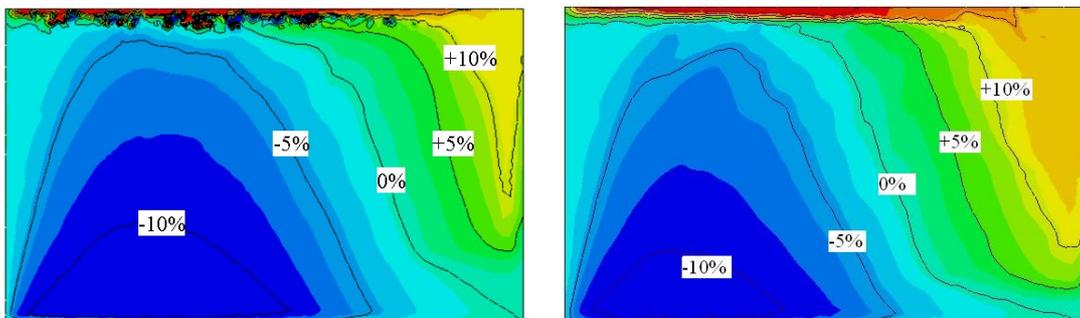


Figure 4-5 : Courbes d'écart relatif de concentration moyenne à 400s pour l'alliage Pb-48%Sn, simulation avec résolution élément bulle sans SUPG (à gauche), simulation avec résolution SUPG-PSPG (à droite)

Comparaison entre un pas de temps fixe et un pas de temps automatique

L'utilisation du pas de temps automatique permet de réduire fortement le temps de calcul, on passe de 42h de calcul à 8h pour obtenir la solution à $t=400s$. En effet au fur et à mesure de la solidification, le critère sur les écarts maximaux de température d'un incrément sur l'autre conduit à une augmentation du pas de temps qui passe de 0.1s à 1s voire même plus. Ce changement de pas de temps, même s'il est progressif, entraîne logiquement une modification de la solution. La Figure 4-6 montre ainsi que la forme des isolignes de concentration est modifiée. Cependant globalement la modification n'est pas très sensible et on peut considérer que le gain en temps de calcul est justifiable sur ce cas test en tout cas, à partir du moment où on effectue une étude plus qualitative que quantitative. Cependant il n'est pas sûr qu'une telle stratégie fonctionne aussi bien dans un cas plus complexe, en effet d'autres paramètres devraient aussi entrer en jeu pour déterminer le pas de temps. Se limiter à un critère de changement de température reviendrait à n'accorder aucune importance à la résolution mécanique, qui est la plus susceptible de rencontrer des problèmes de convergence, ou à la solidification qui est une zone de forts gradients. Ainsi la mise en place d'une méthode de détermination du pas de temps plus générale semble nécessaire.

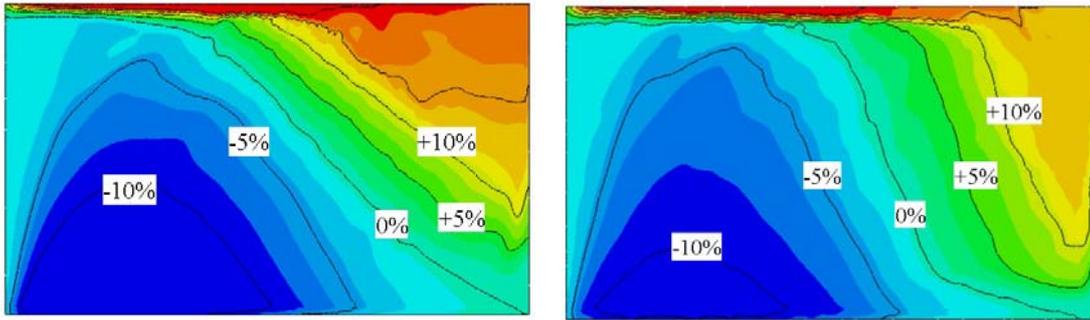


Figure 4-6 : Courbes d'écart relatif de concentration moyenne à 400s pour l'alliage Pb-48%Sn, simulation avec pas de temps fixe $dt=0.1s$ (à gauche), simulation avec pas de temps automatique (à droite)

Cela est encore plus notable lorsque l'on compare les courbes de ségrégation sur deux sections horizontales (Figure 4-7). La section à $z=25$ mm, qui se situe quasiment à mi-hauteur de la cavité, ne voit que peu d'écarts entre les deux solutions. Cette différence ne devient vraiment visible que lorsque l'on visualise la section la plus critique à $z=55$ mm. Ici l'augmentation du pas de temps conduit à une diminution appréciable de la ségrégation. Un autre point intéressant est de voir que les courbes se superposent jusqu'à $x=0.03$ m. Cela nous indique peut-être le point solidifié à partir duquel l'écart de pas de temps entre les deux solutions devient significatif et modifie en conséquence l'écoulement et la macroségrégation.

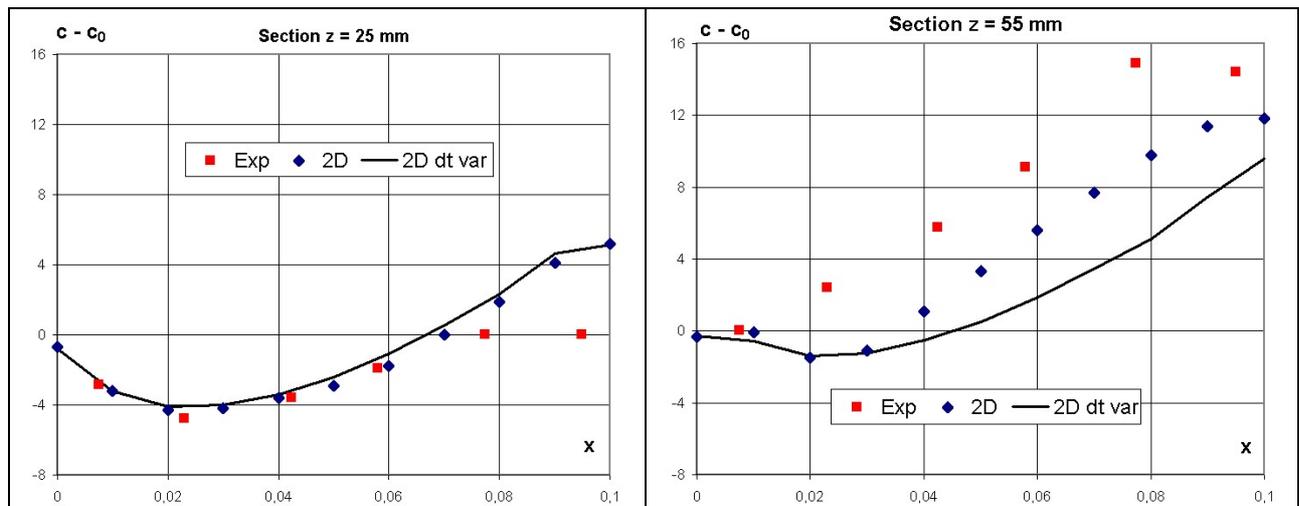


Figure 4-7 : Courbes d'écart de concentration (en wt%) sur les sections horizontales après solidification complète. Comparaison entre les simulations 2D avec pas de temps fixe et pas de temps automatique à la fin de la solidification pour l'alliage Pb-48%Sn

Comparaison pour le pas de temps automatique avec remaillage adaptatif

Le dernier point étudié dans cette analyse de l'alliage Pb-48%Sn est l'effet de l'application du remaillage. Nous avons décidé de l'utiliser en le combinant avec le pas de temps automatique pour voir plus nettement les améliorations et aussi utiliser des paramètres que l'on souhaiterait standard. La Figure 4-8 présente d'abord les courbes de ségrégation à 400s. Les résultats obtenus avec le remaillage sont beaucoup plus réguliers mais restent

proches de la solution sur le maillage fixe. On voit sur ce calcul apparaître l'effet de lissage induit par le remaillage avec par exemple la disparition du léger canal en haut à gauche de la cavité. L'image du maillage adapté nous permet d'identifier la zone solidifiée à gauche qui est maillée finement pour garder les variations de concentration, plus finement d'ailleurs qu'une partie de la zone pâteuse ce qui montre une mauvaise adéquation entre ces deux tailles de maille. La zone encore liquide dans laquelle un écoulement est encore présent est maillée très finement et se situe en haut de la cavité et dans la partie droite le long de la paroi. Une bonne partie du fluide n'est quasiment pas en mouvement. Cet exemple montre bien que notre stratégie de remaillage a correctement rempli ses objectifs. Nos critères de remaillage sont efficaces même s'ils ne semblent pas forcément optimisés pour ce cas test.

Enfin la comparaison en fin de solidification des ségrégations, sur la section horizontale la plus critique à $z=55$ mm, montre une amélioration des résultats avec une augmentation de la ségrégation en fin de solidification qui est plus importante et qui nous rapproche donc des résultats expérimentaux.

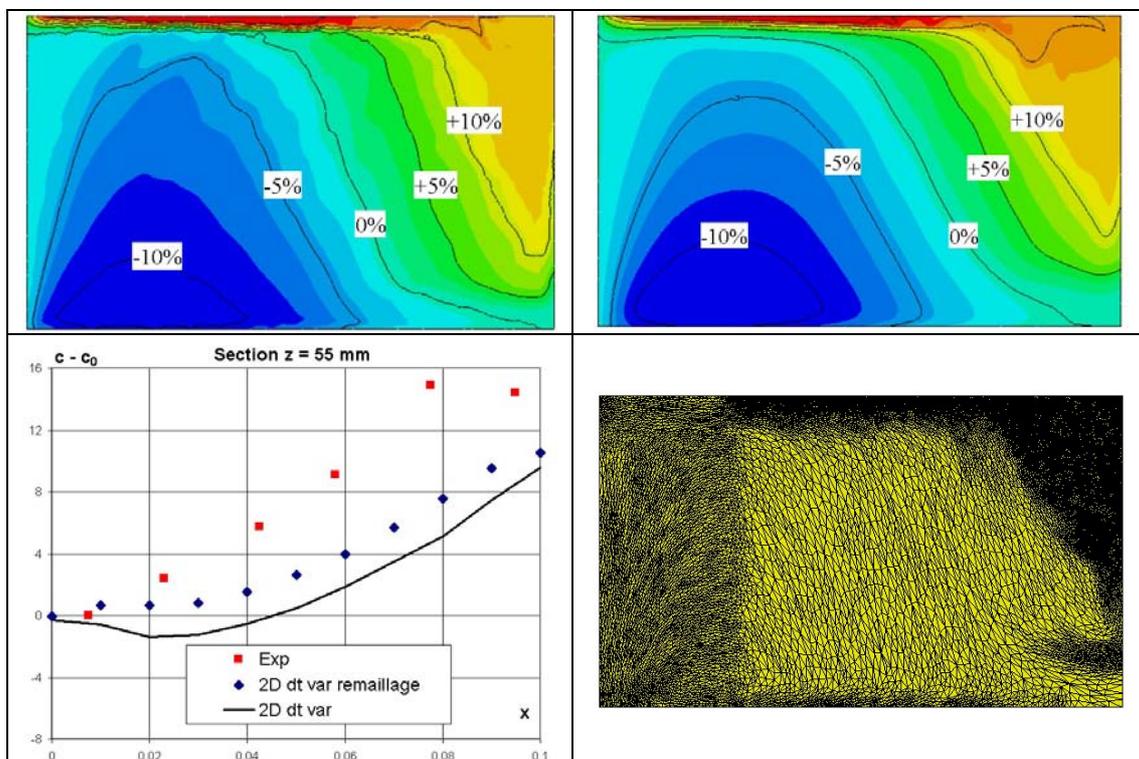


Figure 4-8 : Courbes d'écart relatif de concentration moyenne à 400s pour l'alliage Pb-48%Sn ainsi que sur la section la plus critique à la fin de la solidification (en bas à gauche), pour un pas de temps automatique. Simulation en pseudo-2D sans remaillage (en haut à gauche) avec remaillage (à droite) et son maillage adapté (en bas à droite)

Les différents tests effectués sur cette cavité en utilisant l'alliage Pb-48%Sn ont montré que la méthode de résolution SUPG-PSPG améliore beaucoup les résultats en supprimant des singularités numériques. D'autre part l'utilisation du pas de temps automatique dégrade un peu la solution mais peut être conservée lors d'études qualitatives. En particulier si on la combine avec le remaillage adaptatif qui permet de se rapprocher des résultats expérimentaux mais induit aussi un lissage important.

Ces tests ont permis de valider l'implémentation de la macroségrégation dans THERCAST par comparaison avec des résultats expérimentaux et avec les résultats d'autres codes de simulation.

4.1.3. Etude de la solidification de l'alliage Sn-5%Pb

La solidification de l'alliage Sn-5%Pb conduit à la formation de canaux ségrévés dans la partie inférieure de la cavité. Ces canaux n'avaient pas pu être captés par le code éléments finis utilisé (CALCO-MOS), qui utilise un maillage régulier de quadrangles, dans l'article de référence alors que le code volumes finis (SOLID) en prédisait [AHMAD, 1998]. Ici nous allons étudier la réponse de notre logiciel éléments finis par rapport à la prédiction de ces canaux et cela aussi bien sur un maillage structuré que sur un maillage non structuré. Nous verrons aussi les effets de l'application du remaillage sur ce cas test. Enfin nous analyserons plus précisément l'aspect 3D de la solidification dans ce lingot au niveau de la macroségrégation et de l'écoulement.

Comparaison des résultats avec R2SOL et SOLID

Pour commencer cette étude, nous allons comparer les résultats obtenus sur une simulation pseudo-2D sur maillage non structuré et une simulation 3D sur maillage structuré avec ceux obtenus avec les codes R2SOL et SOLID. Le pas de temps est fixé à 0.05s sauf pour la simulation 3D qui utilise une valeur de 0.1s. Les données du matériau, les conditions aux limites et la géométrie sont donnés sur la Figure 4-1 et dans le Tableau 4-1. La comparaison des cartes de macroségrégation à $t=400s$ (cf. Figure 4-9) montre un bon accord entre les différents codes au niveau des amplitudes des ségrégations et de leur position. Les résultats de THERCAST en 3D présentent tout de même une différence dans le coin inférieur droit où les lignes des isovaleurs de concentrations ne sont pas planes mais déformées par l'écoulement de manière similaire à ce qui a été observé pour les simulations sur l'alliage Pb-48%Sn.

Les trois codes prédisent des canaux ségrévés mais leurs amplitudes, leurs formes et leur nombre varient en fonction des simulations. La première remarque que l'on peut faire est que l'orientation des canaux est différente, dans les simulations éléments finis les canaux sont inclinés de 60° et cette inclinaison est la même pour tous les canaux. Dans la simulation avec SOLID, l'inclinaison des canaux décroît de gauche à droite (soit avec le temps puisque la solidification progresse de gauche à droite). Une deuxième remarque est que la solution volumes finis de SOLID est plus régulière. Les résultats éléments finis présentent des oscillations, ces canaux ségrévés sont le fruit d'instabilités que l'on peut voir très nettement sur les résultats de R2SOL. Enfin si l'on compare les résultats de la simulation 3D de THERCAST avec les résultats de R2SOL on voit que les canaux ne sont pas présents partout mais disparaissent au-delà d'une certaine hauteur. Ce phénomène trouve son explication dans le maillage. En effet le maillage 3D est raffiné vers la paroi inférieure (comme nous le verrons plus précisément dans l'analyse postérieure de ce cas, cf. Figure 4-14). Ainsi, à partir d'une certaine hauteur le maillage n'est plus assez fin pour permettre la capture des canaux ségrévés. Une étude de l'importance de la taille de maille, pour ce cas test, a été menée dans la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005]. Cette comparaison nous permet de valider notre module de macroségrégation sur un cas différent de l'alliage Pb-48%Sn et présentant en particulier la formation de canaux ségrévés. Cette étape de validation étant franchie, nous allons maintenant

tirer quelques conclusions supplémentaires en analysant les différentes simulations menées sur ce cas test.

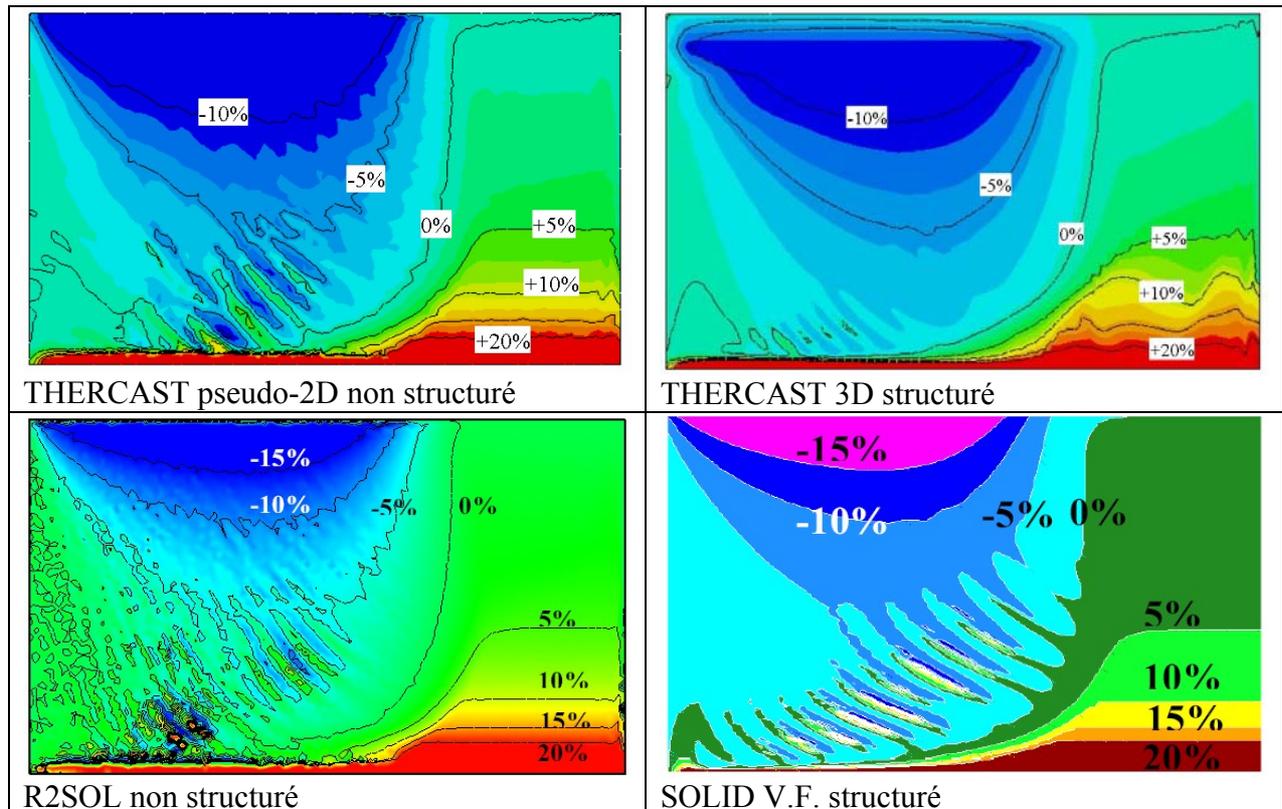


Figure 4-9 : Ecart relatif de concentration massique en plomb à $t=400s$ pour l’alliage Sn-5%Pb pour une simulation avec THERCAST (en haut) sur maillage pseudo-2D (à gauche) et sur un maillage 3D (à droite, coupe dans le plan médian), avec R2SOL (en bas à gauche) et avec SOLID (en bas à droite)

Prédiction des canaux pour un maillage structuré ou non structuré

Des différences sont apparues entre la solution pseudo-2D sur maillage non structuré et la solution sur maillage 3D structuré présentées sur la Figure 4-9. Pour mettre en évidence l’origine de ces différences, nous avons effectué une simulation supplémentaire en pseudo-2D utilisant un maillage structuré proche de celui utilisé en 3D. Ces deux maillages ainsi que les cartes de ségrégation sont présentées sur la Figure 4-10.

Rappelons que les résultats de CALCO-MOS, code éléments finis développé à l’EPFL et utilisant un maillage régulier de quadrangles, n’avait pas permis de prédire ces canaux ségrégués. De plus les résultats de R2SOL sur un maillage structuré présentaient des canaux très faiblement ségrégués [LIU, 2005].

Globalement les courbes de ségrégation sont les mêmes, en particulier on observe la disparition des oscillations sur les lignes d’isovaleurs de concentration dans le coin inférieur droit. Ce type de résultat semble donc être propre à une simulation 3D, nous détaillerons dans la suite l’origine de cette différence. D’autre part, sur nos figures, la ségrégation est plus prononcée dans les canaux pour la simulation en non structuré. Une explication de cette différence pourrait être que l’aspect non structuré du maillage facilite la déstabilisation du

front de solidification en éléments finis. Alors que dans le cas d'un maillage structuré, le front de solidification s'aligne sur le maillage. Les perturbations ont donc plus de difficultés à apparaître. Cela expliquerait aussi la grande régularité des canaux dans la simulation avec SOLID alors que les simulations avec un maillage non structuré présentent des oscillations plus importantes.

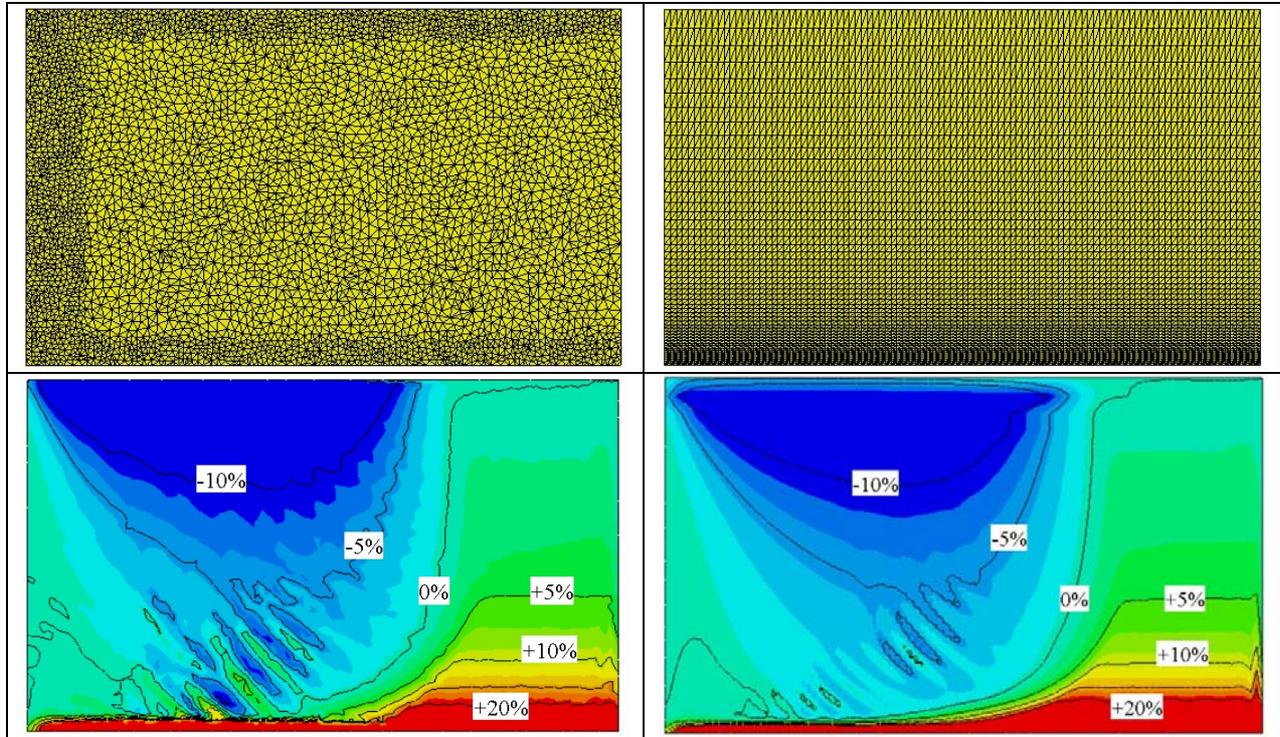


Figure 4-10 : Maillage (en haut) et écarts relatifs de concentration (en bas) pour l'alliage Sn-5%Pb à $t=400s$ pour des simulations pseudo-2D avec THERCAST sur un maillage non structuré (à gauche) et structuré (à droite)

Application du remaillage

L'application du remaillage adaptatif a montré une amélioration des résultats sur le cas test avec l'alliage Pb-48%Sn mais avec un lissage important de la solution. Or le cas de l'alliage Sn-5%Pb est encore plus sensible puisque l'application d'un lissage trop important conduirait à la disparition des ségrégations. La Figure 4-11 montre en effet que les canaux ségrégés n'apparaissent plus. Globalement la solution reste identique mais avec des isovaleurs beaucoup plus régulières. L'effet de lissage que l'on observe a deux origines différentes. La première est la génération du remaillage et du transport des valeurs sur le nouveau maillage qu'elle induit. Rappelons que l'on prend alors la nouvelle valeur par interpolation sur l'ancien maillage. Les valeurs extrêmes sont donc légèrement moyennées avec les valeurs des autres nœuds de l'éléments puisque le nouveau nœud ne va pas forcément être plus du nœud à la valeur extrême. Or les remaillages et donc les transports des valeurs sont fréquents, cela peut donc induire un fort effet de lissage et régulariser la solution. La deuxième du lissage est le changement de taille des éléments. Lorsque l'on grossit le maillage dans la zone solide comme c'est le cas sur la Figure 4-11, on produit une solution plus lisse tout simplement parce que le maillage n'est pas suffisamment fin pour conserver les petites variations. Ainsi en admettant que le calcul ait prédit la formation de canaux, au fur et à mesure que cette zone

de canaux va se solidifier, le maillage va devenir plus grossier et nous risquons de perdre cette information initiale si nos critères de déraffinement du maillage ne sont pas très bien adaptés.

On peut donc conclure de cet exemple que l'implémentation actuelle de la méthode de remaillage adaptatif dans THERCAST n'est pas adéquate pour la prédiction des canaux ségrévés. Pour améliorer la qualité de nos prédictions, il faudrait limiter le remaillage dans les zones sensibles, en particulier lorsque l'on commence à raffiner vers la formation du canal, il ne faut pas qu'ensuite on impose des éléments plus grossiers parce que la fraction liquide diminue. Ainsi les éléments fins obtenus avec la prédiction des canaux ne devraient plus être remaillés jusqu'à la fin de la simulation pour éviter l'effet de lissage.

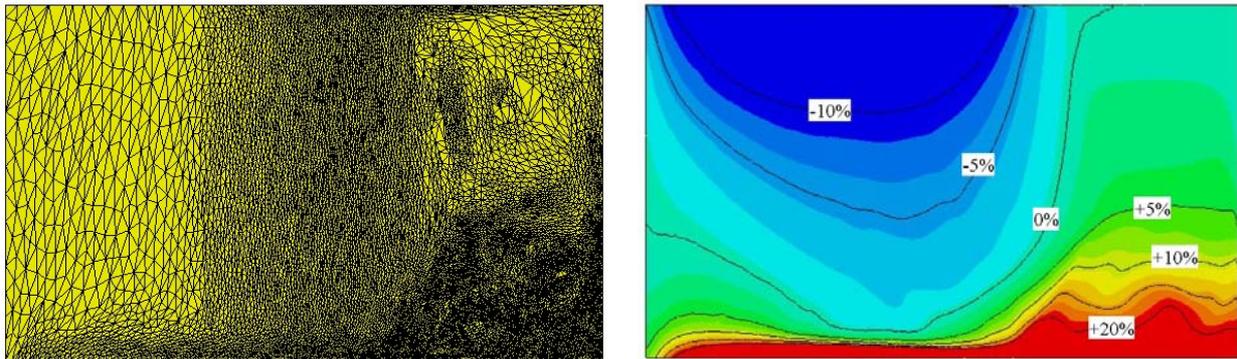


Figure 4-11 : Maillage et écarts relatifs de concentration à $t=400s$ avec remaillage adaptatif en configuration pseudo-2D

Pour conclure sur ce point, on peut citer une nouvelle fois les travaux de Weitao Liu [LIU, 2005] qui a montré une capture plus prononcée des canaux en appliquant un remaillage adaptatif (cf. Figure 4-12). Le remaillage dans R2SOL est légèrement différent de la stratégie de THERCAST et le lissage des résultats est beaucoup moins important. Cet exemple nous montre que des améliorations apportées à notre stratégie de remaillage et un meilleur calibrage des paramètres devraient permettre une meilleure simulation des canaux ségrévés. Mais cet objectif n'étant pas au cœur de notre étude, qui concerne plus la simulation sur des lingots industriels, ce point n'a donc pas été approfondi.

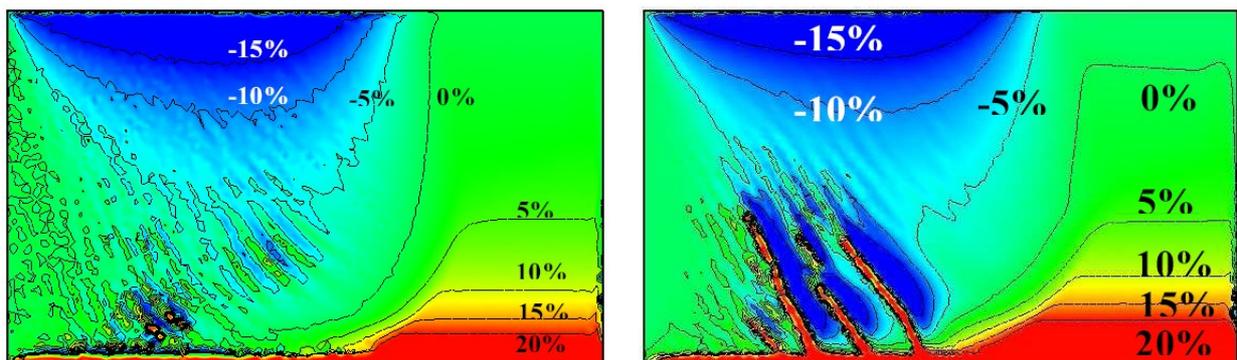


Figure 4-12 : Ecart relatif de concentration à $t=400s$, simulations avec R2SOL sur maillage fixe (à gauche) et avec remaillage adaptatif (à droite) [LIU, 2005]

Etude de l'effet du pas de temps sur la prédiction des canaux

Cette simulation est réalisée sur un maillage très fin, raffiné dans la zone de formation du canal (environ 330 000 éléments). Les résultats sont présentés après 30s de solidification.

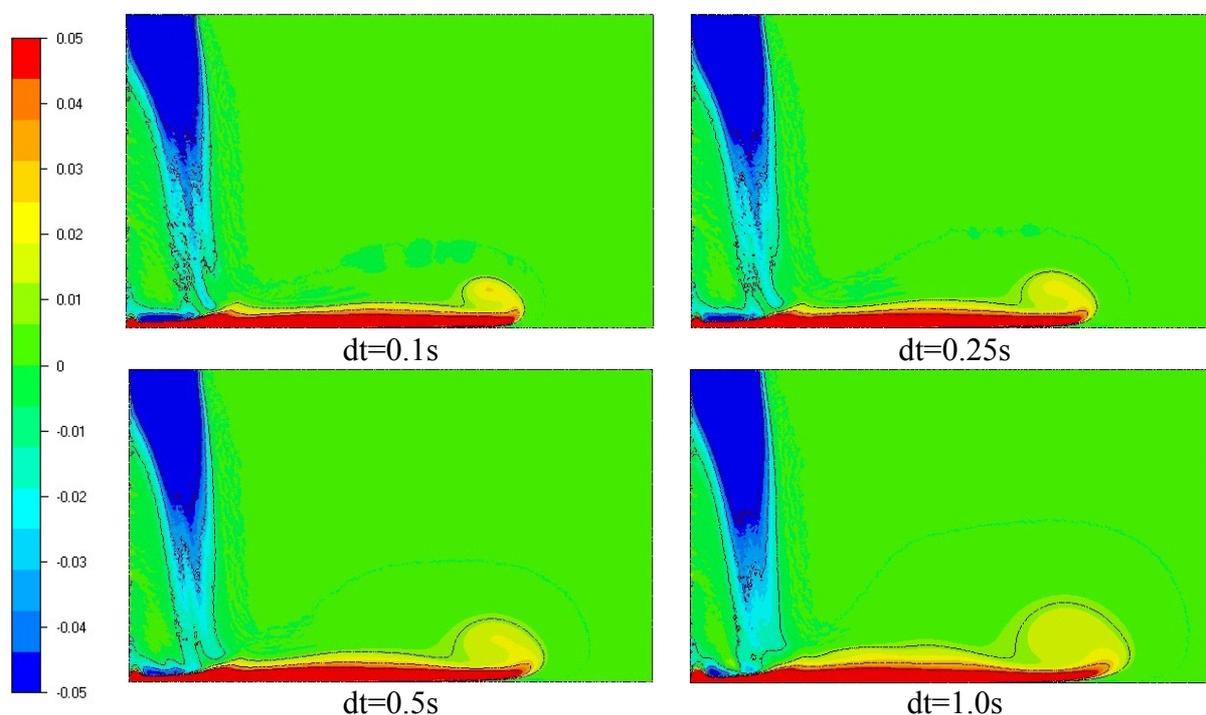


Figure 4-13 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) à $t=30s$ pour différents pas de temps pour l'alliage Sn-5%Pb (modification des échelles pour mettre en valeur la ségrégation)

Les résultats de la Figure 4-13 révèlent deux conséquences intéressantes de la sensibilité au pas de temps. La première est un lissage progressif du canal ségrégé qui commence à apparaître dans le coin gauche. La branche de concentration plus faible s'épaissit avec l'augmentation du pas de temps pour ne plus laisser apparaître d'interstices. Alors le déplacement du front de solidification empêche le développement des instabilités qui n'ont pas suffisamment d'incrément de calcul pour converger vers une solution de type canal ségrégé. En effet le passage d'une solution régulière à une solution singulière nécessite une modification de l'écoulement qui accentue progressivement la déformation des iso lignes de fraction liquide par l'accumulation locale de soluté ce qui modifie donc la perméabilité et en retour l'écoulement. Ce phénomène auto-entretenu nécessite du « temps numérique » pour se mettre en place ce qui n'est pas possible lorsque le pas de temps est trop grand.

Le deuxième point notable est la forme de la vague de liquide enrichi qui se propage dans la cavité. La forme de celle-ci est différente suivant le pas de temps. La largeur de la zone enrichie en pointe est beaucoup plus large lorsque le pas de temps est grand. Ce cas illustre bien le couplage fort qui existe entre la mécanique et le transport du soluté. Etant donné que notre résolution n'effectue pas des itérations entre la résolution mécanique, la résolution thermique et la résolution solutale jusqu'à obtenir convergence, la solution que nous obtenons à chaque incrément n'est pas complètement convergée au sens où le couplage est traité de manière faible. Cette approche est tout à fait valide lorsque les variables changent peu d'un incrément à l'autre. Mais dès que les solutions évoluent rapidement, il apparaît un biais dans les résultats, c'est ce que l'on observe ici. Dans notre cas la valeur du champ de vitesse utilisée pour calculer le transport de soluté ne correspond pas vraiment aux forces

motrices qui seraient en adéquation avec les gradients de masse volumique induits par l'hypothèse de Boussinesq : il possède un incrément de décalage.

Etude de l'aspect 3D de la cavité

L'intérêt de THERCAST réside dans la possibilité d'effectuer des simulations en prenant en compte la pièce complète dans sa composante 3D. La réduction d'un problème à un calcul 2D n'est pas toujours possible et parfois la simulation 2D contraint trop l'écoulement qui sinon évoluerait différemment. Nous allons essayer de mettre en valeur ces aspects en analysant la simulation 3D effectuée sur un maillage structuré (cf. Figure 4-14) ne représentant que la moitié de la cavité. Sur cette figure, la face en arrière est le plan médian de la cavité qui est représenté par un plan de symétrie. Le plan en avant est la paroi du moule pour laquelle nous imposons une vitesse et un flux de chaleur nul. Le maillage a été raffiné près de la paroi inférieure pour capturer correctement l'apparition du canal liquide mais aussi à proximité de la paroi verticale pour mettre en évidence les effets de bord.

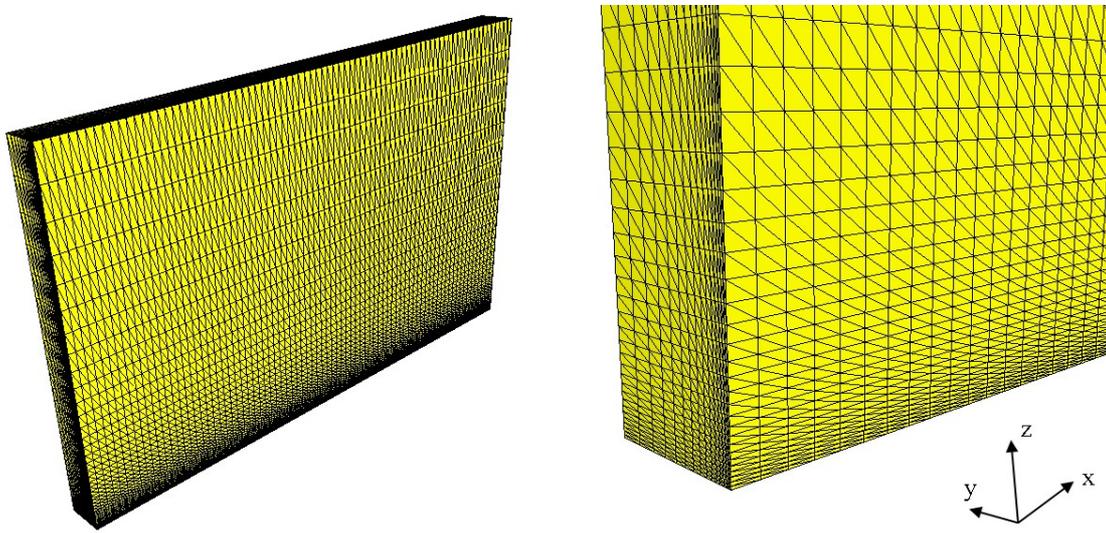


Figure 4-14 : Maillage 81x16x41 raffiné en bas de la cavité et au contact de la paroi arrière

Notre première analyse sur ce cas test va reprendre les résultats concernant la propagation de la vague de soluté en début de solidification. La Figure 4-15 montre une évolution très similaire à celle que l'on a pu observer dans la simulation pseudo-2D. De plus lorsque l'on regarde sur la Figure 4-16 les résultats dans une section horizontale traversant cette zone enrichie, on note une grande régularité de la solution dans l'épaisseur du lingot. On note seulement une légère courbure à la pointe du front enrichi qui correspond au ralentissement imposé par la présence de la paroi mais la diffusion suffit à égaliser ensuite cet écart.

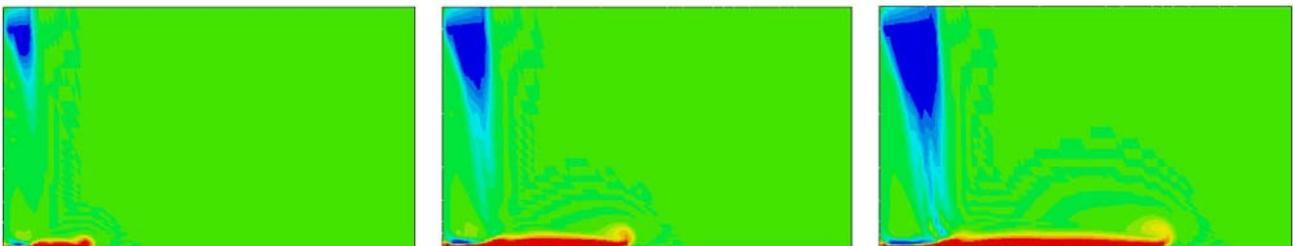


Figure 4-15 : Ecart de concentration dans le plan médian à $t=10s$, $t=20s$ et $t=30s$ (échelle modifiée $\min=-0.05$ $\max=0.05$) pour l'alliage Sn-5%Pb

Ainsi une solution 2D est valable dans l'épaisseur de la pièce. Pour le transport de soluté il semble que la présence de la paroi ne perturbe pas et ne modifie pas la solution. Cela signifie donc aussi que le champ de vitesse est quasiment uniforme dans l'épaisseur du lingot. La couche limite dynamique est donc très faible au début de la solidification.

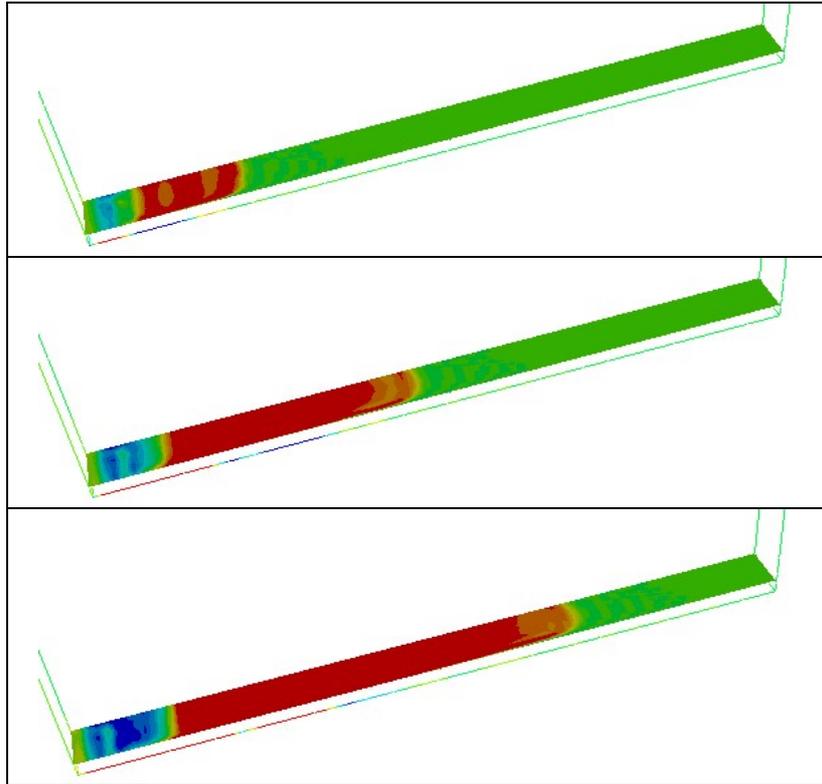


Figure 4-16 : Ecart de concentration dans la section horizontale à $z=0.002m$ à $t=10s$ (en haut), $t=20s$ (au milieu) et $t=30s$ (en bas), échelle modifiée $\min=-0.05$ $\max=0.05$ pour l'alliage Sn-5%Pb

On peut vérifier cette affirmation après un temps de solidification plus long alors que la vitesse est plus importante en se situant dans le haut de la cavité. La Figure 4-17 nous révèle que l'écoulement est très uniforme, la couche limite n'est quasiment pas visible. Ce résultat supplémentaire nous amène à la conclusion que la paroi n'induit pas d'effet notable aussi bien au niveau de la ségrégation qu'au niveau de l'écoulement car l'épaisseur affectée est très inférieure à l'épaisseur de la cavité.

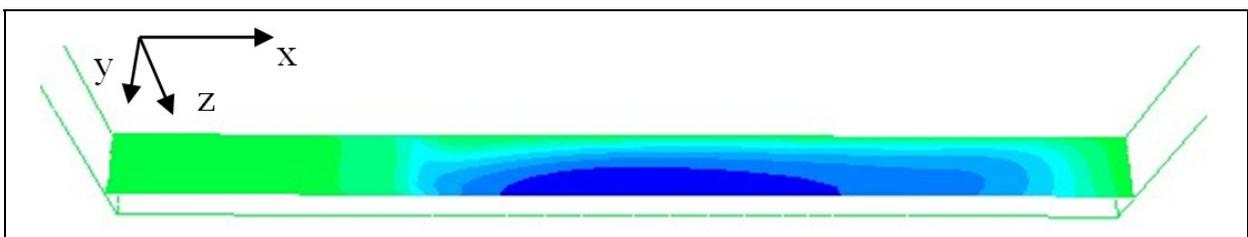


Figure 4-17 : Vitesse horizontale dans la section horizontale à $z=0.055\text{m}$ et à $t=100\text{s}$ (vue de dessous, plan médian de symétrie au premier plan) pour l'alliage Sn-5%Pb

Mais cela ne veut pas dire que la simulation 3D du lingot n'induit pas des différences dans l'écoulement, simplement ces différences ne proviendront pas de l'imposition d'une condition aux limites collante sur la paroi. Car des différences apparaissent au cours de la solidification. La Figure 4-18 illustre ainsi la formation d'un écoulement qui n'est plus plan mais pas complètement transversal non plus car l'épaisseur de la cavité n'est pas suffisante. Ce type de configuration ne peut pas être prédit autrement que par une simulation 3D : en contraignant dans une simulation 2D l'écoulement à être plan, on perd un peu en « réalisme ». Mais il est maintenant nécessaire d'essayer d'identifier si cette modification a un effet important ou non. Pour cela nous allons observer dans un premier temps la formation du canal liquide en début de solidification et ensuite la macroségrégation à 400s.

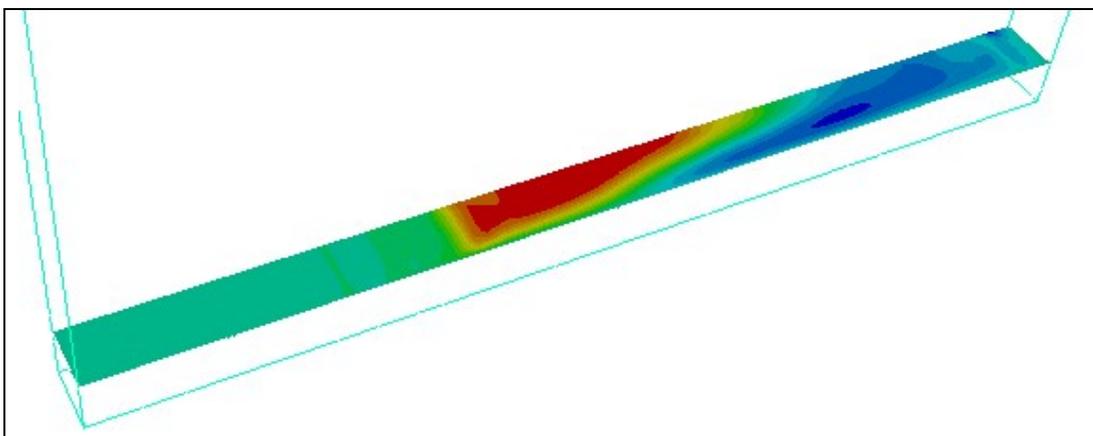


Figure 4-18 : Vitesse horizontale dans la section horizontale à $z=0.005\text{m}$ à $t=100\text{s}$ pour l'alliage Sn-5%Pb

La comparaison des courbes de fraction liquide dans le plan médian et dans le plan de la paroi sur la Figure 4-19 montre que les solutions sont très similaires. Un petit écart apparaît tout de même vers le canal liquide avec une légère déformation du front, prémisses à la formation d'un canal ségrégué, qui n'est pas présent sur la paroi puisque dans cette zone les vitesses sont bien moindres et donc la conduction domine.

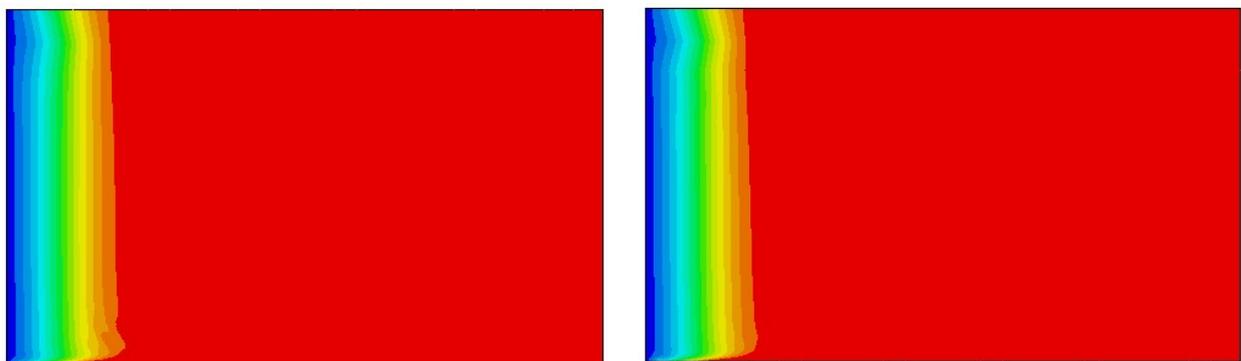


Figure 4-19 : Fraction liquide à $t=50\text{s}$ vision dans le plan de symétrie centrale (à gauche) et contre la paroi (à droite) pour l'alliage Sn-5%Pb

L'observation de ce front de solidification à trois hauteurs différentes mais à proximité du canal liquide (cf. Figure 4-20) montre que les isolignes de fraction liquide sont quasiment perpendiculaires à la paroi. On peut voir aussi nettement l'amincissement progressif de la zone pâteuse à mesure que l'on se rapproche du canal liquide. Cette évolution régulière de la fraction liquide démontre une fois de plus que sur cet aspect la prise en compte de la paroi n'est pas importante et ne modifiera donc pas les résultats.

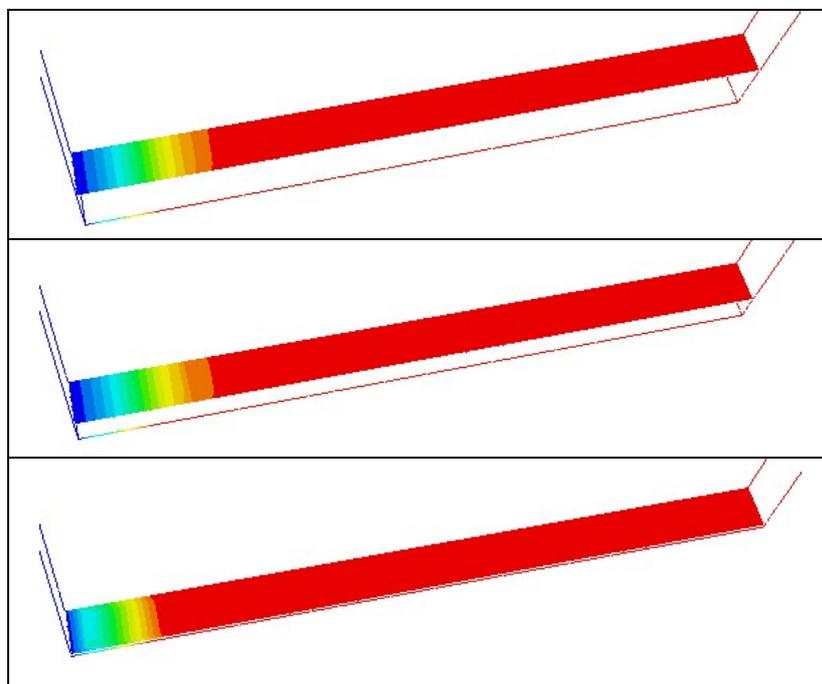


Figure 4-20 : Fraction liquide dans trois sections horizontales à $z=0.01\text{m}$ (en haut), $z=0.005\text{m}$ (au milieu) et $z=0.001\text{m}$ (en bas) à $t=50\text{s}$ pour l'alliage Sn-5%Pb

L'analyse de la solidification après un temps de solidification bien plus long, après 400s, va nous permettre de voir l'effet sur le long terme de ces perturbations 3D de l'écoulement. Les courbes de fraction liquide et de macroségrégation sont affichées sur la Figure 4-21. Elles nous révèlent que la solidification n'est pas différente dans le plan médian et dans le plan de la paroi.

Par contre les courbes de macroségrégations sont affectées en particulier dans la partie encore liquide dans le coin inférieur droit. Partout ailleurs les concentrations sont quasiment identiques. Mais, dans la zone où l'écoulement est encore important, les courbes de concentration sont déformées dans le plan médian. Par contre, dans le plan de la paroi, les courbes sont stratifiées verticalement. Ce résultat rappelle d'ailleurs fortement les résultats obtenus avec THERCAST pseudo-2D, R2SOL et SOLID (cf. Figure 4-9). Or dans la zone proche de la paroi l'écoulement est plus fortement contraint par la présence de la couche limite. On peut donc conclure que cette zone est logiquement plus proche des simulations 2D qui ne permettent pas une évolution aussi chaotique de l'écoulement que la simulation 3D de la cavité. Cette explication mériterait d'être confirmée par de plus amples comparaisons mais elle semble bien correspondre à ce que nous observons d'autant qu'une simulation pseudo-2D fournit la même tendance que les simulations 2D.

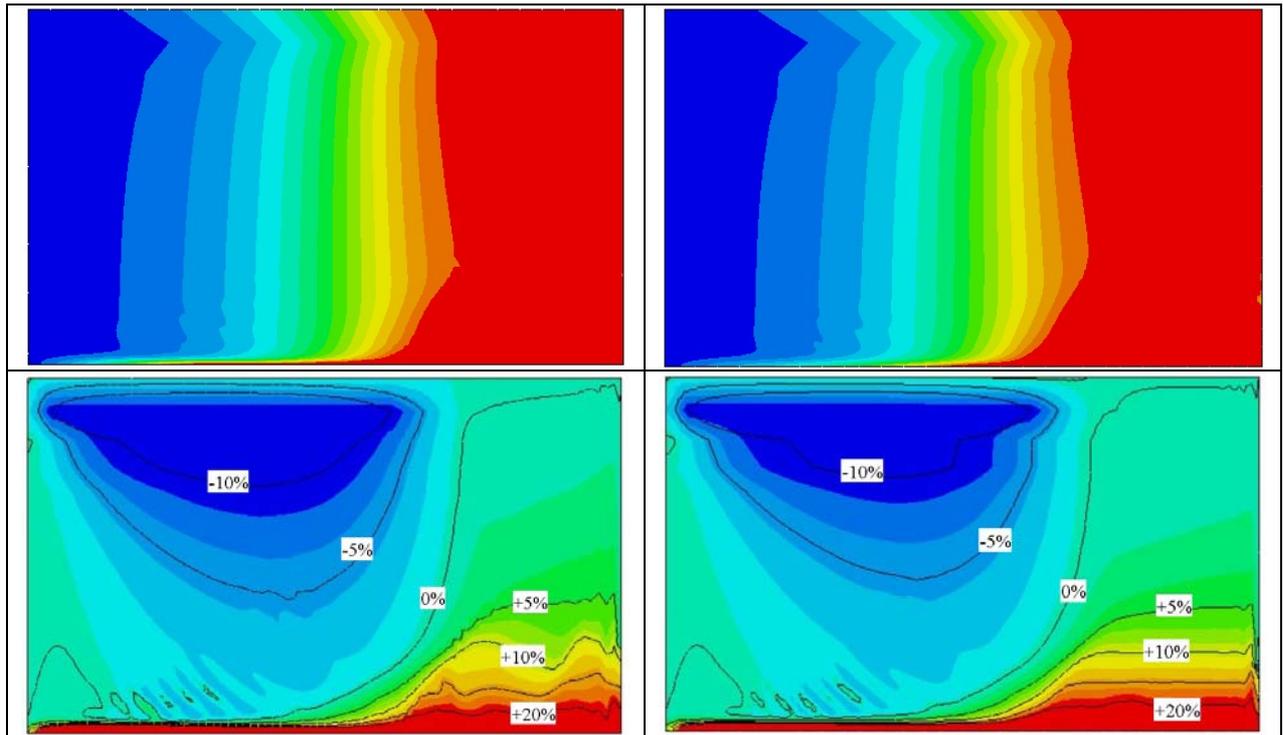


Figure 4-21 : Fraction liquide (en haut) et écart relatif de concentration (en bas) à $t=400s$ sur le plan médian de symétrie (à gauche) et sur la paroi (à droite) pour l'alliage Sn-5%Pb

La concentration dans les canaux, après leur solidification est aussi très régulière dans l'épaisseur comme le montre la Figure 4-22. La régularité de l'écoulement étant sans doute encore assurée lors de leur formation, les canaux ne paraissent pas affectés par un aspect 3D et se propagent dans toute l'épaisseur sans déviation. Deux hypothèses peuvent expliquer cela, la première est que l'apparition d'une légère composante 3D dans l'écoulement est le fruit d'une déstabilisation qui n'apparaît pas immédiatement ce qui ne perturbe pas la solidification de cette zone. La seconde hypothèse est que l'écoulement dans la zone pâteuse ne peut pas présenter de telles variabilités dans l'écoulement à cause de la présence du terme de Darcy qui limite fortement la modification de la vitesse et contraint donc l'écoulement. Actuellement nous ne sommes pas capables de savoir si une de ces deux hypothèses est la bonne ou si un autre phénomène entre en jeu.

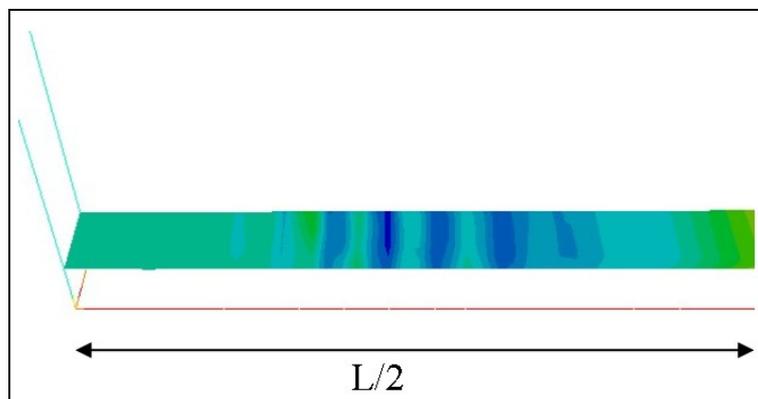


Figure 4-22 : Canaux ségrévés dans la section horizontale à $z=0.005\text{m}$ et à $t=400\text{s}$ pour l'alliage Sn-5%Pb

4.2. Application de l'approche pseudo-2D sur un lingot Fe-0.38%C

4.2.1. Présentation du lingot plan

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot, d'un réfractaire et d'un moule plans (Figure 4-36). Ce cas test aura donc l'avantage de présenter une configuration 2D qui permettra de réduire grandement le nombre d'éléments nécessaires. Elle peut être également vue comme étant représentative d'une section médiane d'un lingot méplat, de plus grande dimension selon la normale au plan de la figure. L'utilisation de l'approche pseudo-2D sera employée ici. Le lingot est refroidi uniquement par le moule et le réfractaire, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule et le réfractaire sont en contact avec l'air extérieur et sont refroidis par convection naturelle uniformément. Le lingot, le réfractaire et le moule sont initialement à des températures uniformes de respectivement 1515°C pour le lingot et 250°C pour le moule et le réfractaire. Les caractéristiques du lingot, du moule et du réfractaire sont présentées dans le Tableau 4-2, le

Tableau 4-3 et le Tableau 4-4. Au cours de cette simulation, le remaillage adaptatif a été utilisé en appliquant un nombre d'éléments objectif de 80 000, cette même valeur sera aussi utilisée pour la simulation avec le lingot seul.

Le rapport de forme est de 4 et le nombre de Rayleigh pour ce cas test est de :

$$Ra = \frac{\rho_0^2 g \beta_T \Delta T \cdot H^3 \cdot c_p}{\mu \kappa} = \frac{7060^2 \times 9.8 \times 8.85 \times 10^{-5} \times 7.4 \times 2^3 \times 500}{4.2 \times 10^{-3} \times 30} \cong 10^{10}$$

en prenant la température de liquidus, à partir de la concentration initiale, pour calculer l'écart de température, soit : $\Delta T = T_0 - T_{\text{liq}} = 7.4^\circ\text{C}$ avec $T_{\text{liq}} = 1507.6^\circ\text{C}$.

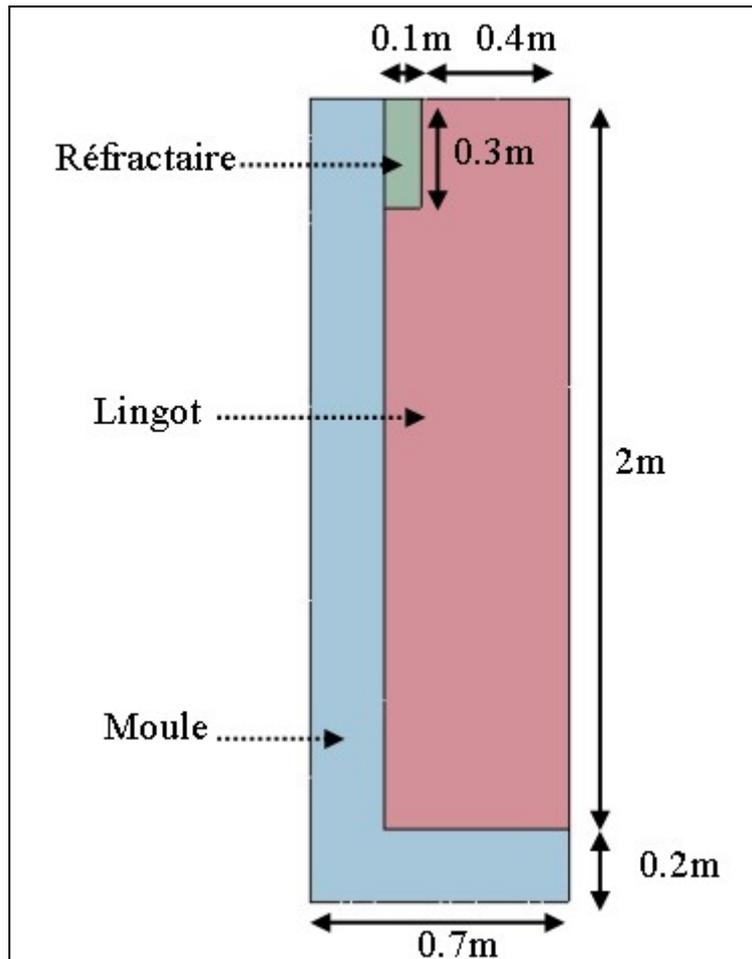


Figure 4-23 : Schéma du lingot et du moule et maillage initial

Tableau 4-2 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 500 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du fer pur T_{ls} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1515 °C |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |
| Transfert thermique avec le moule | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Transfert thermique avec le réfractaire | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 4-3 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Tableau 4-4 : Caractéristiques matériau du réfractaire et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|---|
| Masse volumique ρ | 1300 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 0.7 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 1050 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Ce cas test est l'extension naturelle des tests effectués sur les petites cavités. Il va permettre de valider l'application du remaillage sur un lingot de grande dimension tout en conservant un nombre d'éléments assez faible. En particulier l'anisotropie, peu présente sur la petite cavité, devient prépondérante pour ce lingot très étiré. Par contre le choix d'un lingot plan aussi massif induit un temps de solidification très long. Nous n'avons donc pas mené les calculs jusqu'à la solidification complète du lingot. Mais nous avons essayé de poursuivre la solidification suffisamment longtemps pour voir l'apparition de différents phénomènes et des changements dans les types d'écoulements ou dans la macroségrégation. Cette simulation nous permettra donc de valider le fonctionnement de notre stratégie de remaillage en montrant qu'elle est applicable à des lingots de grande taille et que l'imposition d'un maillage anisotrope ne perturbe pas la résolution tout en diminuant le nombre d'éléments. Nous illustrerons aussi sur cet exemple la bonne adaptation du maillage.

4.2.2. Etude de l'écoulement

L'écoulement dans le lingot simplifié suit une évolution assez complexe en début de solidification. Le régime de l'écoulement passant de la formation d'une couche limite dynamique verticale à proximité du front de solidification à des zones de recirculation occupant l'ensemble de la cavité. Cette évolution et la description des caractéristiques particulières de l'écoulement sont décrites plus précisément dans l'Annexe D mais nous allons quand même résumer les points principaux.

Une des caractéristiques importantes de l'écoulement est la formation précoce de vortex secondaires dans les zones de recirculation de l'écoulement principal. La Figure 4-24 montre les trois vortex qui apparaissent en début de solidification. Le premier vortex, situé en dessous du réfractaire, est de faible dimension et disparaît assez rapidement. En effet lors de la solidification, la zone pâteuse va croître beaucoup plus rapidement dans la zone de contact avec le moule contrairement au réfractaire qui va limiter le refroidissement. Ainsi l'épaississement progressif de la zone pâteuse en dessous du réfractaire va réduire la marche qui dévie l'écoulement et donc finalement imposer la disparition de ce vortex dû seulement à la géométrie. Le second et le troisième vortex sont situés en pied de lingot lorsque le fluide qui descend le long du front de solidification est dévié par la proximité de la zone solidifiée du pied de lingot. Ces vortex jouent un rôle très important dans la formation de la macroségrégation de début de solidification car l'écoulement entraîne du soluté rejeté tout le long du front de solidification et selon les cas, soit le vortex va emmagasiner du soluté et

empêcher sa redistribution dans le bain liquide ou au contraire la favoriser. Cela conduit à la création de zones de ségrégation négatives et positives comme nous le verrons par la suite. Ces deux vortex sont assez stables mais bougent légèrement en fonction de variations dans l'écoulement principal. On peut aussi noter que le deuxième vortex n'apparaît plus à 246s. A cet instant, l'écoulement et le front de solidification se sont déformés et l'angle de déviation du front de solidification est devenu plus faible ce qui limite la formation de vortex.

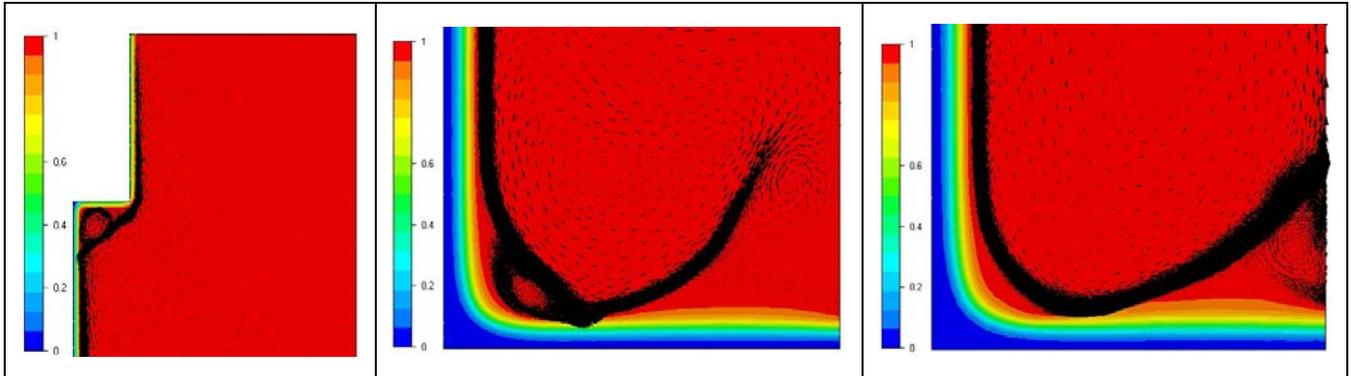


Figure 4-24 : Vortex à proximité du réfractaire et en pied de lingot vers la paroi, vecteur vitesse et fraction liquide (t=26s, t=196s et t=246s)

Au cours de l'étude de ce cas simplifié, nous avons aussi testé une simulation ne prenant en compte que le lingot en imposant, au lieu du contact avec le moule et le réfractaire, une condition de transfert de chaleur convectif et une paroi adiabatique respectivement. Il paraît en effet pertinent de déterminer l'effet des moules et aussi l'effet que des variations de conditions aux limites peuvent induire sur la solution. La comparaison est plus poussée dans l'Annexe D, mais pour résumer les écarts ne sont pas importants en début de solidification comme le révèlent les vitesses verticales de la Figure 4-25. Les vitesses sont globalement du même ordre de grandeur. Le seul écart particulièrement notable est l'écoulement dans la masselotte. L'imposition d'une condition d'adiabaticité limite la formation d'un écoulement en haut du lingot alors que le faible refroidissement induit par le contact avec le réfractaire l'autorise (cf. Figure 4-26). Les résultats de telles simulations sont très intéressants du point de vue industriel pour connaître l'effet du masselottage, qui constitue un des points à optimiser dans le process, sur l'écoulement et aussi la ségrégation.

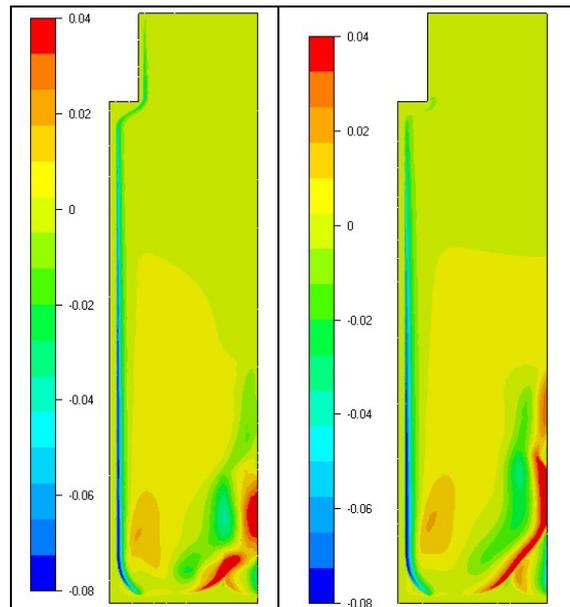


Figure 4-25 : Vitesse verticale (en m/s) à $t=80s$ pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire (à gauche) et lingot seul (à droite)

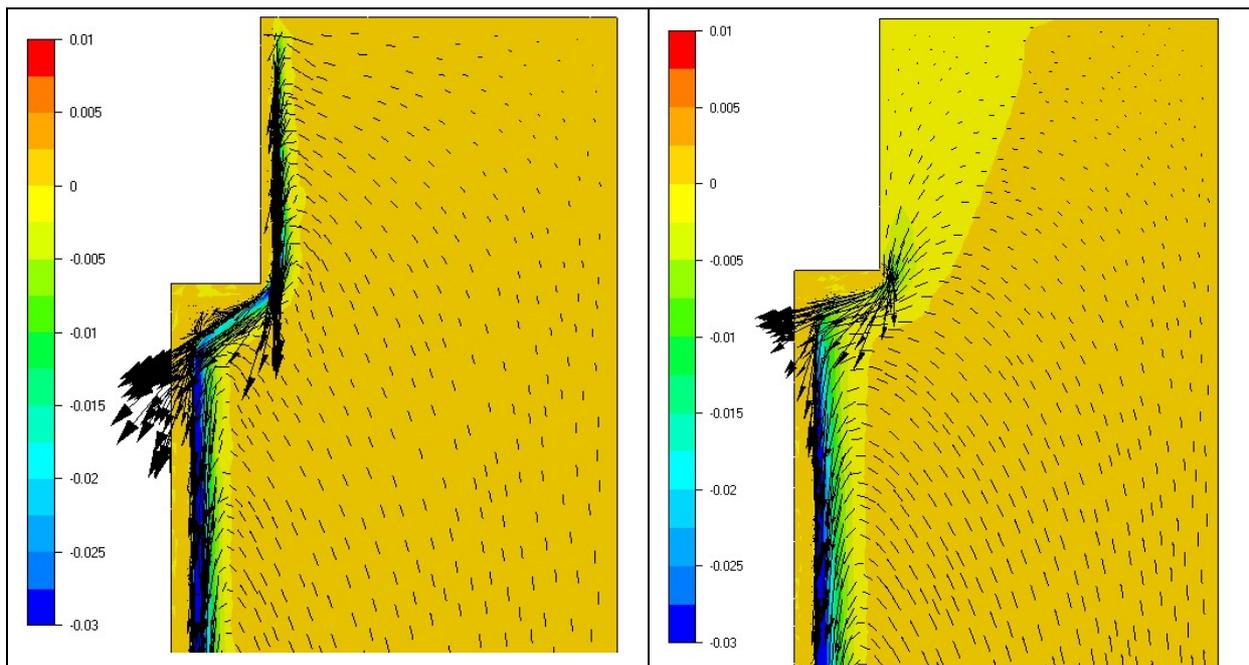


Figure 4-26 : Zoom sur le haut du lingot, vecteur vitesse et vitesse verticale (en m/s) à $t=80s$ pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire (à gauche) et lingot seul (à droite)

La suite de la solidification de ce lingot est très régulière lorsque l'on visualise la fraction liquide (cf. Figure 4-27) on note l'avance du front de solidification avec l'adoucissement de l'angle en pied de lingot et la formation d'une zone pâteuse assez large dans la masselotte. L'évolution du champ de vitesse est par contre beaucoup plus complexe (cf. Figure 4-28). Ainsi, jusqu'à 1000s on conserve un écoulement principalement de couche limite qui génère une recirculation globale. Mais ensuite la vitesse verticale se concentre sur le centre du lingot, qui est un plan de symétrie, et une seconde zone de recirculation apparaît

en haut du lingot. L'écoulement devient aussi très perturbé en pied de lingot. On observe une oscillation de la couche limite dynamique.

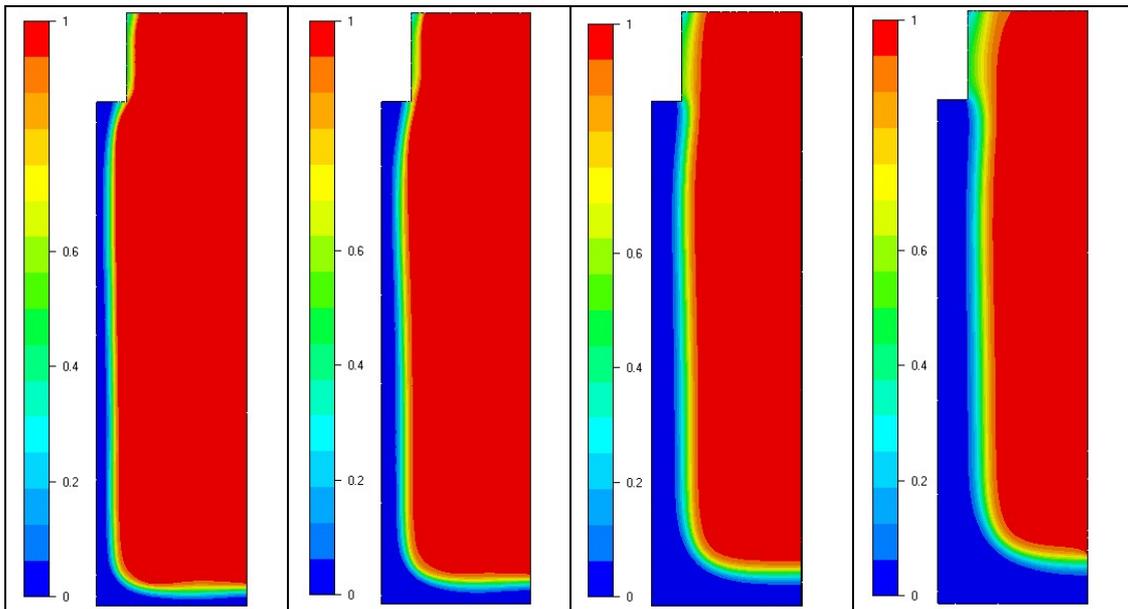


Figure 4-27 : Fraction liquide à t=600s, 1000s, 2000s et 3000s pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire

Ces modifications de l'écoulement deviennent prépondérantes à 3000s. A cet instant la couche limite dynamique présente à proximité du front de solidification a disparu et il ne reste qu'un écoulement sur le centre du lingot et dans la masselotte. Toutefois si les vitesses sur le centre sont beaucoup plus élevées que partout ailleurs, il existe pourtant un écoulement dans le reste du lingot. En fait à proximité du front de solidification l'écoulement s'est inversé et est maintenant contrôlé par le soluté. L'enrichissement du liquide vers le front de solidification induit alors des vitesses vers le haut puisque l'ajout de carbone allège l'alliage. La prédominance de ce terme moteur a conduit déjà à 2000s à écarter du front de solidification l'écoulement descendant initialement, dû à la formation de la couche limite.

Le type d'écoulement très particulier présent à 3000s a une influence très importante sur la macroségrégation et est la cause d'une concentration positive de soluté en pied de lingot. Cet exemple nous montre combien la structure de l'écoulement peut évoluer fortement au cours de la solidification d'un alliage binaire.

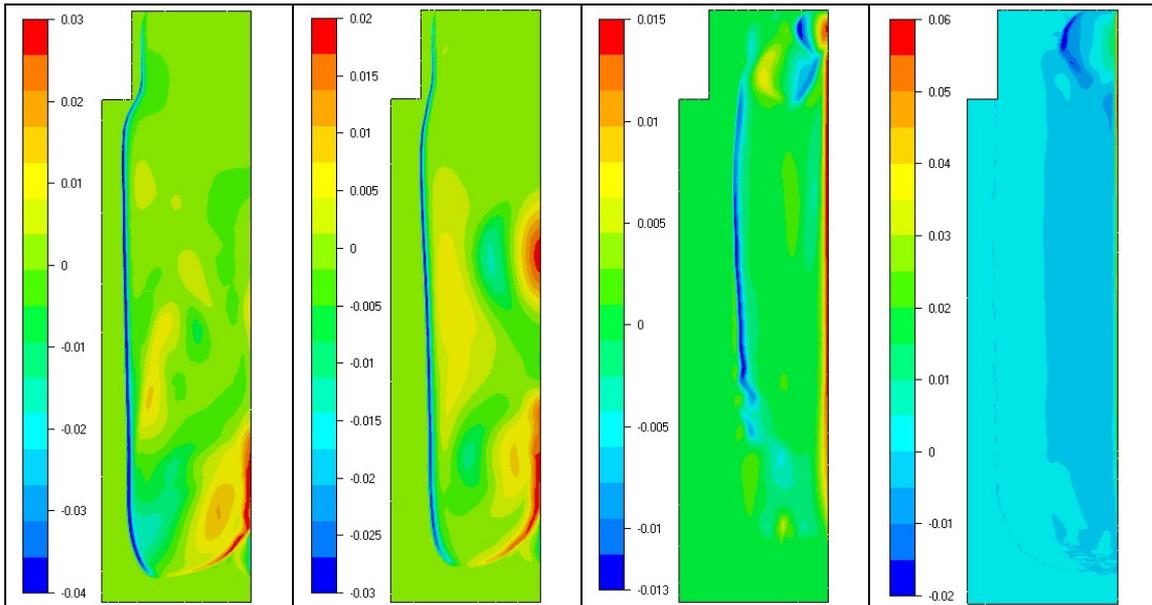


Figure 4-28 : Vitesse verticale (en m/s) à t=600s, 1000s, 2000s et 3000s pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire

4.2.3. Etude de la macroségrégation

Pour démarrer l'analyse de la macroségrégation sur ce cas simplifié, nous comparerons la ségrégation obtenue après 2000s de refroidissement pour la simulation avec le lingot avec moule et réfractaire et pour la simulation avec le lingot seul. La Figure 4-29 montre déjà que la position du front de solidification n'est pas la même, les conditions aux limites différentes induisent une extraction de chaleur plus importante. Mais globalement l'allure de la ségrégation est assez similaire. On note la présence de deux zones de ségrégation négative en pied de lingot, la présence d'une concentration positive à proximité du coin du réfractaire et une concentration positive dans la masselotte. Toutefois les ségrégations positives sont plus importantes pour le lingot seul. L'absence de recirculation importante dans la masselotte conduit à une accumulation de soluté dans cette zone. On aperçoit d'autre part une très légère tache jaune, correspondant à une ségrégation positive en pied de lingot pour la simulation avec le moule et le réfractaire. Un premier changement d'échelle révèle en effet un petit jet de soluté. Lorsque l'on diminue beaucoup les valeurs maximales et minimales pour discerner les zones de ségrégation positive et négative, on aperçoit alors nettement ce rejet de soluté dans le liquide (cf. Figure 4-30). Un canal s'est formé dans le front de solidification et rejette du soluté sous la forme d'un champignon rouge. Un autre petit canal s'est formé à sa droite mais s'est semble-t-il obstrué et ne provoque pas de concentration importante de soluté. Il se peut que ces canaux, qui se forment sporadiquement à cause de l'instabilité du front de solidification dans cette zone, soient à l'origine de la déstabilisation de l'écoulement en pied de lingot et qu'un canal qui se formerait au centre, sur le plan de symétrie soit suffisamment stable pour induire ensuite une accumulation locale de soluté et une vitesse verticale importante sur cet axe.

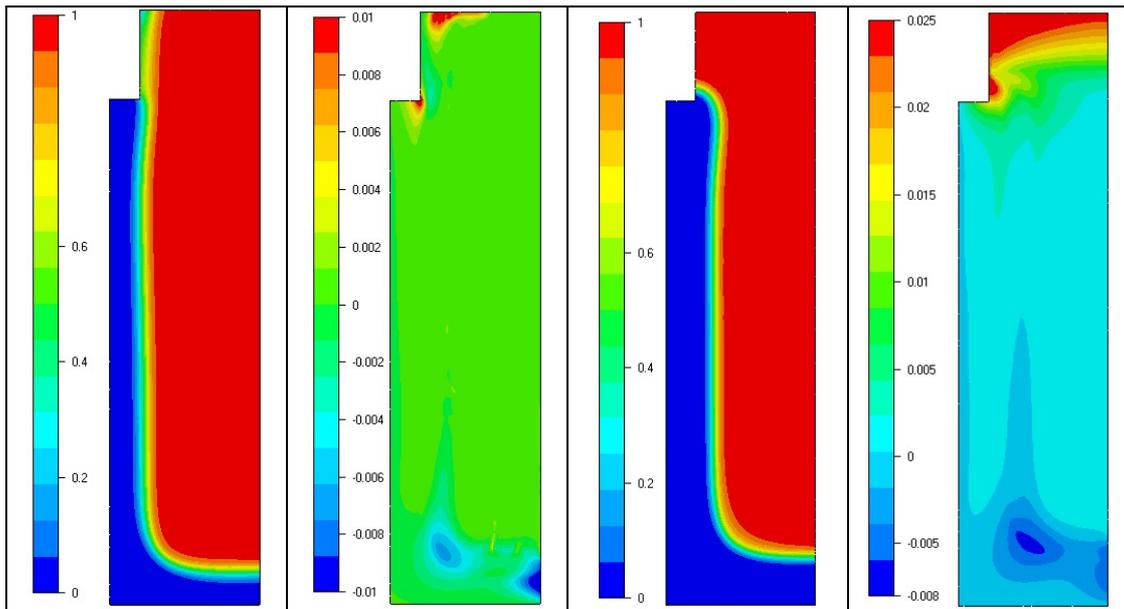


Figure 4-29 : Fraction liquide et écart de concentration moyenne (en wt%) à $t=2000s$ (simulation lingot simplifié avec moule et réfractaire à gauche et lingot seul à droite)

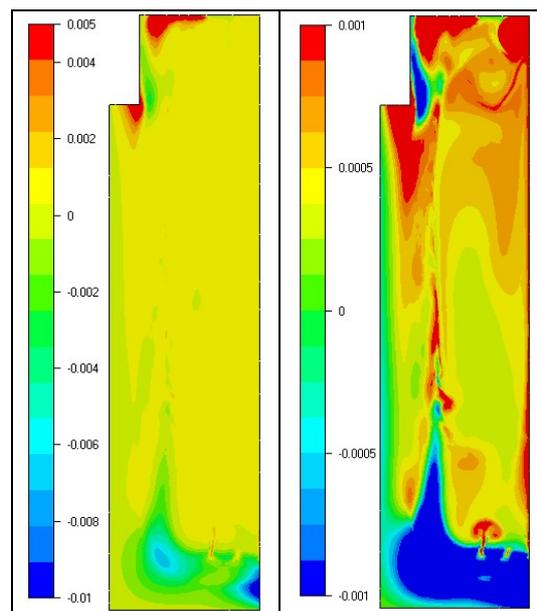


Figure 4-30 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) à $t=2000s$ pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire (changement d'échelle sur la figure de droite)

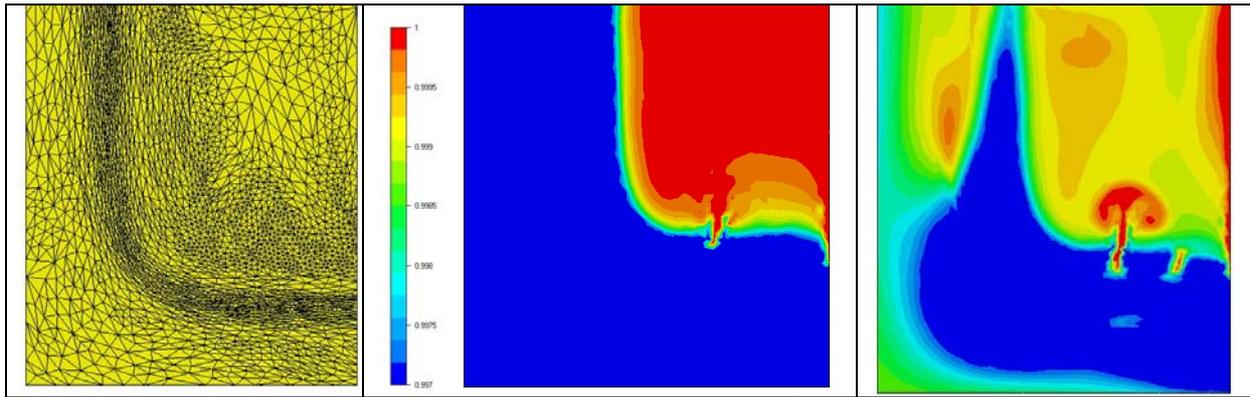


Figure 4-31 : Maillage, fraction liquide et écart de concentration moyenne à $t=2000s$ pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire (zoom en pied de lingot)

Cette différence entre les deux répartitions de ségrégation s'accroît encore lorsque l'on atteint 3000s de refroidissement (cf. Figure 4-32). La simulation sur le lingot seul poursuit une évolution simple avec accumulation de soluté dans la masselotte et appauvrissement du pied du lingot alors que la simulation avec le moule et le réfractaire voit l'apparition d'une ségrégation positive en pied de lingot et l'accélération de la vitesse verticale positive au centre. Au passage, on voit nettement sur le champ de vitesse du lingot seul la présence d'un écoulement inversé par la prédominance de l'effet solutal : la vitesse verticale est devenue positive vers le front de solidification et négative au centre.

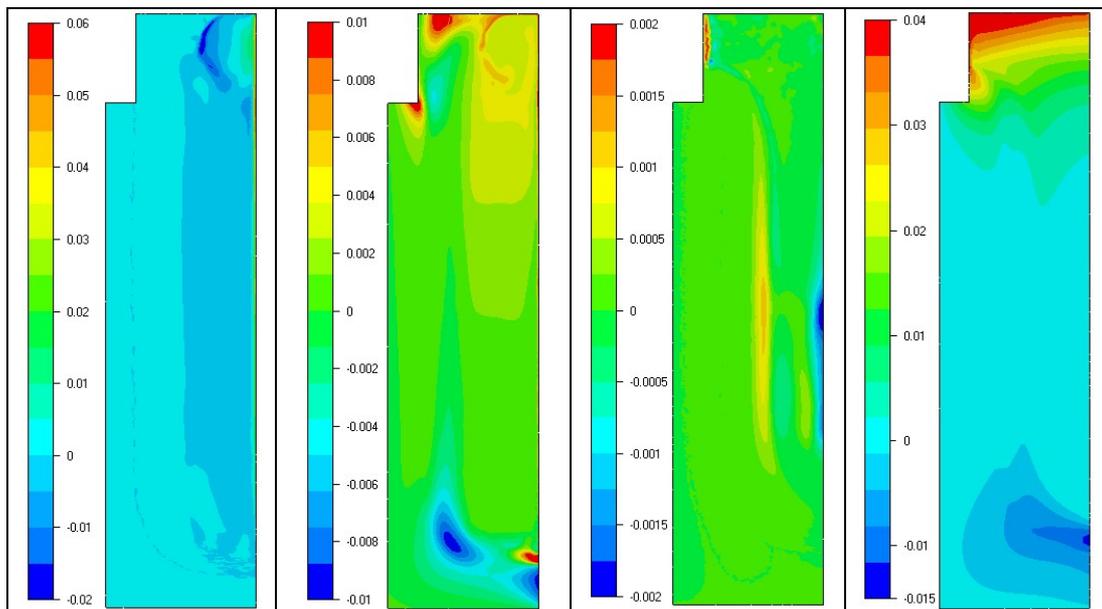


Figure 4-32 : Vitesse verticale (en m/s) et écart de concentration moyenne (en wt%) à $t=3000s$ pour le lingot simplifié avec moule et réfractaire (à gauche) et le lingot seul (à droite)

Ce changement de structure de l'écoulement est particulièrement mis en évidence sur les images de la Figure 4-33 correspondant à la simulation sur le lingot seul. Une vitesse verticale positive assez faible commence à apparaître à 800s et se développe progressivement en écartant l'écoulement principal du front de solidification. A 1250s, l'écoulement est complètement perturbé et l'écoulement de type couche limite qui s'était formé depuis le début

de la solidification est définitivement brisé. Ensuite on observe une nouvelle stabilisation de l'écoulement sur un mode différent avec un ralentissement très prononcé des vitesses et la présence de plusieurs vortex majeurs.

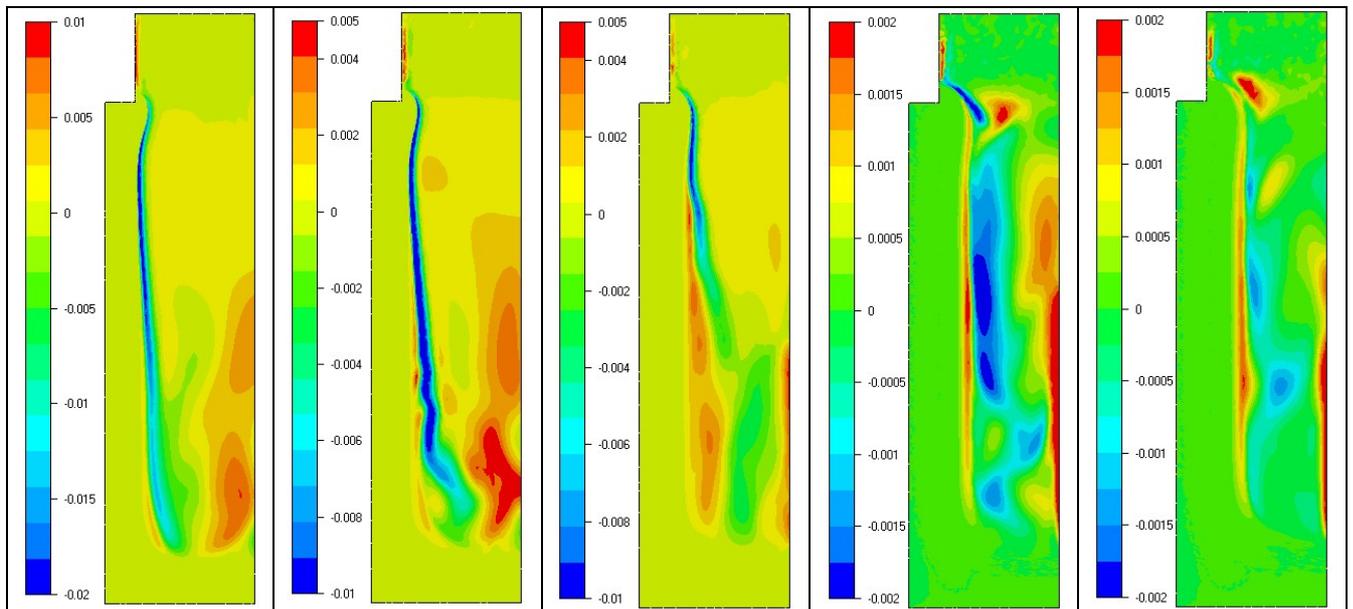


Figure 4-33 : Vitesse verticale (en m/s) à $t=800s$, $1000s$, $1250s$, $1500s$ et $1750s$ pour le lingot seul

Après cette mise en évidence des changements de l'écoulement, il convient de revenir sur la macroségrégation. Une des caractéristiques de la ségrégation pour la simulation avec le moule et le réfractaire est l'importance très grande acquise par l'axe central. Ainsi les données recueillies sur cet axe devraient être particulièrement significatives des différences entre les deux simulations. Nous avons ainsi tracé les courbes d'évolution de la ségrégation le long de l'axe à $t=2000s$ et $t=3000s$ sur la Figure 4-34. Les différences sont très importantes, l'accumulation de soluté sur l'axe est assez faible pour la simulation avec le lingot seul pour lequel on note seulement la présence de la zone négative en pied de lingot et l'accumulation dans la masselotte. Ainsi la courbe sur l'axe est représentative de la ségrégation globale dans le domaine. Par contre, les résultats pour la simulation avec moule et réfractaire révèle une accumulation de soluté sur quasiment toute la hauteur du lingot avec un pic de ségrégation positive en pied, après toutefois la zone de ségrégation négative provenant du début de solidification. Avant de commenter plus loin ces résultats, il est à noter que les oscillations rapides sur la courbe de ségrégation ne sont que des artefacts de post-processing dus à une taille d'élément très faible dans cette zone, ce qui induit une trajectoire tortueuse pour relier deux points : cette trajectoire s'écarte donc parfois un peu de l'axe entraînant des oscillations. Mais ces considérations techniques ne suppriment pas l'intérêt de cette courbe qui montre que l'accumulation forte en pied de lingot est ensuite transportée le long de l'axe ce qui produit un enrichissement local important mais très limité en volume puisque nous avons vu que l'écoulement est très concentré sur l'axe. Il se peut que la petite valeur positive observée à $2000s$ soit suffisante pour déstabiliser l'écoulement et conduire à cette solution de concentration axiale.

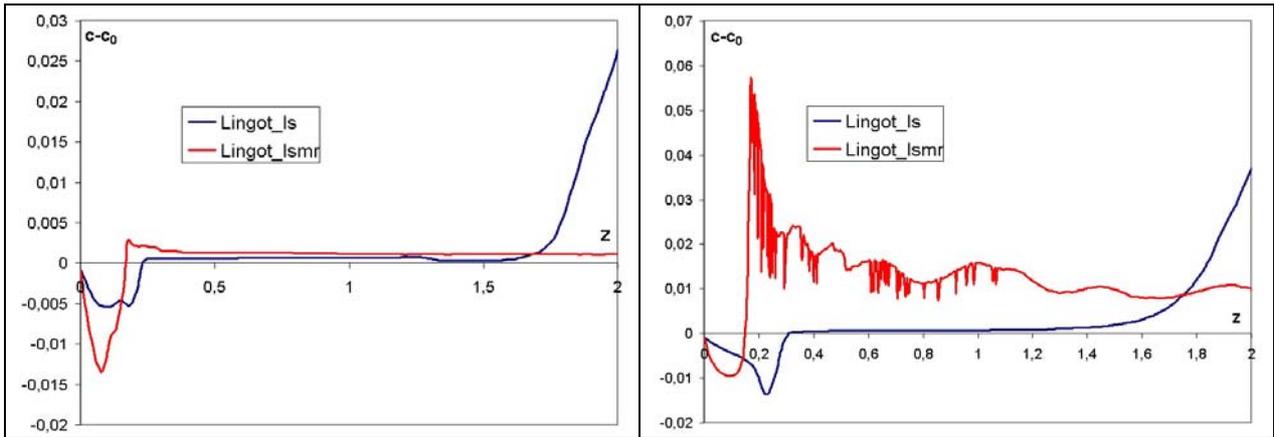


Figure 4-34 : Courbes d'écart de concentration (en wt%) au centre du lingot suivant la hauteur pour les simulations du lingot simplifié avec moule et réfractaire et du lingot seul à $t=2000s$ (à gauche) et $t=3000s$ (à droite)

Les temps de calcul très importants ne nous ont pas permis d'atteindre la fin de la solidification pour le lingot avec moule et réfractaire mais des résultats ont été obtenus pour le lingot jusqu'à la solidification presque complète du lingot. La Figure 4-35 présente les courbes de température de fraction liquide et de ségrégation à $t=14000s$ après deux mois et demi de calcul sur un monoprocesseur. Ces résultats montrent que pour cette simulation l'évolution de la macroségrégation n'a pas changé, l'accumulation s'est poursuivie dans la masselotte avec un appauvrissement du pied du lingot.

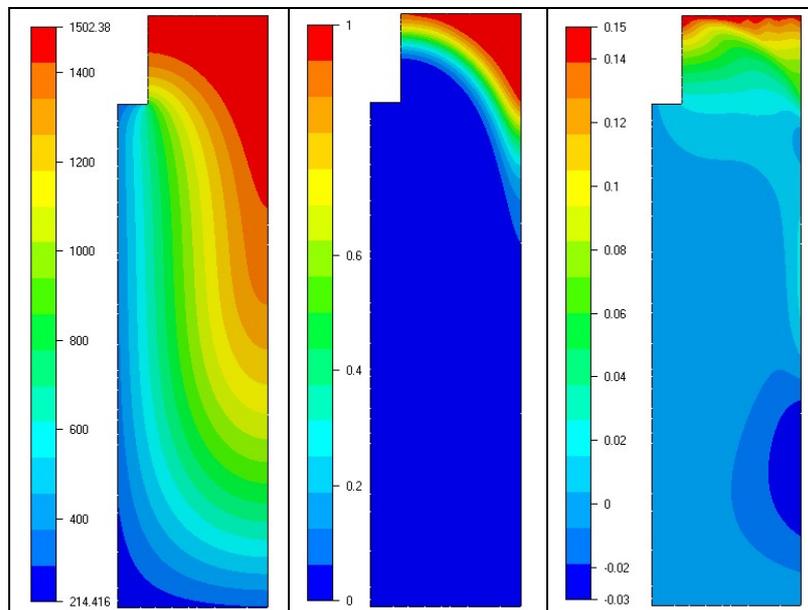


Figure 4-35 : Température (en °C), fraction liquide et écart de concentration moyenne (en wt%) dans le lingot simplifié à $t=14000s$ en simulant le lingot seul

Cet exemple a permis de démontrer la capacité du logiciel et des techniques de remaillage à simuler la macroségrégation sur des lingots de grandes dimensions. Toutefois ces simulations ont été menées dans une configuration pseudo-2D qui n'est pas utilisable pour des lingots cylindriques. L'étape suivante est donc le passage à une simulation 3D qui sera bien plus coûteuse en temps de calcul. Cet exemple a aussi mis en évidence des différences

d'évolutions de l'écoulement pour des paramètres très proches. La formation d'un canal ségrégé a aussi pu être visualisée.

4.3. Application sur un lingot benchmark 3D pour un alliage Fe-0.38%C

4.3.1. Présentation du lingot benchmark

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot, d'un réfractaire et d'un moule cylindriques (Figure 4-36). Le lingot est refroidi uniquement par le moule et le réfractaire, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule et le réfractaire sont en contact avec l'air extérieur et sont refroidis par convection naturelle uniformément sur toutes leurs faces. La section angulaire simulée est de 15 degrés et est bornée par deux plans de symétrie. Le lingot, le réfractaire et le moule sont initialement à de températures uniformes de respectivement 1515°C pour le lingot et 250°C pour le moule et le réfractaire. Les caractéristiques du lingot, du moule et du réfractaire sont présentées dans le Tableau 4-5, le Tableau 4-6 et le Tableau 4-7.

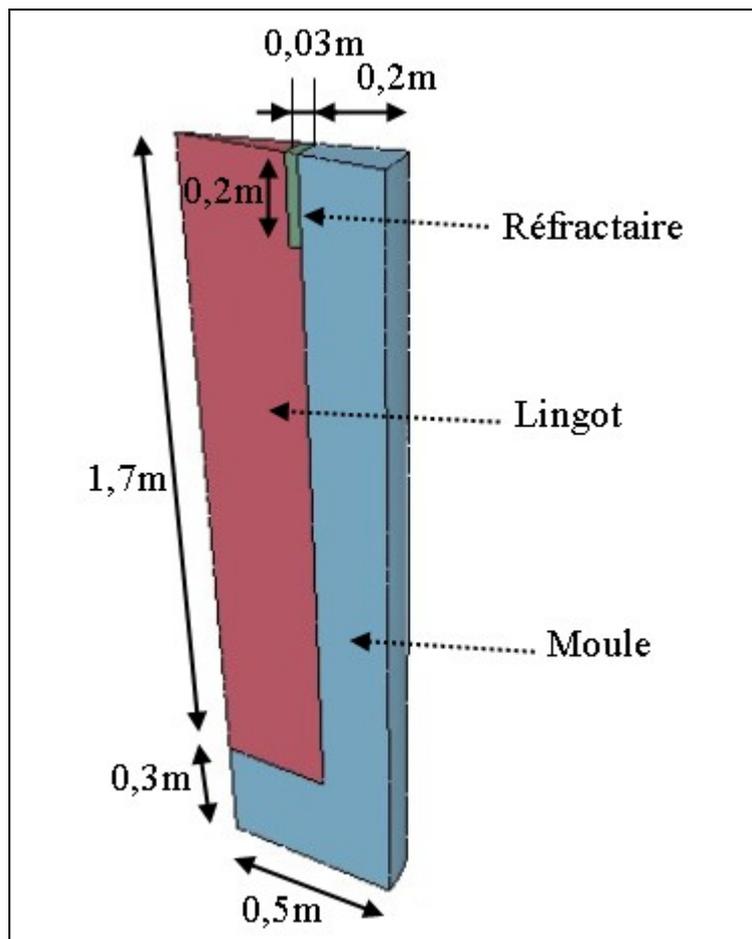


Figure 4-36 : Schéma du lingot et du moule et maillage initial

Lors de la définition de ce cas benchmark, présenté dans la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005], les paramètres choisis correspondent à des valeurs standard dans ce type de calcul.

Signalons néanmoins que la valeur de l'espaceur interdendritique est faible par rapport à ce que l'on peut observer expérimentalement en fin de solidification sur un lingot de cette taille. Cette valeur a l'avantage de rendre les calculs plus stables en générant moins d'instabilité de type freckles dans le front de solidification.

Le rapport de forme est d'environ 5.7 et le nombre de Rayleigh pour ce cas test est de :

$$Ra = \frac{\rho_0^2 g \beta_T \Delta T \cdot H^3 \cdot c_p}{\mu \kappa} = \frac{7060^2 \times 9.8 \times 8.85 \times 10^{-5} \times 17.4 \times 1.7^3 \times 715}{4.2 \times 10^{-3} \times 35} \cong 1.8 \times 10^{10}$$

avec $\Delta T = T_0 - T_{liq} = 17.4^\circ\text{C}$ où $T_{liq} = 1507.6^\circ\text{C}$.

Tableau 4-5 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 35 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 715 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{fs} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du fer pur T_{ls} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espaceur dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1525 °C |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |
| Transfert thermique avec le moule h_m | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Transfert thermique avec le réfractaire h_r | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 4-6 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Tableau 4-7 : Caractéristiques matériau du réfractaire et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|---|
| Masse volumique ρ | 1300 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 0.7 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 1050 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

4.3.2. Solidification du lingot benchmark : premiers calculs

Lors des premières études menées sur ce cas test, les résultats en fin de solidification sont apparus discutables, comme nous allons le voir. Par la suite nous allons donc essayer de comparer différentes options de calcul pour voir si ce problème était récurrent et essayer d'identifier quelle pourrait être la manière de le résoudre en analysant la solidification et l'évolution de l'écoulement et de la macroségrégation. Ce type d'erreur n'apparaissant pas dans le code 2D de solidification développé au Cemef, il se peut que la difficulté provienne de

l'aspect 3D de l'écoulement qui peut requérir une densité de maillage équivalente ou supérieure à celle utilisée en 2D ce qui rendrait la simulation très difficile. Nous essayerons toutefois d'analyser quel est l'effet du maillage.

Analyse de la solidification après 600s de refroidissement

Lors du premier calcul de solidification sur le lingot benchmark, le nombre objectif d'éléments a été fixé à 100 000. D'autre part les paramètres de remaillage utilisés provenaient du calcul sur le lingot lsmr (Lingot Simplifié avec Moule et Réfractaire), présenté dans la section précédente. Ces paramètres ont toutefois été légèrement modifiés en utilisant l'approche automatique pour le calcul des différents critères de remaillage. Les résultats de ce premier calcul lingotb_1d5 (Figure 4-37) montrent que les solutions en température et fraction liquide sont très régulières et que le maillage s'est adapté pour capturer la zone pâteuse et les effets de couche limite importants vers la surface libre et le long de l'axe. La vitesse de l'écoulement est bien plus élevée sur l'axe que partout ailleurs mais globalement l'écoulement paraît acceptable. Seules les courbes de ségrégation montrent une particularité qui va conduire à une carte finale étrange. En effet on peut déjà noter l'enrichissement du liquide sur l'axe ce qui est assez logique étant donné la forme de l'écoulement mais ce qui est plus étrange est le début de formation d'une bulle de concentration plus riche au pied du lingot. Cette zone devrait pourtant avoir tendance à libérer le liquide plus riche en soluté et donc plus léger qui remonterait alors dans le bain liquide. On peut supposer que c'est le résultat de deux phénomènes antagonistes. Le premier consiste en un apport de soluté qui traverse la zone pâteuse à cet endroit. Le deuxième consiste en un blocage du soluté dans cette zone par la solidification qui en diminuant la perméabilité empêche progressivement l'écoulement. Ainsi l'accumulation va dépendre de la vitesse d'avance du front mais aussi du pas de temps utilisé dans la simulation.

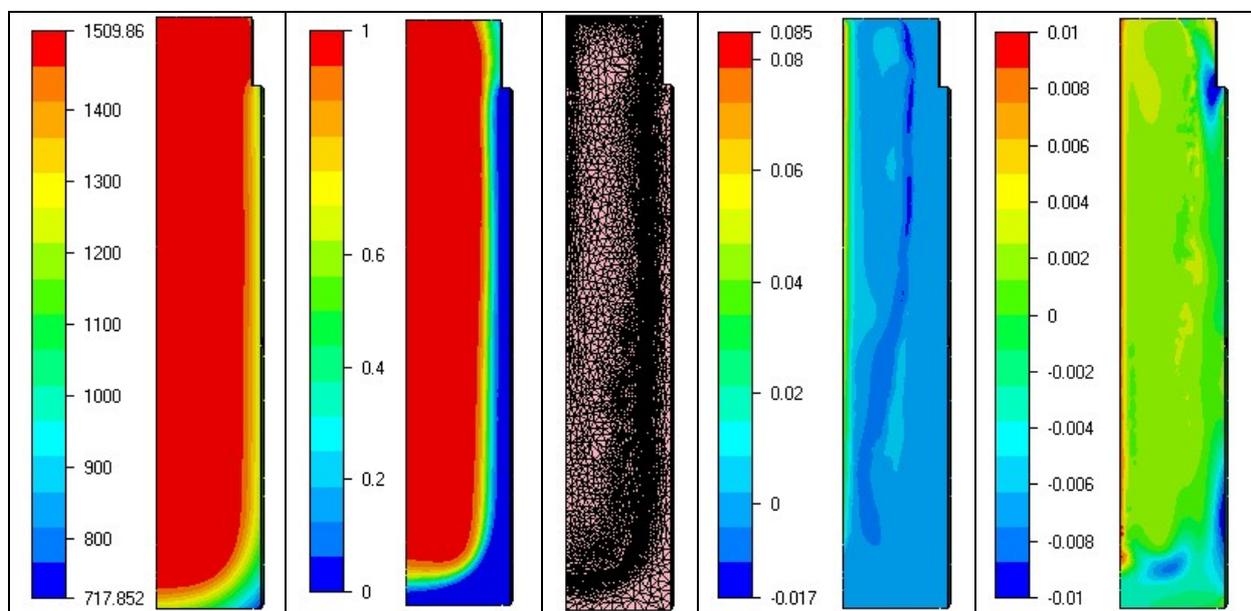


Figure 4-37 : Champs de température (en °C), de fraction liquide, maillage, vitesse verticale (en m/s) et écart de concentration moyenne (en wt%) à 600s pour la simulation lingotb_1d5

Il se pourrait donc que ce type de simulation requière un faible pas de temps même après le début de la solidification alors qu'habituellement on a tendance à l'augmenter de manière importante après l'initialisation de l'écoulement et la formation de la première peau solide.

Analyse de la solidification après 3000s de refroidissement

Les tendances obtenues à 600s se confirment sur les résultats obtenus à 3000s. La Figure 4-38 montre en effet une concentration très importante au pied du lingot, dix fois supérieure à la ségrégation négative. Cette singularité fausse sans doute complètement la ségrégation dans le reste du lingot, puisque la zone de masselottage ne s'enrichit pas suffisamment par l'absence de redistribution de cette masse de soluté et la zone négative en pied de lingot, qui se forme par la suite au-dessus de cette zone, est sans doute aussi modifiée. L'aspect thermique de la solidification ne devrait pas beaucoup être modifié même si l'enrichissement excessif sur l'axe conduit à une solidification plus tardive qui modifie l'écoulement et peut-être donc aussi la redistribution de la température. Notre problème est donc d'essayer d'identifier l'origine du problème de concentration positive très forte en pied de lingot.

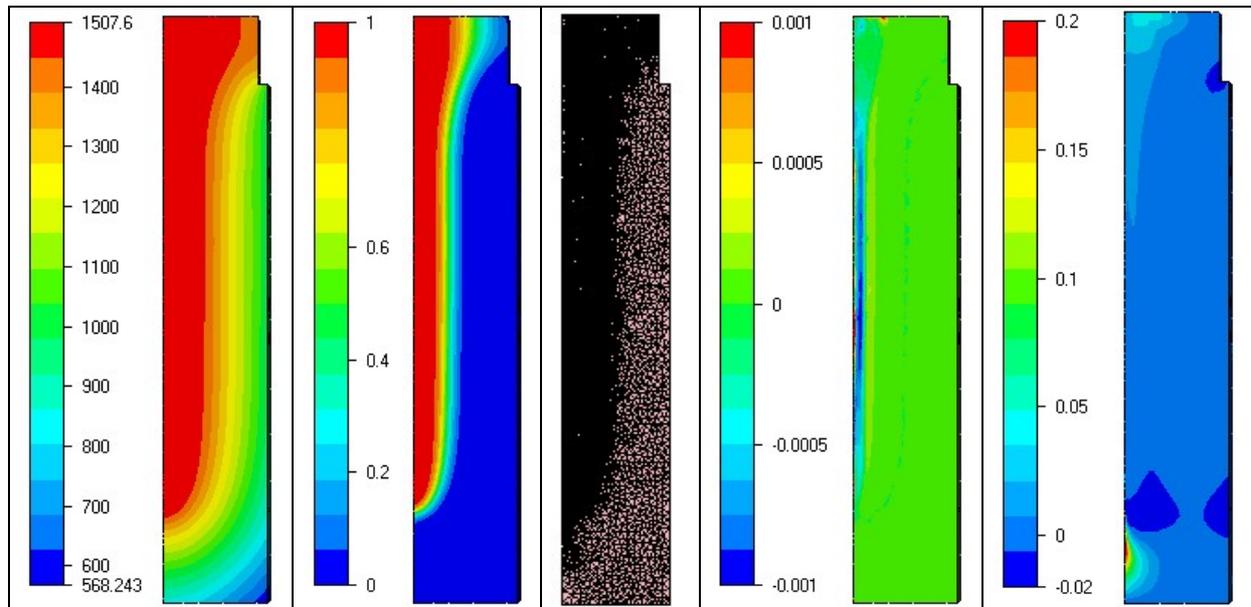


Figure 4-38 : Champs de température (en °C), de fraction liquide, maillage, vitesse verticale (en m/s) et écart de concentration moyenne (en wt%) à 3000s pour la simulation lingotb_1d5

4.3.3. Analyse des résultats obtenus après 180s de refroidissement pour différentes simulations

Différentes simulations ont été lancées sur ce lingot benchmark pour étudier l'effet du remaillage et de la géométrie sur la solution numérique. Nous nous sommes limités à un temps de refroidissement de 180s qui permet de voir déjà quelques différences tout en permettant des temps de calcul réalistes. La solidification jusqu'à 3000s prenant déjà

plusieurs semaines de temps de calcul pour un maillage de 100 000 éléments, il ne paraissait pas adéquat de vouloir faire une étude sur plusieurs maillages comprenant jusqu'à 300 000 éléments.

L'identifiant des simulations correspond au nombre d'éléments objectifs défini pour le remaillage (par exemple 1d5 correspond à 100 000 éléments). L'ajout du terme « -db » sert à indiquer que le maillage utilisé représente un secteur angulaire double du cas standard. Ainsi la simulation 2d5-db donne une densité de maillage égale à 1d5 puisque le volume a doublé.

Une présentation plus détaillée des résultats est fournie dans l'Annexe B. En particulier les résultats sur l'ensemble des différentes simulations sont décrits alors que dans les paragraphes qui suivent nous nous concentrerons sur les faits les plus marquants et les simulations qui les mettent en évidence.

Analyse des résultats en thermique

Les résultats en thermique ne montrent pas d'écarts importants entre la simulation utilisant 100 000 éléments et la solution à 300 000 éléments. Ainsi il semble que dans les deux cas la taille des éléments près de la paroi soit suffisante pour prédire correctement la solidification (pour les deux simulations la taille des éléments à proximité de la paroi est de l'ordre de 2 à 3 mm). Il est fort probable, comme nous le verrons par la suite Annexe A, que les premières secondes de la solidification soit grandement affectées par le maillage mais après 180s, la diffusion importante permet d'uniformiser les solutions. Les courbes de fraction liquide de la Figure 4-39 sont très similaires entre les deux simulations. Le seul écart visible est en pied de lingot où la zone pâteuse semble légèrement plus épaisse pour la simulation 1d5 ce qui est un effet de la taille plus grande des éléments.

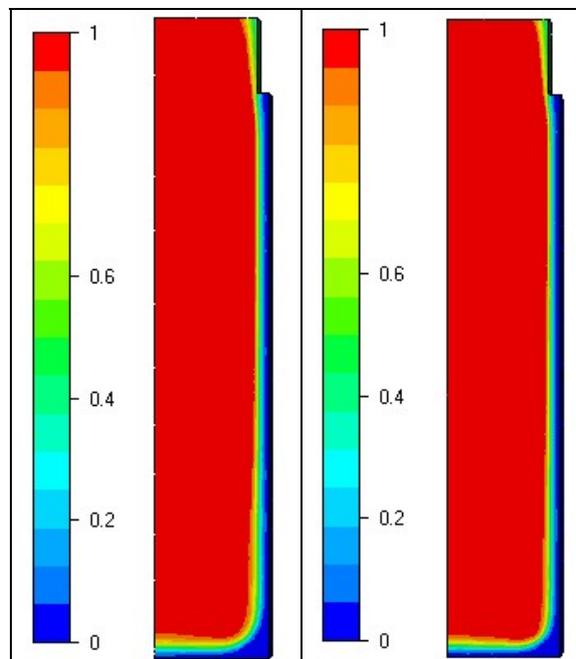


Figure 4-39 : Courbes de fraction liquide à 180s pour les simulations (1d5, 3d5)

Analyse du maillage

La visualisation des maillages devrait confirmer cette impression. On n'observe en effet sur la Figure 4-40 que les éléments en pied de lingot semblent légèrement plus grands

pour la simulation 1d5 mais cela n'est pas évident. En effet le nombre d'éléments n'est pas très différent dans ces zones. On note que la densité la plus importante se situe dans une zone encore liquide et près de la zone pâteuse verticale. Le raffinement du maillage est donc principalement affecté par l'écoulement qui semble assez différent si l'on interprète directement les maillages. Une zone plutôt étendue apparaît pour la simulation 1d5 alors que pour le calcul 3d5 deux lobes apparaissent nettement.

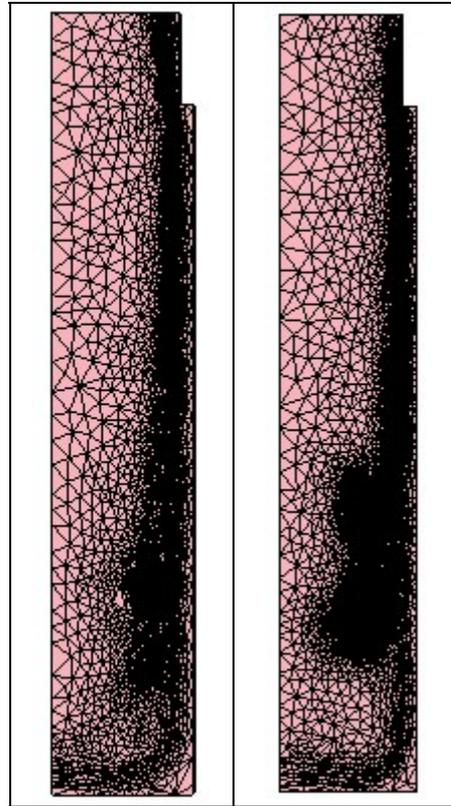


Figure 4-40 : Maillages à 180s pour les simulations 1d5 et 3d5 sur le lingot benchmark

Pour confirmer que la taille des éléments est assez grande dans le coin en pied de lingot, la Figure 4-41 montre un zoom sur le maillage dans cette zone. Le faible nombre d'éléments dans cette zone avec un gradient de température tout de même important peut logiquement conduire à des imprécisions dans la résolution de la thermique.

D'autre part, en dernière remarque sur ces résultats, la zone près de l'axe de symétrie comprend les tailles d'éléments les plus grandes ce qui conduit sans doute à n'avoir qu'un seul élément dans l'épaisseur de cette zone. La Figure 4-41 révèle ainsi dans une section à mi-hauteur du lingot que le maillage est très grossier dans cette zone avec à la pointe de section angulaire un seul élément dans l'épaisseur de la section. On conçoit bien que ce type de maillage n'est pas suffisamment fin pour représenter correctement un écoulement complexe en particulier avec la contrainte des deux plans de symétrie.

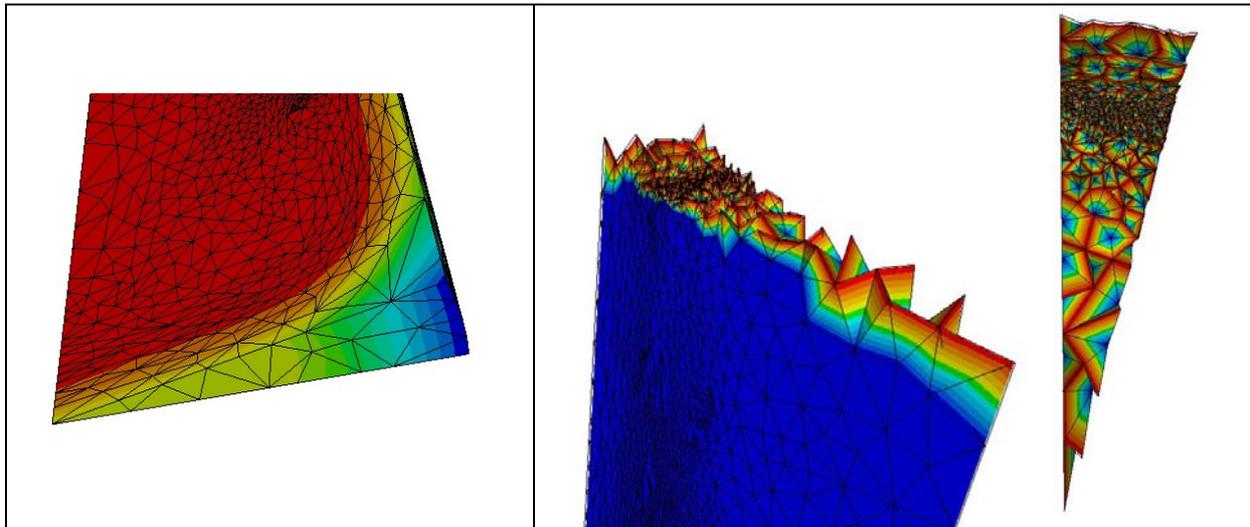


Figure 4-41 : Champ de température et maillage sur le pied du lingot (à gauche) et deux vues du maillage dans la coupe à mi-hauteur du lingot (à droite) pour la simulation lingotb_1d5 à t=180s

Analyse des vitesses verticales

La présence des deux lobes dans le maillage se retrouve dans les résultats sur la vitesse verticale. La Figure 4-42 révèle une séparation de l'écoulement pour la simulation 3d5. La principale zone de recirculation s'arrête à la hauteur d'un tiers environ du lingot comme le révèle la courbure de la zone de couche limite. En dessous on remarque qu'un écoulement existe aussi mais avec des amplitudes de vitesse plus faibles. Une tendance similaire existe pour la simulation 1d5 bien que les courbes soient beaucoup moins marquées et que la courbure soit plus déformée. Par contre dans la simulation 2d5 une telle séparation n'existe pas et le régime reste en mode couche limite. Ces résultats nous permettent ainsi d'indiquer que l'écoulement dans un tel lingot conduit à une divergence de résultats au niveau de l'écoulement suivant le maillage que nous utilisons. La bifurcation d'un écoulement unicellulaire vers un écoulement bi-cellulaire dépend sans doute du raffinement du maillage et des perturbations qui apparaissent le long du front de solidification. Une irrégularité dans la fraction liquide induisant immédiatement une déviation de l'écoulement par une diminution locale de la perméabilité.

Il est donc possible que l'écoulement soit même plus complexe que cela mais seul un maillage très fin serait capable de capturer toutes ces variations et bifurcation. Dans une étude sur un benchmark de fusion, Le Quéré [LE QUERE, 1999] a montré l'apparition d'instabilités dans l'écoulement et le développement d'un écoulement multicellulaires oscillant comparable à un régime périodique en convection naturelle. Les autres codes, présentés dans le benchmark, prédisaient aussi une déformation mais n'étaient pas en très bon accord. Ces travaux ainsi que ceux de Dantzig [DANTZIG, 1989] ont été prolongés par Hannoun [HANNOUN, 2003] qui a ainsi montré l'effet du maillage et du schéma de résolution sur la formation des cellules et la déformation du front de fusion. La Figure 4-43 présente le type d'écoulement qui peut apparaître.

Cet exemple de la littérature montre bien à quel point il est difficile de prédire avec une bonne précision l'écoulement dans une cavité subissant un changement de phase.

Toutefois pour notre problème ce qui compte vraiment c'est de connaître l'influence d'une telle modification de l'écoulement sur la solidification et plus particulièrement sur la macroségrégation : c'est l'objet du paragraphe suivant

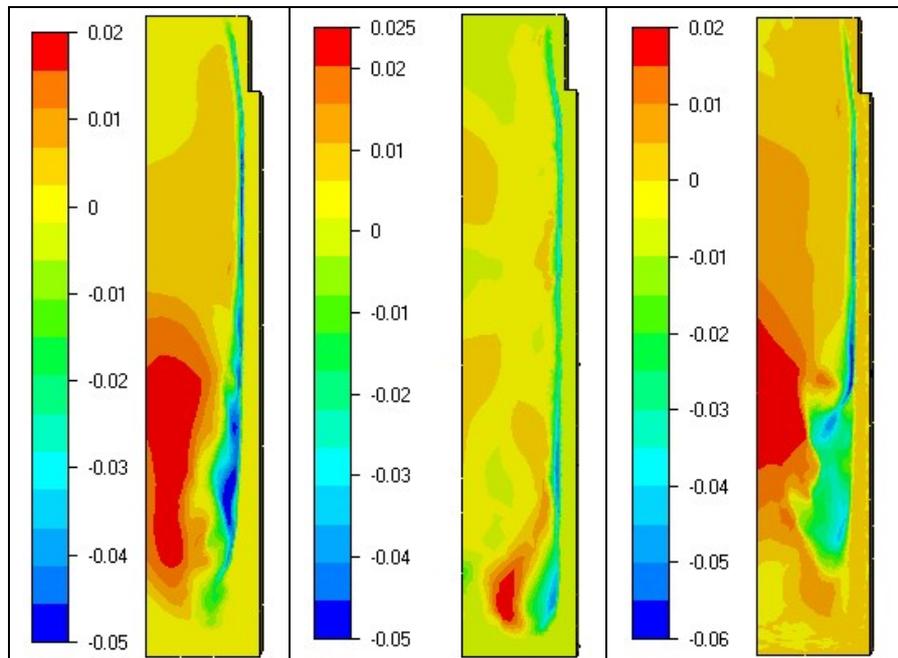


Figure 4-42 : Courbes de vitesse verticale (en m/s) à 180s pour les simulations 1d5, 2d5 et 3d5 sur le lingot benchmark

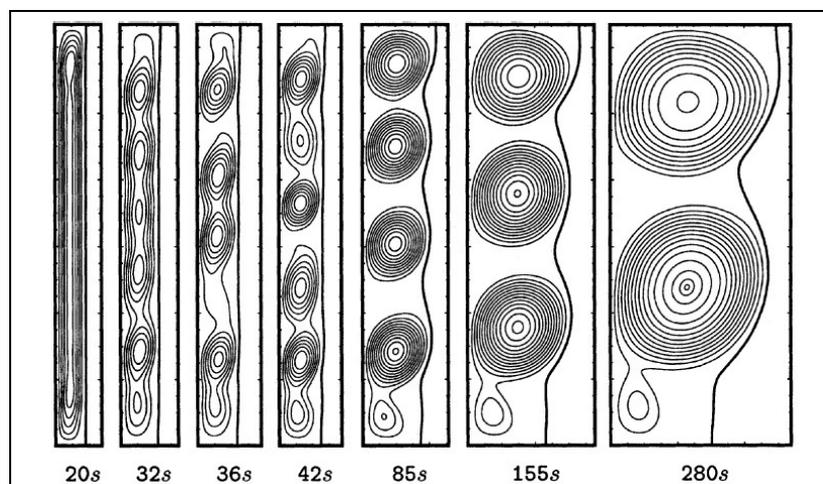


Figure 4-43 : Fusion du gallium : lignes de courant et interface à différents temps [HANNOUN, 2003]

Analyse de la ségrégation

Les résultats de ségrégation (Figure 4-44) sont globalement similaires entre la simulation 1d5 et 3d5 bien que l'amplitude soit un peu plus forte lorsque le maillage est plus fin. D'autre part l'effet de la séparation de l'écoulement est nettement visible, on aperçoit en effet une zone ségrégée positivement à la hauteur de la séparation ce qui indique que la

bifurcation de l'écoulement à cet endroit enrichit localement le liquide par l'apport du rejet de soluté le long de la paroi. Mais les écarts avec la solution 2d5-db sont beaucoup plus importants. Cette simulation présente une ségrégation positive en pied de lingot qui n'apparaît dans aucune autre simulation. L'amplitude de cette ségrégation est faible mais elle correspond tout de même à un inversement complet de tendance et doit donc correspondre à un phénomène important étant donné que la seule différence est l'agrandissement de la portion angulaire simulée, on peut penser que le remaillage s'effectue de manière différente sur une pièce volumique ou que la simulation d'une pièce plus massive entraîne une évolution de l'écoulement qui ne se confine plus seulement dans un plan radial mais prend une composante 3D. Pour vérifier cette hypothèse nous pouvons visualiser les résultats sur les deux faces de notre lingot.

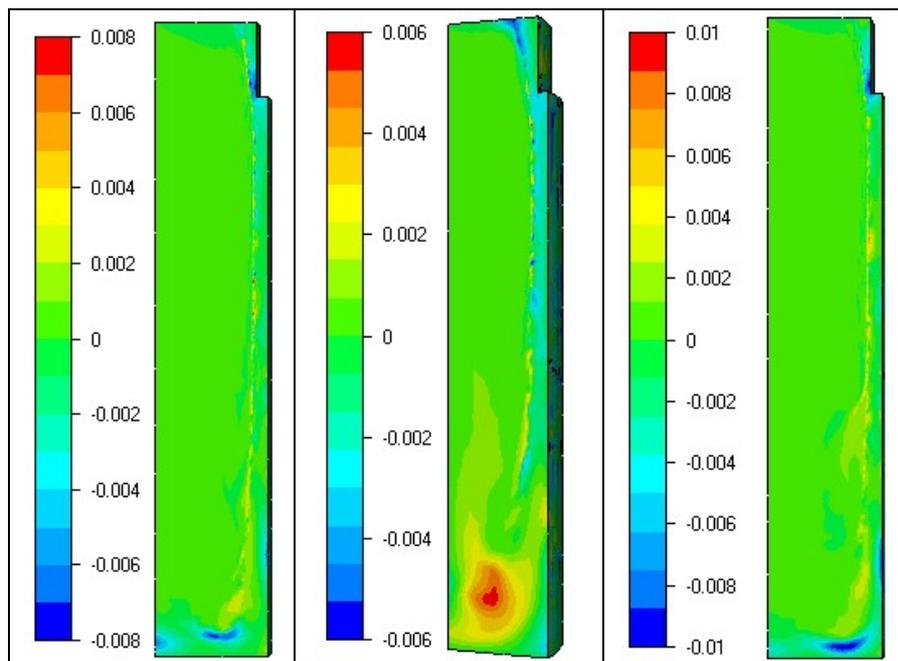


Figure 4-44 : Courbes d'écart de concentration moyenne (en wt%) à 180s pour les simulations 1d5, 2d5-db et 3d5 sur le lingot benchmark

Analyse de la symétrie des solutions

Les résultats en vitesse verticale sur les deux faces du lingot sont assez proches l'une de l'autre. La Figure 4-45 montre des formes similaires et des amplitudes proches. Il semblerait donc que l'écoulement principal dans sa composante verticale ne soit pas en cause. Il s'agirait plutôt de l'écoulement dans ses composantes x et y qui influence la ségrégation.

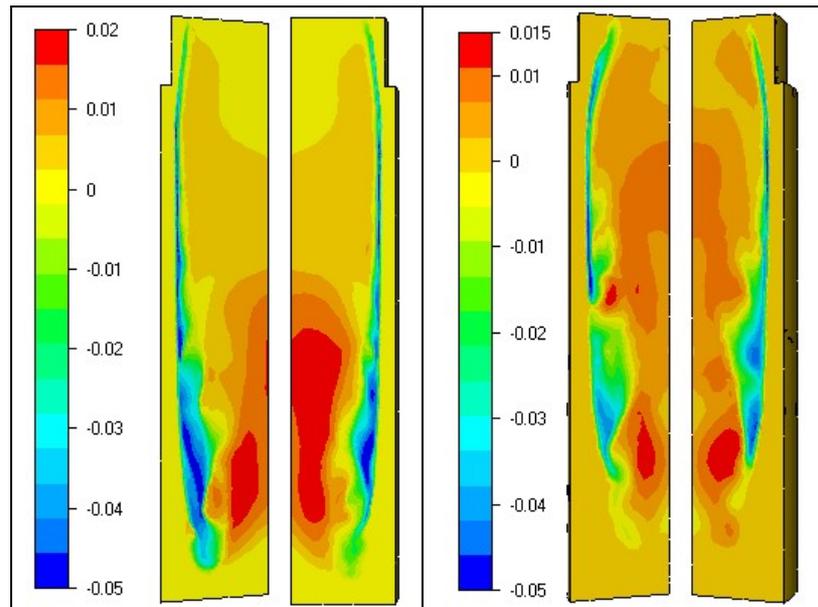


Figure 4-45 : Comparaison des champs de vitesse verticale (en m/s) à 180s sur les deux faces de la portion angulaire (simulation 1d5 et 2d5-db)

La ségrégation est effectivement très différente sur les deux faces de la pièce doublée alors que les valeurs et les formes des zones de ségrégation correspondent bien d'une face sur l'autre pour la simulation 1d5. Les courbes de la Figure 4-46 montrent que la zone de ségrégation positive en pied de lingot observée sur la simulation 2d5-db sur la face droite correspond à une zone négative sur la face gauche. On peut donc estimer qu'un écoulement relie ou a relié ces deux faces ce qui a provoqué cet échange de soluté.

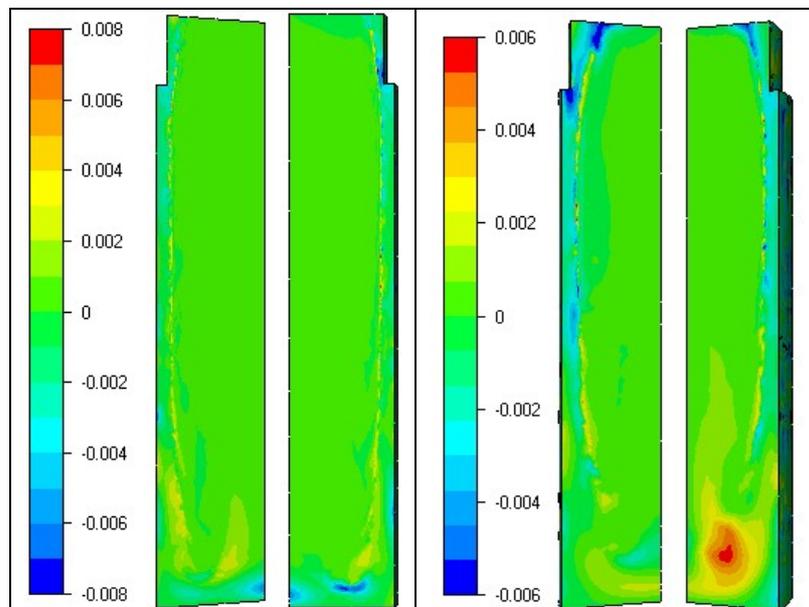


Figure 4-46 : Comparaison des champs de concentration (en wt%) à 180s sur les deux faces de la portion angulaire (simulations 1d5 (a) et 2d5-db)

De tels effets 3D ont un effet très significatif sur la concentration et ne peuvent pas être pris en compte dans les calculs axisymétriques 2D. Il reste toutefois à être sûr que ces écarts sont réellement significatifs d'un phénomène physique et non pas des artefacts numériques. Une fois de plus une telle étude demande une puissance de calcul très importante qui serait mieux utilisée à l'étude d'un lingot de plus faible dimension. En effet il convient d'approfondir deux points clés, l'effet de la portion angulaire et l'effet du nombre d'éléments qui semblent prépondérants. L'effet du pas de temps sera mis de côté pour le moment étant donné que les résultats en début de solidification ont montré que la variation du pas de temps n'induisait pas des écarts significatifs. En outre, pour le reste de la solidification, le pas de temps croît régulièrement jusqu'à atteindre 1 à 2 secondes alors que la vitesse est devenue très faible ce qui ne pose donc plus de problème de convergence.

Comparaison des résultats avec R2SOL

Lors de la création de ce benchmark, la comparaison a été faite entre SOLID et R2SOL (deux codes 2D axisymétriques) mais en fin de solidification. Or ici nous souhaitons plutôt étudier les résultats dès le début de la solidification où commencent à apparaître des divergences produites par le nombre d'éléments ou la portion de la pièce représentée. Dans la thèse de Weitao Liu [LIU, 2005] sont ainsi présentés les résultats après 180s. La Figure 4-47 reproduit ces résultats. La ségrégation est du même ordre de grandeur que celle observée dans les calculs avec THERCAST mais ces derniers présentent des zones plus étendues. On peut noter en particulier que les résultats 3d5 montrent un effet marqué de la séparation de l'écoulement sur la ségrégation alors que pour R2SOL cela n'induit pas de variations importantes de la concentration localement. Les tailles de maille pour la simulation R2SOL varient (hors zone solide) entre 1 et 10 mm alors que pour la simulation 3d5 THERCAST, elles varient entre 3 et 30 mm. Le maillage beaucoup plus fin utilisé dans les calculs avec R2SOL conduit aussi à une prédiction de la séparation de l'écoulement, qui n'est obtenue nettement que pour la simulation 3d5, mais la position de la séparation est différente. Cela nous conduit à la conclusion que ce calcul nécessite sans doute un nombre encore plus grand d'éléments pour obtenir une précision équivalente à celle obtenue avec R2SOL. D'autre part mener des simulations 3D avec une grande densité d'éléments serait très coûteux sur ce type de lingot. Cela nous a donc conduit à reprendre cette étude sur un lingot de plus faible taille qui permettra une analyse plus détaillée car les temps de calcul seront plus faibles à densité de maillage équivalente.

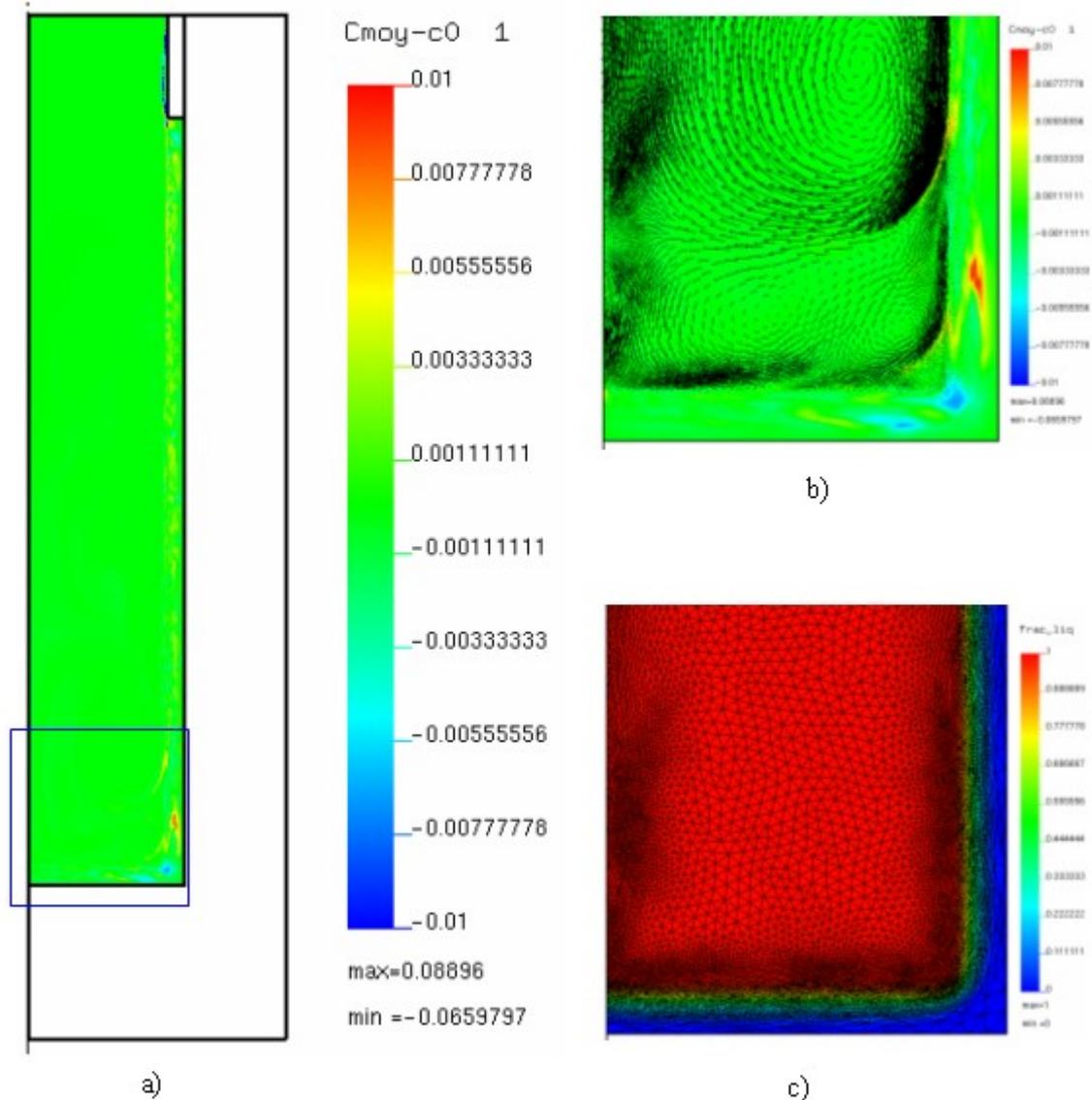


Figure 4-47 : Ecart de concentration (en wt%) (a), zoom sur le pied du lingot présentant les écarts de concentration et le champ des vitesses (b), la fraction liquide et le maillage (c), simulation 2D axisymétrique obtenue avec R2SOL [LIU, 2005]

4.3.4. Conclusion partielle

Cette étude du lingot benchmark a montré les limites actuelles du logiciel THERCAST qui ne permet pas actuellement d'obtenir des résultats de ségrégation fiables sur un maillage grossier. La nécessité d'utiliser un maillage fin impose des temps de calcul très importants et il est donc nécessaire de poursuivre l'étude pour essayer d'identifier comment optimiser la définition géométrique et le nombre d'éléments qui pourrait d'ailleurs devenir variable. En effet si la stratégie de garder constante le nombre d'éléments est très bien adaptée à des maillages pseudo-2D, son application sur des solidifications de lingots circulaires est beaucoup moins efficace car la zone pâteuse a tendance à diminuer au cours de la solidification et donc le nombre d'éléments nécessaires est très important au début mais va décroissant. L'approche actuelle consiste donc à limiter le coefficient multiplicatif à une

valeur de 2 ou 3 qui n'est pas suffisante pour respecter le nombre d'éléments objectifs au début de calcul ce qui induit un dépassement initial qui se résorbe peu à peu. Cela n'a pas été fait au cours de ce travail mais il pourrait être intéressant de réfléchir à une stratégie plus efficace prenant en compte le volume effectif de la zone pâteuse pour calibrer le remaillage.

La poursuite de l'étude de la solidification de lingot va être réalisée sur un lingot trois fois plus petit pour permettre de plus nombreuses simulations et des tests plus complets.

4.4. Analyse de la solidification sur un lingot 3D cylindrique avec moule

4.4.1. Présentation du lingot intermédiaire

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot et d'un moule cylindriques (Figure 4-48). Le lingot est refroidi uniquement par le moule, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule est en contact avec l'air extérieur et est refroidi par convection naturelle uniformément sur toutes ses faces. La section simulée est de 30 degrés et est bornée par deux plans de symétries. Le lingot et le moule sont initialement à des températures uniformes de respectivement 1515°C et 250°C. Les caractéristiques du lingot et du moule sont présentées dans le Tableau 4-5 et le Tableau 4-6.

Le rapport de forme est de 6.6 et le nombre de Rayleigh pour ce cas test est de :

$$Ra = \frac{\rho_0^2 g \beta_T \Delta T \cdot H^3 \cdot c_p}{\mu \kappa} = \frac{7060^2 \times 9.8 \times 8.85 \times 10^{-5} \times 7.4 \times 0.66^3 \times 500}{4.2 \times 10^{-3} \times 30} \cong 3.6 \times 10^8$$

avec $\Delta T = T_0 - T_{liq} = 7.4^\circ\text{C}$ où $T_{liq} = 1507.6^\circ\text{C}$.

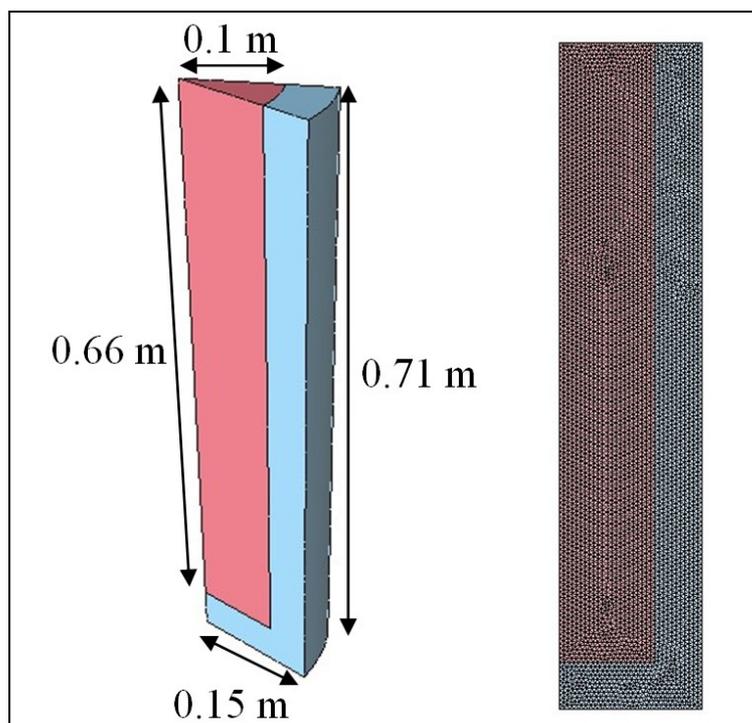


Figure 4-48 : Schéma du lingot et du moule et maillage initial

La Figure 4-48 présente aussi le maillage du moule et du lingot. Ces maillages sont uniformes avec une taille de maille imposée de 0.005m lors de la génération du maillage par GAMBIT. On obtient ainsi un maillage comprenant 93932 éléments. Ce maillage va servir de maillage standard pour les calculs qui suivent parce qu'il représente bien un maillage uniforme et fin qui pourrait être employé de manière standard dans un calcul. Ainsi en employant ce maillage nous pourrions étudier les différents problèmes qui pourraient survenir lors d'autres calculs.

Tableau 4-8 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 500 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du fer pur T_{fs} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1515 °C |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |
| Transfert thermique avec le moule | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 4-9 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Ce lingot nous offre la possibilité en particulier d'analyser plus finement les premiers instants de la solidification et l'apparition du choc thermique et ses effets sur l'écoulement et la solidification. Ensuite nous nous intéresserons successivement à la thermique, à l'écoulement et à la macroségrégation dans le lingot tout au long de la solidification.

4.4.2. Etude de l'effet du choc thermique sur la solidification et la vitesse dans l'écoulement

Une analyse du choc thermique, de ses conséquences et de son traitement par la méthode condsplit a été réalisée et est présentée en détail dans l'Annexe A. Au cours de cette étude, les effets du maillage et du remaillage ont été testés à travers différentes simulations. Les résultats ont été analysés du point de vue de la température maximale mais aussi localement et une section horizontale prise à mi-hauteur. Des résultats qualitatifs et quantitatifs ont ainsi été obtenus. Dans la suite nous allons donc voir rapidement quels sont les principaux résultats et conclusions de ce travail.

Effet du choc thermique : Température maximale et écoulement

Une donnée globale représentant la qualité de la solution est donnée par la température maximale dans la pièce. En effet, lors d'un refroidissement, la solution n'est pas sensée dépasser la température initiale. Cette signature du choc thermique nous permet d'évaluer son importance. La Figure 4-49 montre ainsi l'évolution de la température maximale pour trois simulations différentes. La première est le calcul sur le maillage initial en maintenant un pas de temps constant (0.25s). La seconde simulation utilise le remaillage qui se déclenche après 20 incréments. Enfin la troisième simulation, qui sert de solution de référence par la suite est obtenue sur un maillage raffiné sur la paroi verticale. Ce maillage localement plus fin améliore la solution mais seulement pour la portion verticale ce qui n'atténue qu'en partie la force du choc thermique qui se produit aussi au pied du lingot. Ces courbes nous révèlent que le déclenchement du remaillage conduit à une diminution très importante de la température maximale qui retrouve rapidement le seuil de la température initiale fixée à 1515°C.

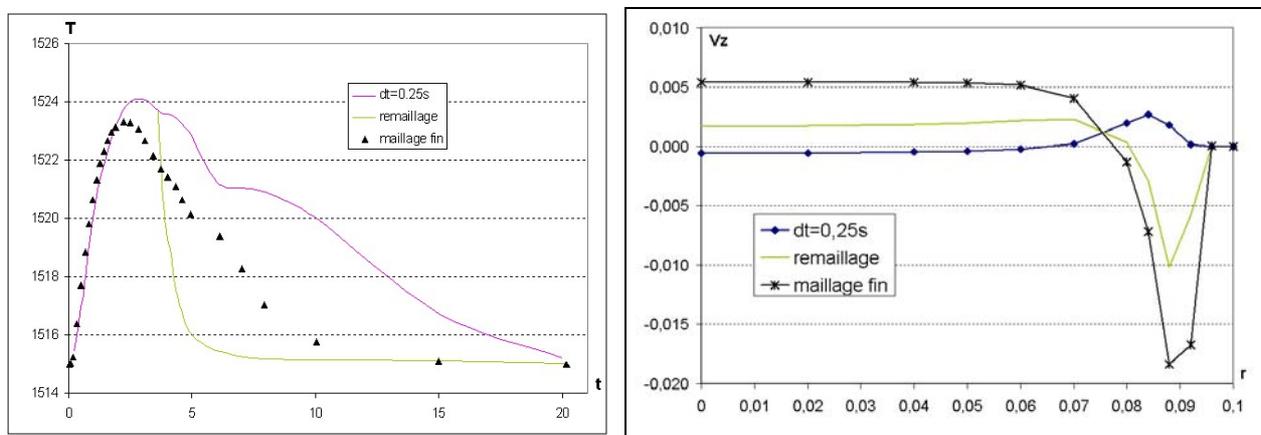


Figure 4-49 : Courbes des températures (en °C) maximales en fonction du temps (en s) et de la vitesse verticale (en m/s) sur la section horizontale à mi-hauteur à $t=10$ s pour le maillage initial, le maillage adapté et le maillage fin sur la paroi verticale

La Figure 4-49 présente aussi les résultats en vitesse verticale obtenue sur la section horizontale à mi-hauteur à $t=10$ s. Ces courbes nous révèlent les perturbations importantes qui sont introduites dans la formation de l'écoulement dans ces premiers instants. En effet si les courbes sur le maillage fin et avec remaillage présentent une forme similaire, caractéristique d'un écoulement de type couche limite en refroidissement. La simulation sur le maillage initial affiche un écoulement inversé. Les hautes températures dues au choc thermique imposent un écoulement vers le haut comme si la paroi était chauffée. On peut ainsi voir que l'effet est très notable sur l'écoulement et l'influence est durable.

Absorption du choc thermique et résidus

Cependant petit à petit, le choc thermique s'atténue et la Figure 4-49 montre que même sur le maillage initial, la température maximale est correcte après 20s de refroidissement. Cette absorption est même plus rapide lors de l'application du remaillage. Sur la Figure 4-50, on note ainsi que la température avec le remaillage converge précocement sur la solution obtenue sur le maillage fin. Ainsi pour ces deux simulations les résultats en thermique sont équivalents après 10s de refroidissement mais il n'en est pas de même pour

l'écoulement. Les courbes de vitesse verticale de la Figure 4-50 sont décalées temporellement entre la solution de référence et celle avec remaillage. On peut ainsi conclure que le choc thermique a introduit un délai dans l'initiation de l'écoulement par la perturbation du champ de température. Le démarrage de la formation de l'écoulement de type couche limite est alors plus tardif. Cela introduit alors des vitesses inférieures à la solution de référence. On peut donc estimer que cela va conduire à un transport de soluté plus faible.

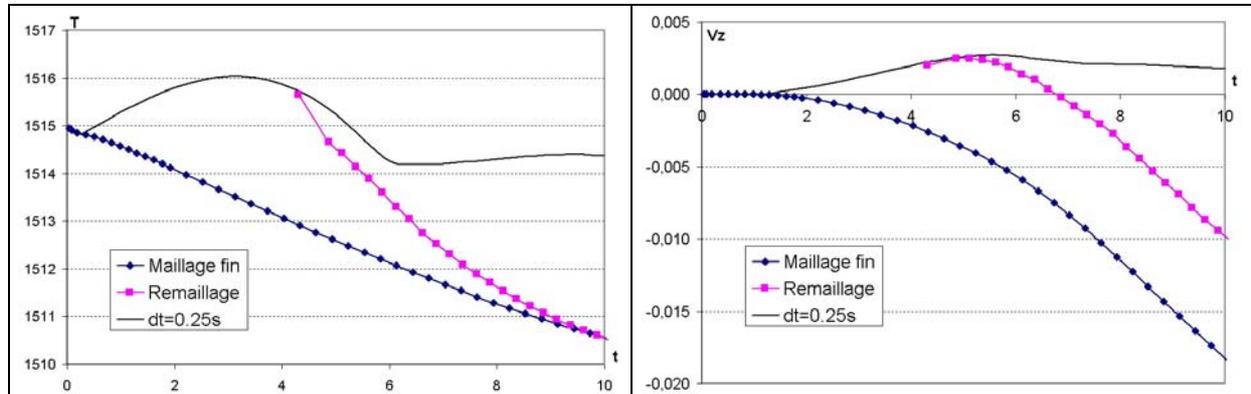


Figure 4-50 : Evolution de la température (en °C) et de la vitesse verticale (en m/s) au point (0.088 ; 0 ; 0.33) en fonction du temps (en s) pour le maillage initial, le maillage fin et avec remaillage

Si le choc thermique initial affecte la solution, son effet n'est sans doute pas prépondérant. A l'échelle de la durée de solidification d'un lingot, la majeure partie du transport de soluté se produit en effet bien après l'absorption du choc thermique. Nous allons donc maintenant voir comment la solution évolue du point de vue thermique, mécanique et solutal, en comparant à chaque fois différents maillages et différents angles de portion de cylindre. Nous essayerons en particulier de mettre en évidence le phénomène apparu sur le lingot benchmark et qui conduisait à une concentration très élevée sur l'axe.

4.4.3. Etude de la thermique du lingot

Les études qui suivent sont réalisées sur deux maillages fixes, un sur la portion à 30° (noté mesh_axe) avec un raffinement sur l'axe et sur les parois et l'autre uniforme et plus grossier sur le quart de lingot (noté quart_fixe). Les deux autres simulations sont faites en utilisant le remaillage avec 200 000 éléments, l'une sur la portion à 30° (noté lingotfl_2d5) et l'autre sur le quart de lingot (noté quart_2d5). Les résultats sont analysés à 120s de refroidissement. A cet instant la solidification est bien avancée, la zone pâteuse assez large et l'écoulement encore assez important. Il semble donc que cela soit particulièrement adapté pour étudier les problèmes qui nous occupent. Les résultats présentés sont obtenus sur la section horizontale à mi-hauteur de la cavité.

Les courbes de température et fraction liquide de la Figure 4-51 sont superposées pour toutes les simulations sauf le calcul quart_2d5. Le bon accord entre les simulations montrent que l'angle de la portion n'a pas d'effet notable et que le maillage au-delà d'un certain raffinement n'influe plus beaucoup sur la solution en thermique. Par contre lorsque le maillage n'est pas assez fin, comme cela semble être le cas pour la simulation quart_2d5, la solidification est plus rapide et des écarts importants apparaissent. L'élargissement de la zone

pâteuse conduit sans doute à une limitation de la vitesse de l'écoulement mais aussi peut-être à un transport de soluté plus important puisque la zone en train de solidifier dans laquelle la vitesse n'est pas négligeable est plus large. Cependant si cette solution n'est pas très précise la tendance est tout de même bonne et la position du front de solidification à peu près correcte.

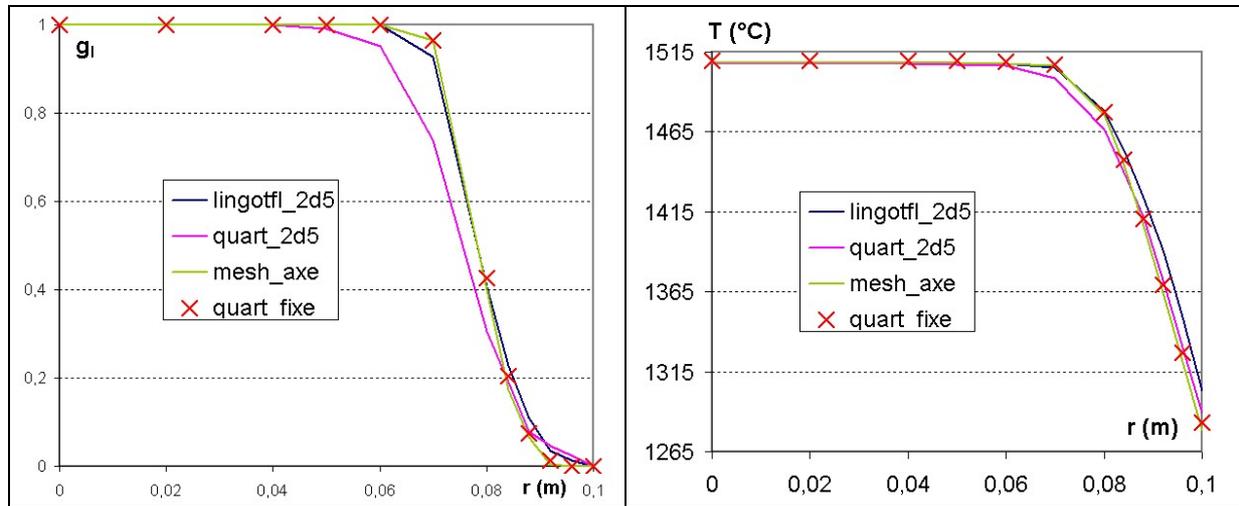


Figure 4-51 : Fraction liquide et température (en °C) en fonction du rayon sur la face droite des lingots à $z=0.33$ et à $t=120s$

D'autre part pour tester l'effet de l'angle de la portion de lingot, nous avons comparé les résultats sur la section horizontale dans les plans de la face droite et de la face gauche pour les deux simulations avec remaillage qui sont a priori plus sensibles du fait de l'irrégularité plus grande de maillage. Pourtant la Figure 4-52 révèle une exacte superposition des résultats sur les deux faces.

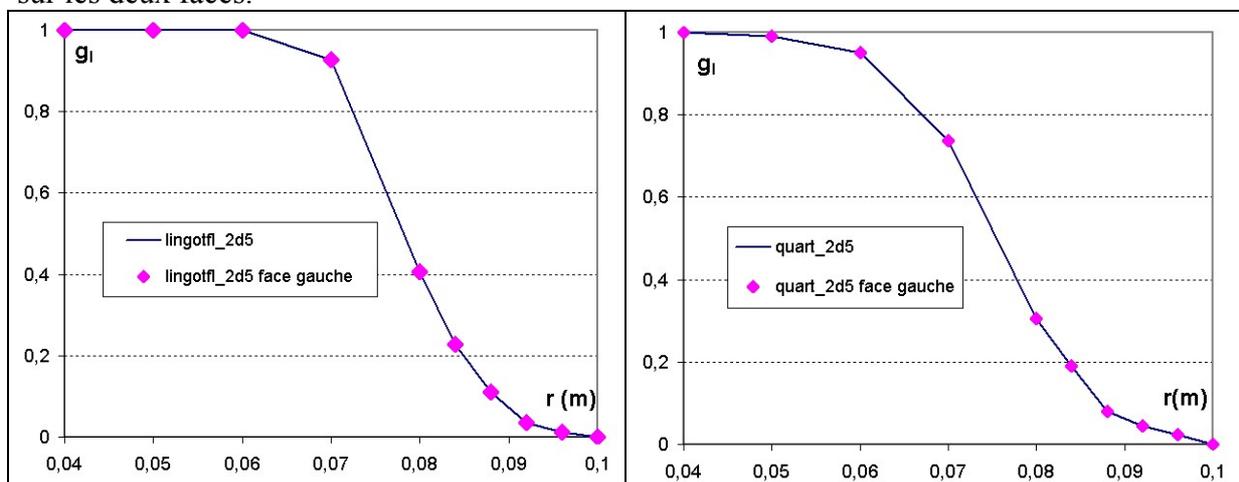


Figure 4-52 : Fraction liquide en fonction du rayon, comparaison des résultats sur les deux faces du lingot à $z=0.33$ et à $t=120s$

On peut donc conclure de ces résultats que la thermique ne nécessite pas une finesse de maillage importante et que la portion simulée n'affecte pas non plus la solution. Toutefois il existe une taille limite de maillage en dessus de laquelle la qualité de la solution perd de sa précision.

4.4.4. Etude de l'écoulement

L'écoulement a été analysé en détail dans l'Annexe C, mais nous allons regrouper ici les résultats et les conclusions les plus importantes. En premier lieu l'évolution de l'écoulement est quasiment similaire pour toutes les simulations. Il commence par se former un écoulement de type couche limite, ensuite apparaît un vortex en pied de lingot qui se développe. Lorsqu'il occupe quasiment la moitié de la cavité, des instabilités apparaissent et l'écoulement est complètement perturbé. Ces perturbations croissent à leur tour pour occuper progressivement l'ensemble de la cavité. Ainsi à 120s, le vortex stable est confiné dans une petite portion en haut du lingot. Cette évolution est résumée sur la Figure 4-53.

Deux particularités apparaissent pourtant lors des simulations (cf. Figure 4-54). La première a lieu lorsque le maillage est trop grossier ce qui est le cas dans nos simulations sur le maillage initial à la fois pour la portion de 30° et pour le quart de lingot. Dans ces deux cas, des oscillations dues au choc thermique amplifient les instabilités dynamiques ce qui génère très tôt des perturbations dans l'écoulement. Ainsi dès 45s, le champ de vitesse est complètement modifié et ne présente pas la régularité que nous avons observée sur le maillage fin. La seconde particularité est apparue dans les simulations sur le quart de lingot. En effet lorsque l'on observe les vecteurs vitesse à 45s, on voit un écoulement qui ne semble pas dans le plan de la face de symétrie. L'analyse plus poussée de cet écoulement montre en effet que l'écoulement initialement axisymétrique évolue peu à peu pour devenir complètement 3D (cf. Figure 4-55). Cela va donc introduire des écarts de concentration entre les deux faces du lingot. Une telle évolution de l'écoulement n'est pas présente dans les calculs sur la portion à 30°. On détecte cependant des perturbations dans la solution mais il semble qu'elles n'aient pas la place de se développer. L'angle de la portion angulaire semble donc essentiel pour la capture de l'aspect 3D de l'écoulement.

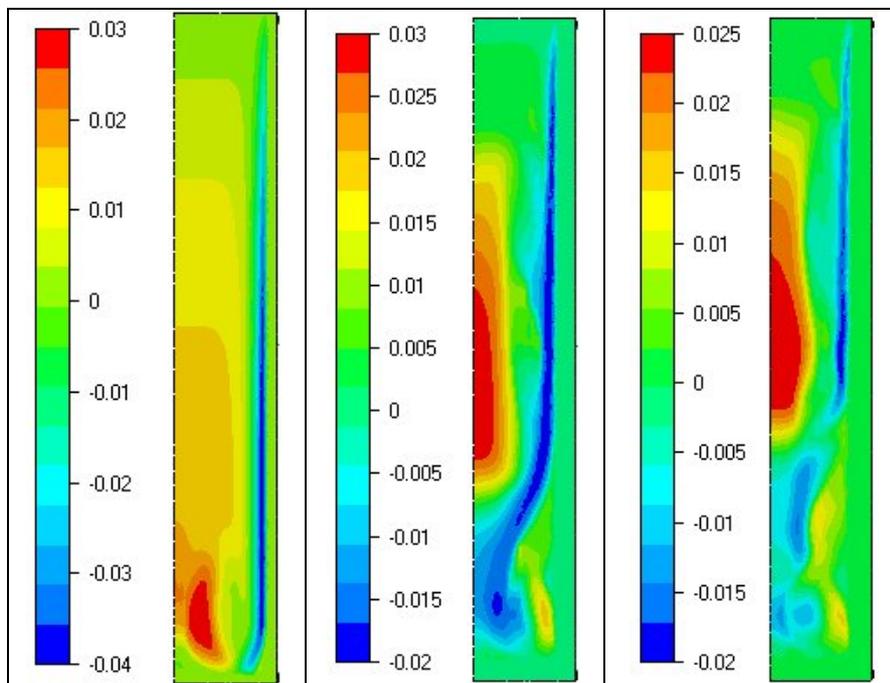


Figure 4-53 : Vitesse verticale (en m/s) sur le maillage fin aux parois et sur l'axe à $t=20s$, $t=60s$ et $t=70s$

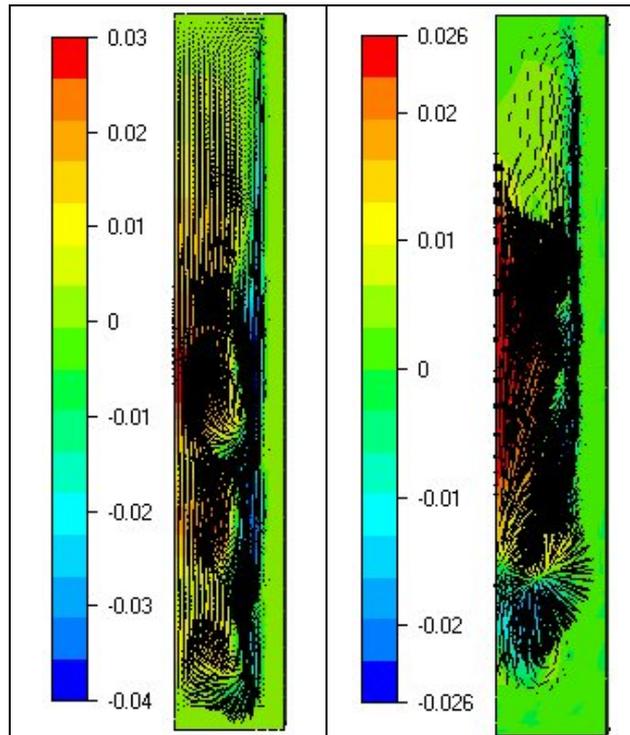


Figure 4-54 : Vecteur vitesse et vitesse verticale (en m/s) à $t=45s$ pour la simulation sur le maillage initial et avec remaillage 2d5 sur le quart de lingot

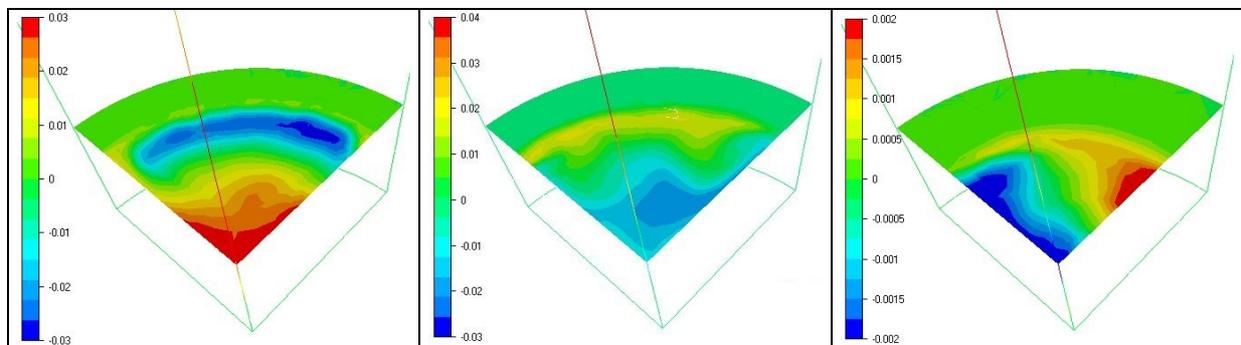


Figure 4-55 : Vitesse verticale (en m/s) sur la section à $z=0.066$ pour la simulation quart_3d5 à $t=35s$, $45s$ et $90s$

4.4.5. Etude de la macroségrégation

Pour étudier la macroségrégation nous allons d'abord nous concentrer sur la simulation quart_2d5 qui permet d'obtenir des résultats intéressants et surtout de visualiser le problème de ségrégation positive en pied de lingot qui a faussé les calculs sur le lingot benchmark. Les résultats de cette simulation sont présentés sur la Figure 4-56 et la Figure 4-57. Cet ensemble d'images permet de bien saisir comment la macroségrégation évolue dans notre lingot. Si on note clairement l'enrichissement progressif du lingot qui induit une accumulation de soluté sur l'axe qui se dissout progressivement, plusieurs points apparaissent

sur ces images qui méritent quelques éclaircissements. En premier lieu, les écarts de concentration moyenne à 45s révèlent l'effet non négligeable de la séparation de l'écoulement, en effet une petite poche de liquide enrichie est présente au niveau de la séparation de l'écoulement. L'effet de mélange des vortex instables qui apparaissent ensuite va disperser cette accumulation temporaire. La ségrégation positive prépondérante en pied de lingot tend à se décaler vers l'axe à mesure que le front de solidification avance. Cet effet est d'autant plus renforcé que l'enrichissement allège le liquide et augmente donc la force d'entraînement de l'écoulement. Le soluté s'accumule sur l'axe mais est emporté par le mouvement du liquide qui le redistribue ensuite par les mini-vortex sauf en pied de lingot où la zone pâteuse freine trop l'écoulement pour permettre ce transport. On observe ainsi à 90s une grosse poche de liquide faiblement enrichie et une zone de concentration importante en pied de lingot à proximité du front de solidification. Cette structure de ségrégation est très proche de celle observée lors de l'analyse des résultats du lingot benchmark. Cependant dans ce cas test la suite de la solidification est différente.

En effet l'enrichissement du bain liquide se poursuit finalement au dépend de la zone ségrégée positivement en pied de lingot qui disparaît progressivement par l'entraînement de l'écoulement et aussi sans doute par l'effet lissant du remaillage. Ainsi à partir de 220s on voit apparaître une zone de ségrégation négative vers le pied du lingot. Cette zone devient dominante à 300s. La difficulté posée par cette concentration importante de soluté sur l'axe s'est donc finalement résorbée contrairement à la simulation sur le lingot benchmark. La différence essentielle entre ces deux calculs est bien sûr la taille de maille qui est bien plus faible dans cette simulation puisque le nombre d'éléments est similaire mais la hauteur trois fois inférieure. La fin de la solidification entraîne une ségrégation fortement positive sur le haut du lingot et une ségrégation négative en pied de lingot ce qui constitue un schéma classique. La solidification est quasiment complète (fraction liquide max=0.27) après 600s de refroidissement pour cette simulation.

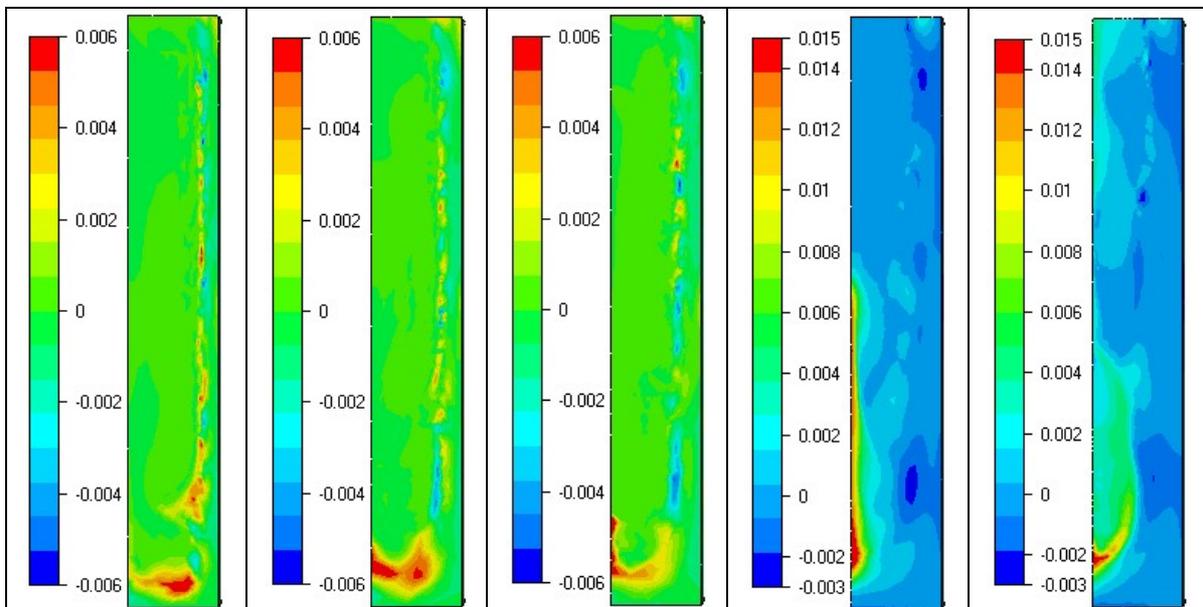


Figure 4-56 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) pour la simulation quart_2d5 à $t=45s, 60s, 70s, 90s$ et $120s$

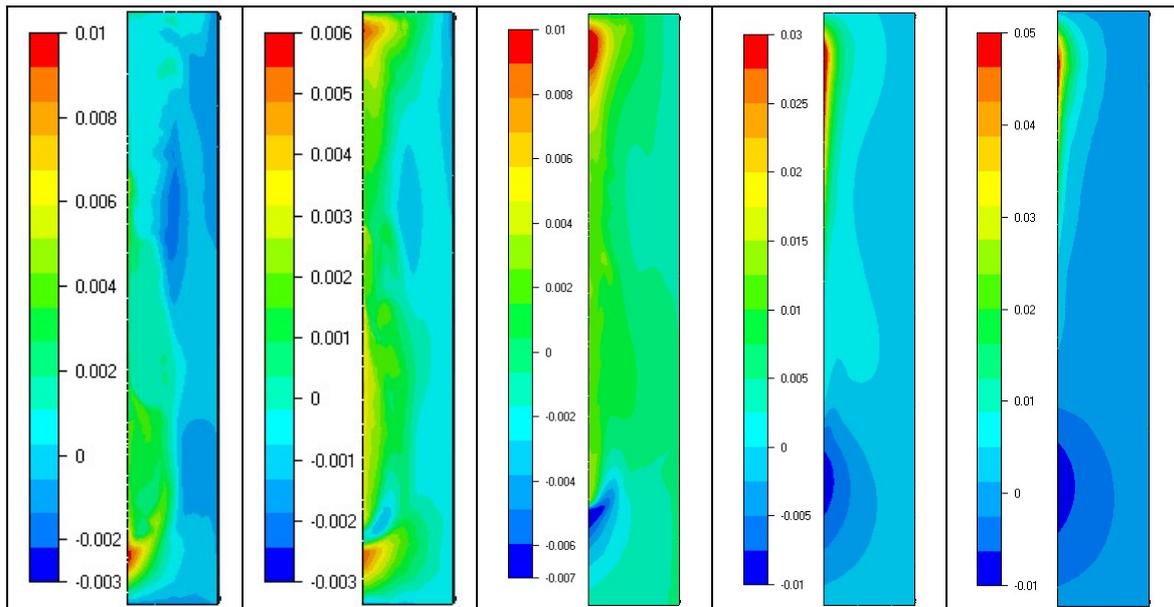


Figure 4-57 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) pour la simulation quart_2d5 à t=160s, 220s, 300s, 400s et 500s

Cette simulation montre ainsi que la résolution de la macroségrégation sur des lingots industriels en 3D est possible mais qu'elle a un coût en termes de nombre d'éléments qui est très important. On peut estimer en effet que la simulation quart_2d5 ne contient pas suffisamment d'éléments pour une précision fine de la macroségrégation. Les courbes très régulières obtenues en fin de solidification vers 600s révèlent que le maillage reste trop grossier et le lissage trop important.

Mais ce calcul nous fournit déjà un premier point de comparaison et un ordre de grandeur pour les capacités de calcul nécessaires. Une autre comparaison a aussi pu être faite à partir de ce cas en testant l'effet de l'angle du secteur et de la densité du maillage. La Figure 4-58 montre que la ségrégation axiale est beaucoup plus intense lorsque l'on simule une faible section angulaire du lingot (ce qui correspond au cas intitulé lingotfl_2d5 qui est une section de 30°). Bien que la densité de maillage soit plus faible, le pic de concentration est trois fois plus faible. D'ailleurs l'augmentation du nombre d'éléments conduit à une diminution encore plus importante en simulant un quart de lingot. Pour information, le liquidus se situe approximativement à $z=0.053\text{m}$ pour les simulations quart_2d5 et quart_4d5 alors qu'il se situe à seulement $z=0.028\text{m}$ pour la simulation lingotfl_2d5. Cet écart est en accord avec les courbes de concentration car l'accumulation de soluté abaisse d'autant la température de solidification.

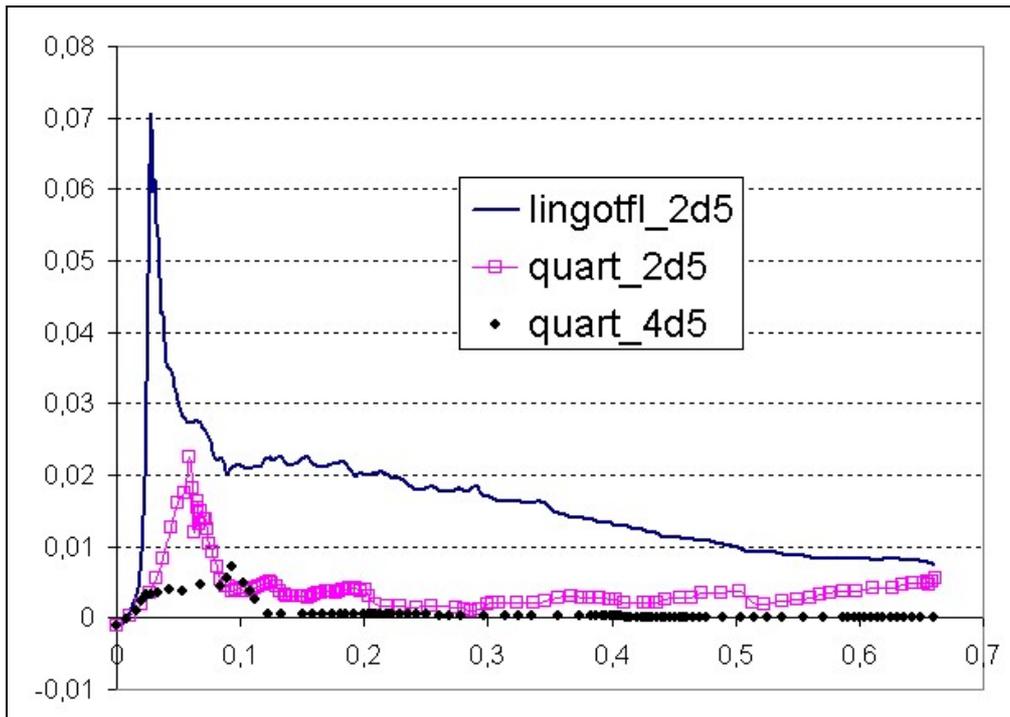


Figure 4-58 : Ecart de concentration (en wt%) sur l'axe du lingot en fonction de la hauteur à t=120s

Cette dernière comparaison montre bien la nécessité d'un maillage dense pour éviter des problèmes numériques pouvant générer des instabilités parfois critiques comme cette accumulation de soluté sur l'axe qui peut dégrader la solution. Une étude plus poussée semble tout de même nécessaire pour déterminer le point critique aussi bien au niveau densité de maillage qu'au niveau de la portion de lingot à simuler. L'analyse de ce dernier point mériterait d'ailleurs d'être couplée avec l'évolution 3D de l'écoulement pour tester l'existence d'un lien éventuel entre les deux phénomènes.

Chapitre 5 Conclusions et perspectives

| | | |
|------------|---|-----|
| Chapitre 5 | Conclusions et perspectives | 181 |
| 5.1. | Conclusions principales..... | 182 |
| 5.2. | Prédiction de la thermique..... | 183 |
| 5.3. | Evolution de l'écoulement | 184 |
| 5.4. | Macroségrégation et remaillage | 185 |
| 5.5. | Perspectives | 186 |
| 5.5.1. | Application d'un plan de validation et d'étude de sensibilité | 186 |
| 5.5.2. | Amélioration du logiciel..... | 186 |
| 5.5.3. | Introduction de modules novateurs | 188 |

5.1. Conclusions principales

Ce travail a montré la faisabilité en 3D de la simulation de la macroségrégation sur des lingots de taille industrielle. Les temps de calcul restent importants mais les stratégies mises en place, en particulier le remaillage adaptatif anisotrope, permettent tout de même d'obtenir des résultats avec des maillages raisonnables. Rappelons d'ailleurs que l'ensemble des résultats présentés ici a été obtenu sur un ordinateur de bureau monoprocesseur. On voit donc clairement ici l'intérêt d'avoir une version complètement parallélisée du code THERCAST. Au cours de ce travail, nous avons aussi essayé de valider notre code ou au moins d'identifier une stratégie permettant de s'assurer de la qualité des résultats. Cette démarche complexe n'a pas pu être complétée dans le cadre de cette thèse par manque de temps mais l'identification des points clés et la recherche de références pour les valider devraient permettre dans l'avenir de valider plus efficacement nos résultats en particulier lors de l'étape d'industrialisation de ces travaux.

L'obtention des courbes de macroségrégation sur de gros lingots n'a été possible qu'avec la création d'une méthode de remaillage adaptatif. Nous avons développé une approche relativement simple par la détermination des critères à utiliser afin d'obtenir une grande finesse de maillage dans les zones critiques comme la zone pâteuse ou la zone de couche limite tout en élargissant le maillage dans les zones restantes. Une méthode de remaillage adaptatif anisotrope a ainsi été développée, implémentée et validée. Cette stratégie spécifiquement adaptée au problème de la solidification est une première étape vers la mise en place d'une méthode utilisant les estimateurs d'erreur. En particulier, l'utilisation de maillages anisotropes a permis de diminuer grandement le nombre d'éléments nécessaires.

L'utilisation du module de macroségrégation combinée avec la stratégie de remaillage a permis l'analyse de la solidification de plusieurs lingots différents. Ces simulations ont mis en évidence des écoulements complexes souvent instables. L'apparition de vortex secondaires, leurs croissances et leurs disparitions compliquent notablement la recherche d'une solution de référence. L'effet de ces changements rapides de l'écoulement sur la macroségrégation semble important mais nous manquons de résultats pour fournir des conclusions plus affirmatives. Un premier pas a été fait au cours de cette thèse mais il n'a pas été possible d'analyser suffisamment finement l'ensemble des phénomènes qui sont apparus dans les simulations.

En conclusion ce travail a permis la mise en place de la résolution de la macroségrégation dans le logiciel de solidification THERCAST. Les résolutions de la thermique et de la mécanique ont aussi été améliorées pour résoudre les diverses difficultés rencontrées, en particulier par l'utilisation d'une formation plus stable de type SUPG. D'autre part, à l'aide des travaux de Weitao Liu menés en parallèle, il a été montré qu'une résolution couplée à une seule itération était suffisante, c'est donc ce que nous utilisons dans THERCAST. Enfin la dernière partie de ce travail a consisté en l'application de notre logiciel sur différents lingots pour valider et étudier nos prédictions de macroségrégation. Les capacités de THERCAST ont ainsi pu être démontrées sur plusieurs cas tests. Cependant tous nos questionnements n'ont pas pu être résolus, ce travail ouvre donc plusieurs perspectives à court terme pour prolonger l'amélioration du logiciel et l'analyse des résultats. Mais cette thèse ouvre aussi la voie à l'introduction de modèles de microsegrégation plus complexes et à l'ajout de nouveaux modules comme nous le verrons dans les perspectives.

Avant de présenter les différentes applications et les discussions sur les modèles qui ont conduit à certaines conclusions dans les différents domaines qui nous occupent soit la thermique, la mécanique des fluides et la macroségrégation, nous devons apporter une vision critique de nos résultats. Ce travail a apporté des résultats de simulation importants et a mis en évidence différents phénomènes. Ainsi, il a permis d'ouvrir la voie à une analyse 3D de la macroségrégation en intégrant des modifications importantes dans le logiciel THERCAST, à la fois par l'ajout de nouvelles équations mais aussi par l'intégration d'une stratégie de remaillage adaptée aux problèmes de solidification. Mais dans bien des cas ces conclusions ne seront que partielles car il apparaît que des simulations supplémentaires seraient nécessaires pour confirmer ces tendances. Hélas cette étude plus poussée n'a pas pu être mise en place par manque de temps étant donné les coûts en temps de calcul très importants induits par les simulations 3D. La possibilité d'effectuer des simulations 3D de la macroségrégation, nous a révélé de nouvelles problématiques et des interrogations auxquelles nous n'avons pas eu le temps de répondre. Mais c'est aussi un des apports de ce travail d'ouvrir la voie à des analyses complémentaires permettant d'affiner notre compréhension de la macroségrégation et de sa simulation. Après ces conclusions générales, voyons maintenant point par point l'apport de notre travail.

5.2. Prédiction de la thermique

Au cours des premiers tests effectués pour valider l'implémentation de la résolution thermique, nous avons noté quelques écarts sur la cavité de Rayleigh. Cela nous a conduit à effectuer des tests plus poussés qui nous permis d'identifier une influence sensible du pas de temps. Pour nous affranchir de cette limitation nous avons alors introduit dans notre modèle un terme de stabilisation de type SUPG et remplacé la résolution lagrangienne précédente par une résolution eulérienne. Cette stabilisation ainsi que la résolution en enthalpie ont ensuite été validées sur la cavité de Rayleigh. Cette résolution SUPG de la thermique a montré une bien plus grande stabilité et permet d'éviter les problèmes de transport des variables.

Au début de cette thèse nous avons été confrontés au problème du choc thermique lorsque l'on souhaitait simuler le contact du lingot avec les moules. Le changement très rapide de température dans une faible épaisseur de métal, qui ne pouvait pas être maillée aussi finement que nécessaire, conduisait à des oscillations dans la température et à un dépassement non physique de la température de coulée. Ce problème numérique faussait les résultats thermiques mais aussi la mécanique par l'intermédiaire de la modification de la densité dans le terme de gravité. THERCAST intégrait une méthode dite thermique asynchrone pour résoudre ce problème. Il s'agissait de résoudre l'équation de la thermique avec un pas de temps supérieur pour dépasser la valeur critique du pas de temps et ensuite interpoler les résultats pour le pas de temps réel. Cette méthode permettait de contrôler en partie le choc thermique mais il était difficile de déterminer le pas de temps fictif. De plus cette méthode créait une diffusion artificielle non négligeable. La méthode condsplit a été donc introduite par Victor Fachinotti dans THERCAST, elle consiste à ajouter une conductivité supplémentaire. Cela permet de résoudre avec un pas de temps plus faible tout en diminuant fortement l'importance du choc thermique. Nous avons démontré l'efficacité de cette méthode par comparaison avec un cas analytique et par une analyse détaillée de la solidification d'un lingot. L'addition d'un remaillage adaptatif permet alors de résoudre de manière précise ces premiers instants de la solidification et de prédire correctement la température dans le lingot.

La résolution en enthalpie en utilisant la méthode condsplit a ainsi démontré son efficacité et sa stabilité au cours de ces tests mais aussi dans les applications sur des lingots.

La résolution thermique dans THERCAST a ainsi été assez largement testée et ne constitue donc plus une difficulté pour la simulation de la macroségrégation. Par contre le couplage avec la résolution de la ségrégation par une résolution itérative de type point fixe ou par la création d'un système matriciel unique n'ont pas été testées. Ce type de couplage plus coûteux devant à notre avis être prioritairement testé dans le code 2D R2SOL développé au CEMEF. Ainsi des études plus générales sur un couplage global des équations ont été menées dans le cadre de la thèse de Weitao Liu [LIU, 20005].

5.3. Evolution de l'écoulement

L'évolution de l'écoulement dans un problème aussi fortement couplé que la macroségrégation pose des difficultés car l'effet du maillage et du pas de temps est très significatif. Au cours de cette étude nous avons essayé aussi souvent que possible de tester différents maillages pour voir l'effet que cela pouvait induire sur la solution. En particulier dans la simulation sur le lingot intermédiaire, nous avons pu voir que la déstabilisation de l'écoulement se produit de manière identique dès que le maillage est suffisamment fin pour capturer correctement les vortex secondaires. D'autre part ce cas test a aussi mis en évidence l'apparition d'un écoulement 3D dans le lingot suivant la portion angulaire qui était simulée. Ce point mériterait d'être approfondi au niveau de l'effet sur les macroségrégations. La pertinence des résultats actuels est toutefois limitée par l'impossibilité d'obtenir des macroségrégations sur un maillage fixe à cause d'une finesse de maillage insuffisante. L'effet de lissage du remaillage pouvant modifier certaines instabilités mineures, il est difficile de fournir des conclusions définitives sur ce sujet.

L'autre point crucial observé dans ces différentes simulations est l'apparition d'un écoulement singulier se concentrant sur l'axe central et modifiant alors complètement l'évolution postérieure de l'écoulement. Ce phénomène complètement lié au couplage avec l'effet thermo-solutal pose le problème de savoir quand se produit cette bifurcation vers la solution singulière. Il s'agira aussi d'identifier si cette bifurcation a un sens physique ou s'il s'agit simplement d'une solution numérique artificielle. Des éclaircissements sont nécessaires car l'influence de cet écoulement est majeure sur la suite de la solidification et en particulier sur la ségrégation en pied de lingot. De plus cette singularité peut faire diverger le calcul dans le sens où le soluté s'accumule de manière croissante et auto-entretenu.

L'analyse de ces lingots tests a permis de mettre en évidence des structures d'écoulement stables comme la formation en début de solidification d'une couche limite puis d'une boucle de recirculation globale et de vortex secondaires. Les instabilités de cet écoulement thermo-solutal sont importantes et ce couplage fort avec la thermique et la ségrégation conduit à un changement parfois radical de l'écoulement. Deux régimes ont pu être identifiés sur le lingot plan pour des simulations peu différentes. Il reste donc encore un travail d'analyse important pour identifier les caractéristiques de ces écoulements, faire des tests sur des lingots différents pour éventuellement découvrir d'autres modes, et pouvoir ainsi définir des solutions de référence pour ensuite optimiser les maillages et les pas de temps en vue d'obtenir des solutions précises lors de l'application sur des cas industriels.

5.4. Macroségrégation et remaillage

L'objectif principal de ce travail est la prédiction de la macroségrégation. Ce travail a permis de valider l'implémentation des modules de macroségrégation par comparaison avec les résultats expérimentaux de la cavité Hebditch-Hunt. La nécessité d'avoir une taille de maille faible dans la zone pâteuse a ensuite conduit au développement d'une stratégie de remaillage adaptatif anisotrope. Grâce à ce module de remaillage, il est désormais possible de prédire la macroségrégation sur des lingots de taille industrielle. Différentes options ont été mises en place pour rendre plus performant le remaillage à la fois par le contrôle automatique du nombre d'éléments mais aussi par l'extraction de portions du maillage pour accélérer le calcul. L'ensemble de ces modifications en font une méthode très maniable et entièrement paramétrable mais cela induit une complexité importante. Une étude a donc été démarrée pour permettre de calculer automatiquement les paramètres du remaillage à partir des données du matériau, de la géométrie et des conditions aux limites. Les résultats d'une telle approche permettront de libérer l'utilisateur d'une étape de recherche empirique de ces paramètres et donc faciliter l'industrialisation de ce module de remaillage.

L'application du remaillage a donc permis d'observer la formation de la macroségrégation sur différents lingots mais comme on le précisait dans la discussion sur l'évolution de l'écoulement, le couplage fort des équations conduit à des instabilités qui peuvent entraîner localement des variations importantes dans la macroségrégation finale. Nous avons donc essayé au cours des différents essais d'identifier les raisons d'être de ces zones de ségrégation et leurs origines en écartant autant que possible les raisons numériques. Ainsi l'effet du maillage a été largement testé aussi bien en variant le nombre d'éléments pour établir une convergence des résultats qu'en utilisant un maillage fixe pour s'affranchir des éventuelles perturbations induites par le remaillage. Dans cette thèse, nous avons principalement étudié l'écoulement principal dans le bain liquide. Or l'écoulement qui se produit à l'intérieur de la zone pâteuse est aussi très important et contribue à la formation de la macroségrégation. Il serait donc nécessaire d'analyser aussi en détail ce type d'écoulement et son effet sur la macroségrégation. Nos conclusions concernant le lien entre l'écoulement principal et la macroségrégation négligent actuellement cet aspect ce qui nous impose de nuancer nos conclusions avant d'avoir approfondi ce point.

Les conclusions sont positives dans le sens où le code a montré une grande stabilité et a permis d'obtenir des résultats significatifs et de prédire des écoulements et des ségrégations sur différents lingots. Mais notre étude n'a pas permis actuellement d'établir une solution de référence pour les lingots de grandes dimensions. Ce travail a ouvert la voie à une analyse détaillée de la formation de la macroségrégation et des couplages entre les résolutions thermique, solutale et mécanique. Cette étude doit être poursuivie pour pouvoir tirer des conclusions plus précises et s'engager ensuite dans une étape d'optimisation du logiciel et des paramètres numériques à employer pour augmenter la qualité de la solution et le temps de calcul.

5.5. Perspectives

Les perspectives ouvertes par ce travail peuvent être classées en trois groupes qui pourraient correspondre à une évolution chronologique. La première étape serait constituée d'une analyse détaillée des résultats, de l'application d'un plan de validation et d'une étude de sensibilité. On obtiendrait ainsi une grande connaissance des capacités du code et une maîtrise des points clés à optimiser. Dans une deuxième étape, il serait intéressant d'améliorer quelques parties du logiciel qui ne nous satisfont pas complètement. Toutefois d'autres améliorations pourraient être nécessaires en regard des résultats précédents. Enfin lorsque le code sera efficace et optimisé pour la résolution de la macroségrégation, il sera temps de penser à l'ajout de nouveaux modules permettant d'affiner la modélisation de la solidification.

5.5.1. Application d'un plan de validation et d'étude de sensibilité

L'analyse des simulations sur différents lingots a montré que plusieurs points nécessitaient de nouveaux calculs pour valider nos conclusions. De plus il serait intéressant d'appliquer le logiciel sur d'autres lingots pour voir si les tendances sont les mêmes. D'autre part, des calculs sur des maillages très fins pourraient nous fournir des données sur la convergence de nos résultats avec le maillage. Ces tests sont très coûteux en temps de calcul mais eux seuls permettront de bien maîtriser les paramètres à introduire pour assurer la qualité de la solution. Cette étape de test sur différentes configurations peut s'inscrire dans le cadre d'un plan d'étude de validation mais aussi dans un plan d'étude de sensibilité.

Le premier plan a pour objectif de permettre une validation plus complète que celle menée au cours de ce travail. Les résultats actuels pouvant être complétés par de nombreuses autres comparaisons avec des résultats de la littérature et des solutions de référence comme nous l'avons vu à la fin du chapitre 1. Il serait aussi intéressant de mettre en place un benchmark en solidification à la fois en employant une expérience de référence mais aussi en établissant un cas test purement numérique dont nous avons vu les avantages. Les comparaisons entre différents logiciels et modèles fourniraient des éléments nouveaux pour identifier de possibles améliorations et les méthodes les plus performantes.

Le plan d'étude de la sensibilité permettra ensuite de déterminer les limitations du logiciel, de connaître l'influence des paramètres sur les zones de ségrégation, etc. Ces résultats pourront ensuite être employés de deux manières différentes. D'une part, la connaissance des sensibilités permettra de lier la précision des résultats à l'incertitude sur les paramètres matériaux ou les conditions aux limites qui sont difficiles à mesurer précisément. D'autre part cela peut conduire à une procédure d'optimisation du procédé en jouant sur les paramètres pour diminuer les macroségrégations ou les concentrer dans certaines zones, comme la masselotte par exemple.

5.5.2. Amélioration du logiciel

Un aspect qui n'a quasiment pas été abordé dans ce mémoire est le contrôle automatique du pas de temps. En effet, dans le code, il existe la possibilité de contrôler ce pas de temps sur un critère triple, dépendant de la variation locale de la température et de la fraction liquide mais aussi de la vitesse maximale dans l'écoulement. Cependant les différents tests menés sur cette méthode ont montré qu'elle n'était pas encore optimale. Il reste encore du travail pour identifier le pas de temps adéquat à chaque instant de la solidification pour

assurer la qualité des résultats, éviter les problèmes numériques et diminuer le temps de calcul. La méthode actuelle doit être améliorée car elle ne se combine pas très bien avec le remaillage. En effet il a été observé des variations rapides du pas de temps, très perturbatrices pour la solution mécanique, suite à des remaillages. La modification de la taille des éléments près de la paroi refroidie, due au déraffinement du maillage, induit des variations trop importantes de la température. Il conviendrait donc de modifier le calcul du nouveau pas de temps en considérant seulement les zones qui sont vraiment essentielles (comme la zone pâteuse par exemple) sans forcément se préoccuper des zones déjà solidifiées. Il ne s'agit là bien sûr que d'une piste mais le contrôle automatique du pas de temps pourrait permettre d'accélérer considérablement le calcul de la fin de solidification des lingots qui peut tolérer des pas de temps importants.

Le second aspect de cette étude qui pourrait être amélioré est la stratégie de remaillage. Même si elle a prouvé son efficacité, nous n'avons qu'ébauché le travail d'automatisation du calcul des paramètres. Cela mériterait d'être complété et validé. Mis à part cet aspect de définition des paramètres, il existe aussi deux points qui restent ouverts. Le premier point est l'application du contrôle automatique du nombre d'éléments sur les lingots cylindriques pour lesquels le volume de la zone pâteuse varie beaucoup. Il serait intéressant d'améliorer la définition du calcul du coefficient correctif pour prendre en compte cette évolution et obtenir ainsi une plus grande régularité dans l'évolution du maillage et des tailles de maille dans les zones critiques. En deuxième point, nous ne sommes pas complètement satisfaits de l'étape de déraffinement du maillage dans la partie solide. L'objectif de conservation des informations sur la macroségrégation était très pertinent pour les petits lingots mais sur les lingots industriels cela a été moins efficace. Plusieurs approches sont possibles, la première consisterait en l'application d'un critère sur le gradient thermique puisque dans cette zone solide c'est la seule équation réellement résolue. Mais il n'est pas sûr que cela soit efficace. La seconde approche consisterait à fixer le maillage dès que l'élément est solidifié, ou juste après sa solidification pour agrandir tout de même la taille de maille utilisée dans la zone pâteuse. Cela éviterait les phénomènes de lissage des résultats de macroségrégation mais cela conduirait aussi à avoir un plus grand nombre d'éléments ce qui ralentirait les calculs. A moins de ne plus résoudre les équations solutale et mécanique dans ce domaine qui serait traité différemment pour ne plus faire intervenir que la thermique.

Cela nous amène à discuter d'une autre idée qui consisterait à résoudre la ségrégation sur un maillage différent des autres, beaucoup plus fin. Si l'écoulement dans la zone pâteuse peut être approximé de manière suffisamment précise, cette méthode aurait l'avantage d'accélérer les calculs puisque la thermique et la mécanique peuvent utiliser des maillages plus grossiers et que la résolution du soluté est comparativement très rapide. Ce maillage, idéalement très fin partout n'aurait pas besoin d'être remaillé ce qui éviterait l'effet de lissage. Le problème est bien entendu d'introduire différents maillages dans notre logiciel en plus du stockage de ce maillage très fin. Cependant cette possibilité de résoudre les équations sur des maillages différents si les échelles des phénomènes sont différentes pourrait être une perspective à étudier même s'il s'agit d'une modification très lourde du code source.

5.5.3. Introduction de modules novateurs

L'évolution du logiciel THERCAST ne se fera sans doute pas uniquement en améliorant les performances numériques du code mais aussi et surtout par l'intégration de nouvelles possibilités de simulation pour approcher de plus en plus la réalité physique. Nous allons donc voir maintenant quels pourraient être ces nouveaux modules à intégrer.

Couplage avec des modèles de microségrégation plus avancés

Dans le présent travail, nous avons quasiment uniquement utilisé la loi des leviers comme modèle de microségrégation et ce pour les alliages binaires. Il est bien évident que ce modèle n'est pas général. Il paraît donc intéressant d'introduire de nouveaux modèles dans notre code, en commençant par le modèle de Scheil, mais aussi d'intégrer les travaux de Ludovic Thuinet effectués dans le cadre du projet OSC [THUINET, 2005], qui permettent de prendre en compte la transformation péritectique des aciers dans le cadre d'une approximation de type alliage ternaire mais aussi un couplage avec une base de données thermodynamiques comme THERMOCALC. L'utilisation d'un modèle plus complexe pourrait modifier de manière importante les résultats. Prenons l'exemple d'un modèle de microségrégation fournissant l'historique de la concentration dans un volume représentatif mais aussi l'évolution de l'espacement interdendritique. Ce modèle modifierait alors le calcul de la perméabilité à travers l'espacement interdendritique mais aussi les relations permettant de calculer la fraction liquide ou la concentration dans le liquide qui apparaissent dans nos équations macroscopiques. On s'orienterait alors simultanément vers la simulation des alliages multi-constitués qui sont utilisés industriellement. L'intégration de toutes ces améliorations conduirait à un code de macroségrégation plus général et plus à même de traiter des alliages industriels.

Prise en compte de la rhéologie du solide

Un aspect important dans la solidification des lingots est leur déformation au cours du refroidissement. Généralement le phénomène de retrait produit la formation d'une lame d'air entre la pièce et le moule et aussi d'une retassure sur la surface libre. La lame est particulièrement importante à simuler car elle modifie les conditions de transferts thermiques en supprimant le contact direct avec la lingotière. Cette diminution très importante du refroidissement en paroi ralentit la solidification. Cette modification n'est pas seulement locale mais est présente sur une bonne partie du lingot. La solution thermo-mécanique est donc très largement influencée par ce phénomène. Il existe actuellement une version de THERCAST qui simule ce retrait mais elle prend en compte principalement l'aspect thermique et n'est pas capable de simuler la macroségrégation. En effet, dans cette approche, on utilise une rhéologie du matériau qui n'est pas réaliste dans le liquide où la viscosité est très fortement augmentée pour atteindre jusqu'à 1000 Pa.s (certains calculs montrent qu'il serait éventuellement possible d'abaisser cette valeur à 10 Pa.s). Cette valeur ne permet alors pas de reproduire l'écoulement convectif qui se produit réellement. Cependant ces valeurs élevées sont nécessaires pour résoudre le problème en le traitant comme un seul domaine avec une loi rhéologique élasto-visco-plastique. Le traitement de la zone pâteuse induisant des variations très rapides de la viscosité, pour des raisons numériques, il faut diminuer cet écart entre la rhéologie du solide et du liquide.

Ainsi actuellement deux approches sont possibles avec THERCAST, d'une part une simulation lagrangienne et ALE, comprenant la déformation du solide et la formation de la

lame d'air, prenant en compte la rhéologie correcte du solide, et d'autre part l'approche eulérienne de simulation de la macroségrégation présentée dans ce travail, utilisant une représentation par un fluide newtonien s'écoulant dans un milieu poreux. L'objectif de ce module serait donc de regrouper ces deux approches pour tirer avantage des deux approches et produire une simulation plus complète et plus réaliste. Au cours de cette thèse, nous avons commencé à mettre en place une stratégie qui consisterait à effectuer deux résolutions séparées sur un maillage identique. La Figure 5-1 présente sommairement cette méthode en deux étapes. Un premier calcul, qui est en fait la simulation thermo-mécanique actuelle, permet de prédire la déformation globale de la pièce et fournit les conditions aux limites pour le domaine liquide+pâteux. Le deuxième calcul, qui est le type de simulation présenté dans cette thèse, utilise un fluide newtonien et un milieu poreux. Toutefois cette résolution n'est effectuée que dans le domaine liquide+pâteux, partout ailleurs la vitesse est imposée par le calcul précédent.

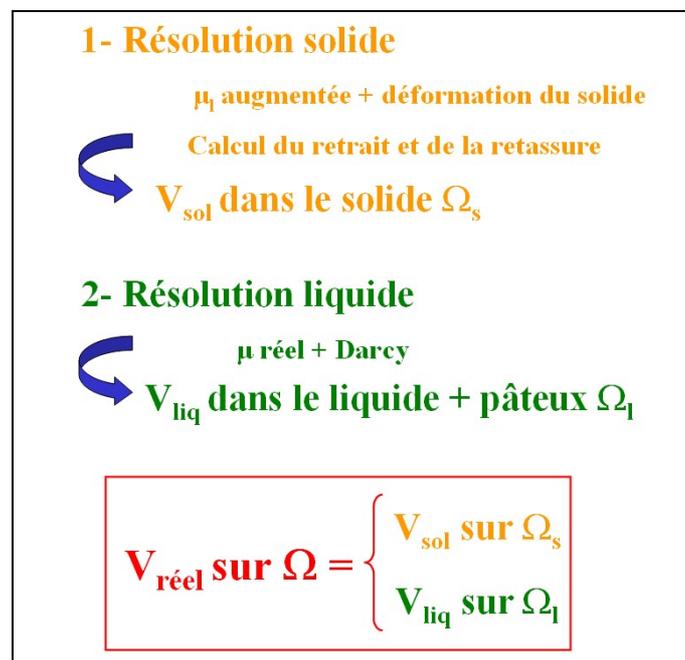


Figure 5-1 : Schéma de résolution en deux temps pour le calcul de la vitesse

On obtient alors un second champ de vitesse qui combiné au premier nous permet d'avoir une estimation beaucoup plus réaliste de l'écoulement tout en découplant les résolutions à des viscosités et des vitesses très différentes. Malheureusement, l'implémentation complète de cette méthode n'a pas pu être terminée. Cette idée mériterait d'être approfondie et testée pour vérifier sa faisabilité et ses performances. Etant donné que le couplage avec la déformation du solide est essentiel pour améliorer nos résultats, l'introduction de cette résolution en deux temps offrirait des perspectives très intéressantes pour une augmentation du temps de calcul assez faible. En effet la résolution de la mécanique non-linéaire due à la loi de comportement élasto-visco-plastique du matériau est beaucoup plus coûteuse que la résolution additionnelle de la mécanique du fluide newtonien (qui reste, elle, linéaire).

Une étape encore plus lointaine serait une résolution sur des maillages différents puisque l'on a vu que la résolution de la macroségrégation exige une finesse du maillage importante, il n'est pas nécessaire de résoudre aussi la mécanique non-linéaire sur un tel maillage. Cette résolution pouvant utiliser des tailles de maille beaucoup plus importantes, on

gagnerait ainsi un temps de calcul très significatif mais au prix de devoir résoudre les problèmes de raccordement des solutions ou d'interpolation entre nos différents maillages.

Couplage avec le remplissage

Une des hypothèses fortes de nos simulations est que le métal liquide est initialement à température homogène légèrement au-dessus du liquidus. Or, dans le procédé industriel les moules sont remplis en chute ou en source. Cette étape de remplissage conduit à la solidification de la première peau mais aussi souvent d'une fraction non négligeable de la masse totale du lingot (jusqu'à 20% voire 30%). L'absence de cette première solidification dans nos simulations a sans doute un effet sur la formation de l'écoulement et donc sur la macroségrégation finale. La simulation du remplissage est déjà largement intégrée dans la version commerciale de THERCAST. Il serait judicieux d'arriver à fusionner ces deux calculs en particulier si l'on souhaite ensuite étendre les cas d'application sur la macroségrégation de THERCAST à des pièces aux géométries très complexes.

Modélisation diphasique

Certains types de ségrégation ne pourront pas être simulés avec le modèle actuel en particulier les ségrégations dues à la déformation du solide puisque notre modèle impose le solide fixe. Il est toutefois possible de modifier notre modèle pour simuler de tels défauts. La suppression de l'hypothèse du solide fixe dans la zone pâteuse conduit alors à la résolution des vitesses dans le liquide et dans le solide. Le modèle devient alors diphasique en distinguant la résolution dans les deux phases, tout au moins au niveau de la mécanique. On peut en effet considérer que les équations de la thermique et du soluté peuvent être résolues, avec un terme de température unique et une valeur moyenne de la concentration, en considérant les équations bilan par prise de moyenne. On obtient ainsi une équation supplémentaire pour la mécanique. Toutefois contrairement à l'approche présentée précédemment pour prendre en compte la rhéologie du solide, il est ici nécessaire de résoudre ces équations mécaniques sur les deux phases simultanément car elles sont très fortement couplées. Cette approche diphasique de la zone pâteuse a déjà été implémentée et testée dans R2SOL par M. Bellet, S. Le Corre et V. Fachinotti [BELLET, 2004b] pour l'application au procédé de coulée continue, dans lequel les déformations de la zone pâteuse sont suffisantes pour modifier les macroségrégations. Cependant le passage du 2D au 3D conduirait à une augmentation très importante des temps de calcul et il pourrait être pertinent de continuer d'améliorer ce modèle en 2D avant de penser à l'introduire dans un solveur 3D.

Modélisation de la solidification équiaxe

La dernière perspective que nous aborderons est la résolution de la solidification équiaxe. Lors de la solidification d'un lingot des morceaux de dendrites peuvent se détacher de la paroi et être entraînés par l'écoulement ce qui conduit à la formation de grains dans le liquide. Mais ils peuvent aussi se former spontanément en avant du front de solidification autour de germes par exemple. D'ailleurs pour certains alliages on ensemence le métal liquide en germes pour renforcer cette solidification équiaxe. La croissance et le transport de ces grains modifient considérablement les cartes de macroségrégation car la sédimentation des grains conduit à une ségrégation négative. La simulation de cet aspect est très complexe car il n'est pas physiquement possible de résoudre les trajectoires de chacun des grains dans un lingot de taille industrielle, même si des travaux existent sur ce sujet en utilisant les automates cellulaires pour des pièces de plus petite taille (cf. [GUILLEMOT, 2004]). Il est donc

nécessaire de prendre des moyennes et de gérer des densités de grains. Cette approche a déjà été introduite dans le logiciel SOLID dans le cadre de la thèse de Boubeker Rabia [RABIA, 2004]. Ce modèle est lui aussi assez coûteux en temps de calcul et la maîtrise des paramètres de ce modèle ne sont pas encore parfaits. En effet l'introduction de module innovant nécessite forcément une étape de calibrage et de compréhension des résultats numériques pour produire ensuite des interprétations efficaces. Mais à plus long terme, il sera nécessaire d'introduire cette approche dans THERCAST ainsi qu'un modèle permettant de gérer la transition entre la solidification colonnaire et la solidification équiaxe.

Ces différents exemples de nouveaux modèles à intégrer dans THERCAST montrent bien la richesse du phénomène de solidification. L'interaction entre différentes échelles et entre des domaines de la physique aussi différents que la thermique et la formation des structures de solidification en font un problème complexe qui est loin d'être maîtrisé. Toutefois la simulation progresse et petit à petit les modèles sont aptes à reproduire de manière plus réaliste les résultats observés. Ce type de logiciel devrait aussi permettre d'améliorer les procédés industriels grâce à une meilleure compréhension des processus en jeu et aussi par la possibilité de tester de nombreuses configurations à moindre coût.

ANNEXE A

Analyse du choc thermique en début de solidification

Description du cas test :

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot et d'un moule cylindriques (Figure 1). Le lingot est refroidi uniquement par le moule, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule est en contact avec l'air extérieur et est refroidi par convection naturelle uniformément sur toutes ses faces. La section simulée est de 30 degrés et est bornée par deux plans de symétries. Le lingot et le moule sont initialement à des températures uniformes respectivement 1515°C et 250°C. Les caractéristiques du lingot et du moule sont présentées dans le Tableau 1 et le Tableau 2.

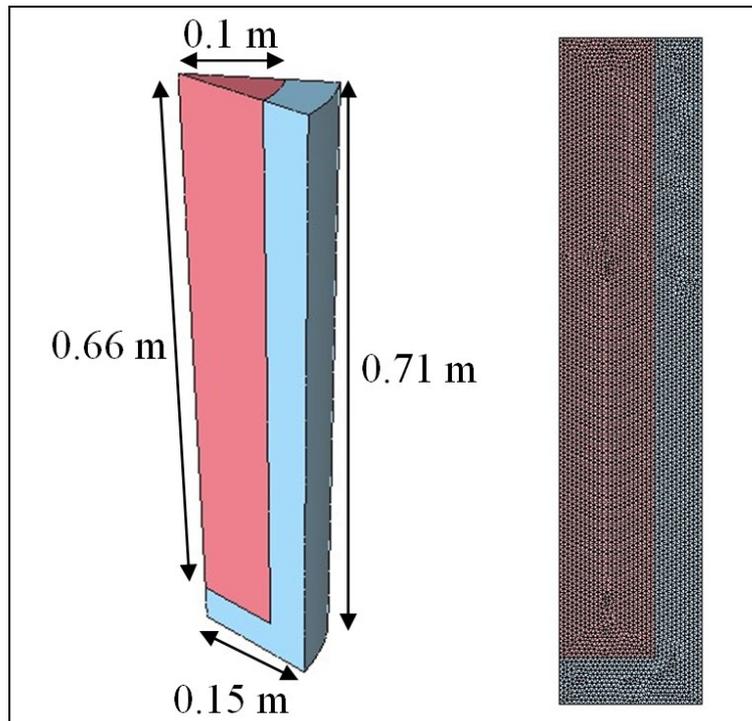


Figure 1 : Schéma du lingot et du moule et maillage initial

La Figure 1 présente aussi le maillage du moule et du lingot. Ces maillages sont uniformes avec une taille de maille imposée de 0.005m lors de la génération du maillage par GAMBIT. On obtient ainsi un maillage comprenant 93932 éléments. Ce maillage va servir de maillage standard pour les calculs qui suivent parce qu'il représente bien un maillage uniforme et fin qui pourrait être employé de manière standard dans un calcul. Ainsi en employant ce maillage nous pourrions étudier les différents problèmes qui pourraient survenir lors d'autres calculs sur des lingots.

L'objectif premier de cette étude est de montrer le choc thermique, l'amélioration des résultats par l'utilisation de la méthode Condsplit et les effets du maillage et du remaillage. Dans cette optique nous évaluerons et comparerons les résultats dans le plan Oxz par des visualisations des champs de vitesse et de température et aussi par des informations provenant de la section centrale horizontale perpendiculaire à ce même plan. A l'aide de capteurs nous étudierons aussi les courbes d'évolution de la température ou de la vitesse en fonction de x mais aussi l'évolution temporelle sur un capteur. Ces informations devraient nous permettre d'avoir une vue globale du phénomène et de sa résolution numérique.

Tableau 1 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 500 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion T_{ls} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1515 °C |
| Transfert thermique avec le moule | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |

Tableau 2 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Illustration du problème de choc thermique

L'effet du choc thermique affecte principalement le lingot du fait de la solidification et n'est donc pas très important dans le moule pour ce cas test comme l'illustre la Figure 2 qui montre le champ de température à un moment critique pour le moule soit t=4s. En effet il n'apparaît d'oscillations de la température directement en retrait de la paroi en contact avec le lingot contrairement à ce que l'on observe pour le lingot. Ce résultat a été obtenu lors d'une résolution en enthalpie sans condsplit.

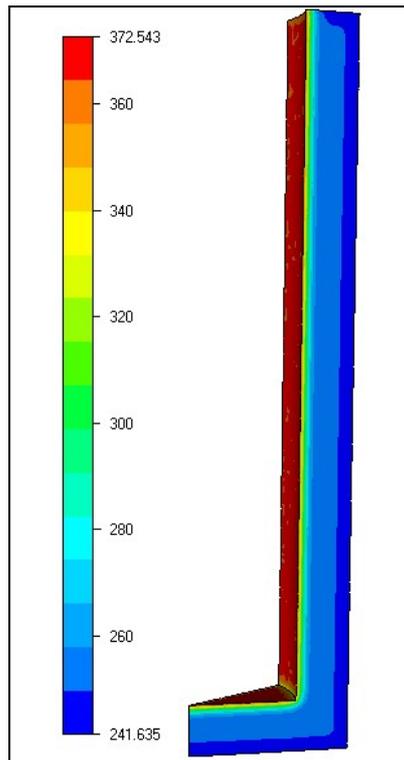


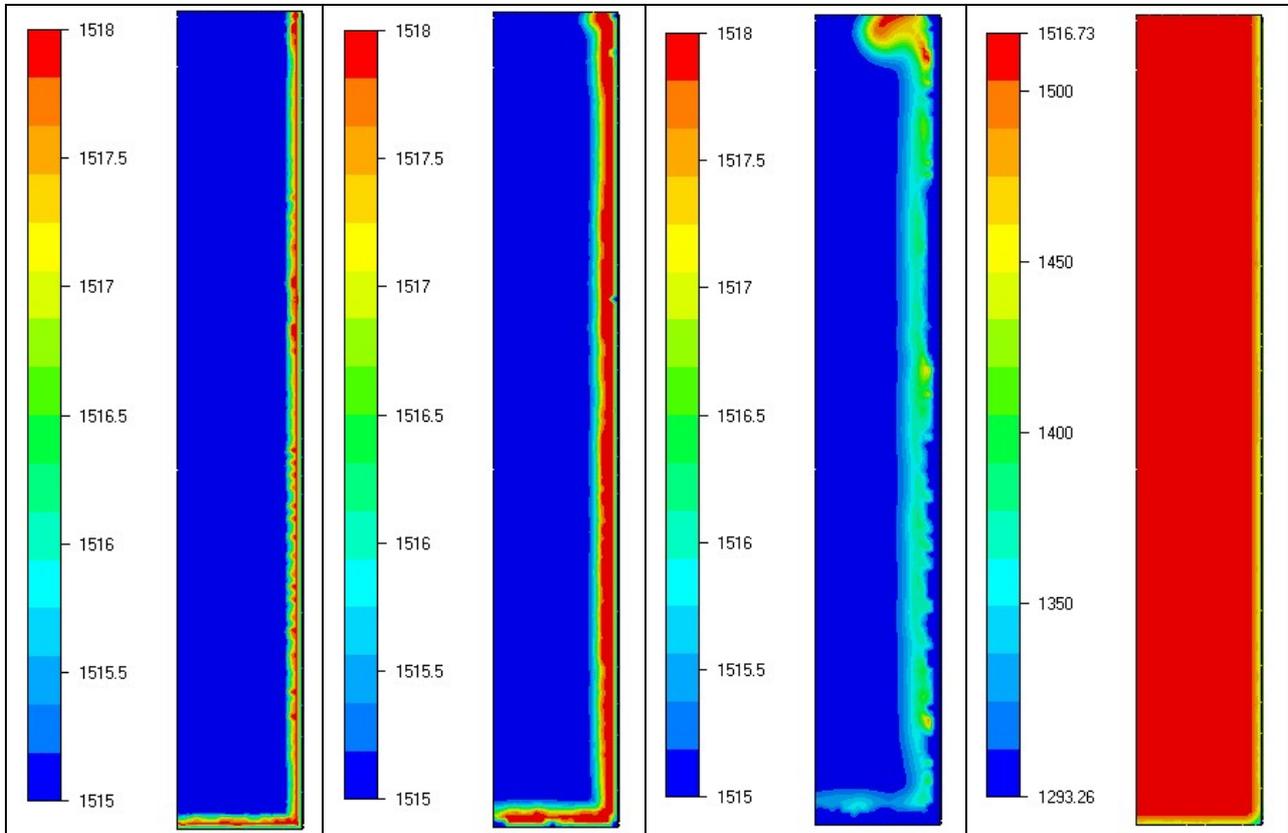
Figure 2 : Champ de température (en °C) dans le moule après 4s de refroidissement

Pour illustrer le problème du choc thermique et l'analyser on peut se limiter aux premières 20s de refroidissement pour ce cas test. Le premier calcul présenté sur la Figure 3 est réalisé en utilisant la résolution en enthalpie avec un pas de temps fixé à 0.25s et sans utiliser la méthode condsplit. Pour mieux visualiser l'effet du choc thermique les échelles de température ont été modifiées pour ne visualiser que les dépassements de température par rapport à la température initiale de 1515°C pour $t=1s$, 4s et 10s. Ces premiers résultats montrent déjà que le choc thermique initial se renforce avec la solidification de la peau en contact avec le moule et que l'effet de l'écoulement n'est pas négligeable puisque que l'on peut voir une déformation des isothermes en haut du lingot pour $t=4s$. A partir de $t=20s$ le choc thermique est quasiment absorbé comme le montrent les résultats de la Figure 3.

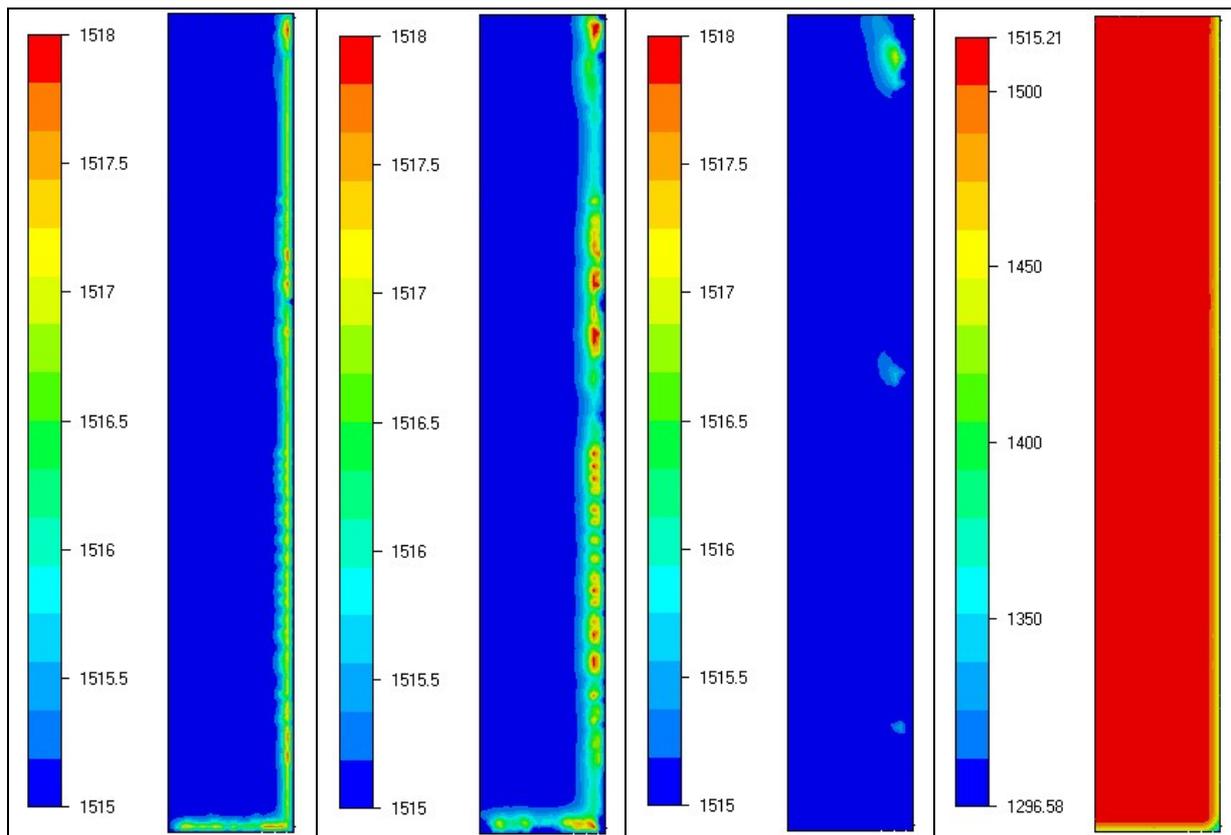
Les résultats obtenus en utilisant la méthode condsplit sont globalement similaires (cf. Figure 4) mais l'amplitude du choc est bien inférieure puisqu'il est déjà quasiment absorbé à $t=10s$. La méthode condsplit limite par défaut le dépassement en température à 0.1°C lors du calcul du pas de temps critique. Une autre manière de voir l'effet de la méthode condsplit sur la réduction du choc thermique est de visualiser l'évolution de la température maximale dans le lingot. La Figure 5 présente ainsi ces résultats pour trois calculs. Les trois calculs sont des résolutions en enthalpie, le premier n'utilise pas condsplit, le second l'utilise et le dernier est effectué en utilisant un pas de temps variable qui cherche à maintenir la variation maximale de température entre 3 et 6°C en tout point de la pièce entre deux incréments. Ces courbes de température maximale montrent que l'utilisation de la méthode condsplit permet de diminuer considérablement l'effet du choc thermique. D'autre part on peut noter que lors du premier pas de temps le choc thermique est négligeable, mais avec la solidification le choc prend de l'importance. Cet exemple montre ainsi une des faiblesses dans l'application de la méthode condsplit qui traite bien le refroidissement initial mais ne prend pas suffisamment en compte l'effet induit par la solidification. Ces courbes nous permettent aussi de montrer que

l'évolution de la température est identique lorsque l'on utilise le calcul automatique du pas de temps ou le calcul avec un pas de temps constant.

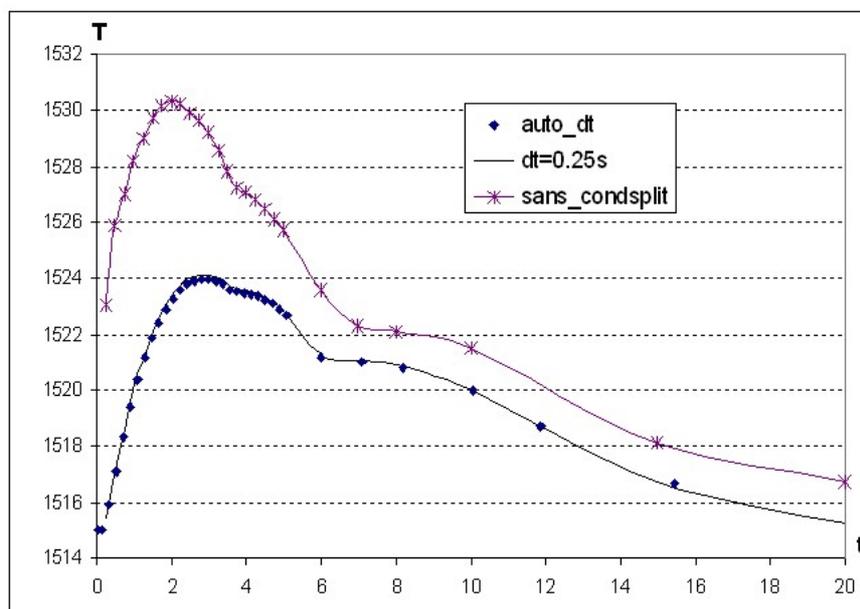
De plus lorsque l'on change le pas de temps, les résultats sont aussi similaires (Figure 6). Toutefois l'amplitude du choc thermique est légèrement supérieure lorsque l'on diminue le pas de temps, conformément aux attentes.



**Figure 3 : Evolution de la température (en °C) dans le lingot (à t=1s, 4s, 10s et 20s),
résolution en enthalpie sans condsplit**



**Figure 4 : Evolution de la température (en °C) dans le lingot (à t=1s, 4s, 10s et 20s),
résolution en enthalpie avec condsplit**



**Figure 5 : Evolution de la température maximale (en °C) dans le lingot avec et sans
condsplit et avec le pas de temps automatique**

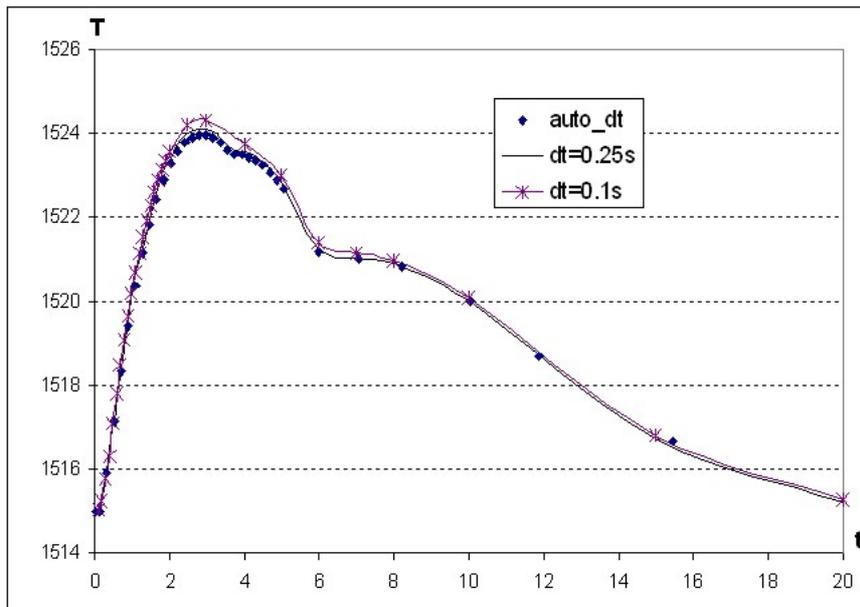


Figure 6 : Evolution de la température maximale (en °C) dans le lingot avec dt=0.25s, dt=0.1s et avec le pas de temps automatique

Si l'on effectue le même calcul mais en baissant le point de fusion de l'alliage de 300°C, la solidification ne va pas se déclencher aussi tôt et on pourra ainsi voir si le traitement du choc thermique est bien perturbé par l'apparition de la solidification. La Figure 7 montre ainsi l'évolution de la température maximale de la pièce au cours des premières secondes qui sont les plus critiques dans le calcul précédent (cf. Figure 5). Le choc thermique est complètement négligeable dans ce calcul tout au moins au début du refroidissement, ensuite on peut noter une légère augmentation de la température. Cependant cette augmentation ne correspond pas vraiment à un choc thermique mais plutôt à un problème de discrétisation dans le coin supérieur extérieur. En effet lorsque l'on visualise le champ de température (Figure 8), on remarque que les isothermes sont régulières et qu'une perturbation apparaît seulement en haut à droite. Cette perturbation est positionnée à l'intérieur du coin supérieur et correspond à une à deux épaisseurs d'éléments. Or cette zone est critique puisque c'est là que l'écoulement change de direction et commence à prendre de la vitesse et d'autre part la partie supérieure est adiabatique alors que le flux sur les faces en contact avec le moule est assez important. On peut donc raisonnablement supposer que la perturbation observée ici vient de la combinaison de ces deux problèmes.

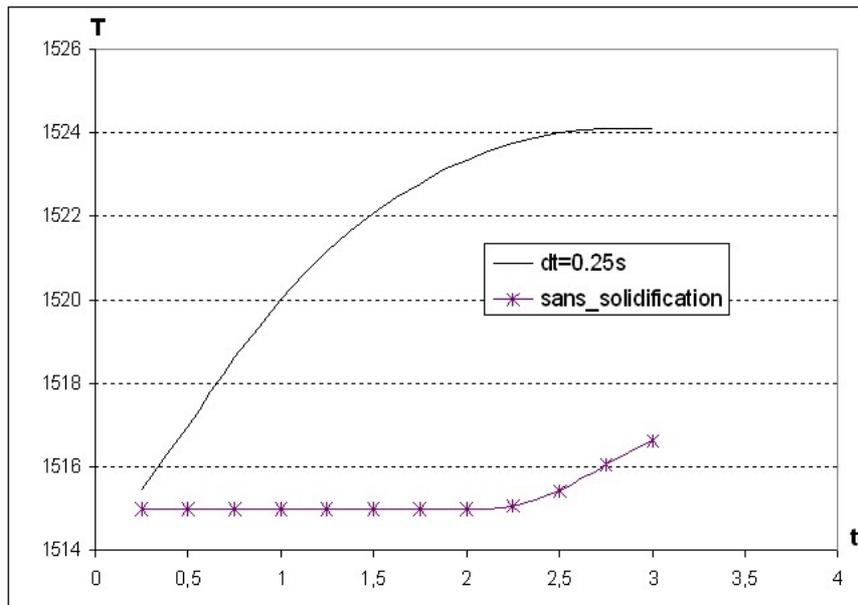


Figure 7 : Evolution de la température maximale (en °C) dans le lingot, comparaison avec et sans solidification (méthode condsplit)

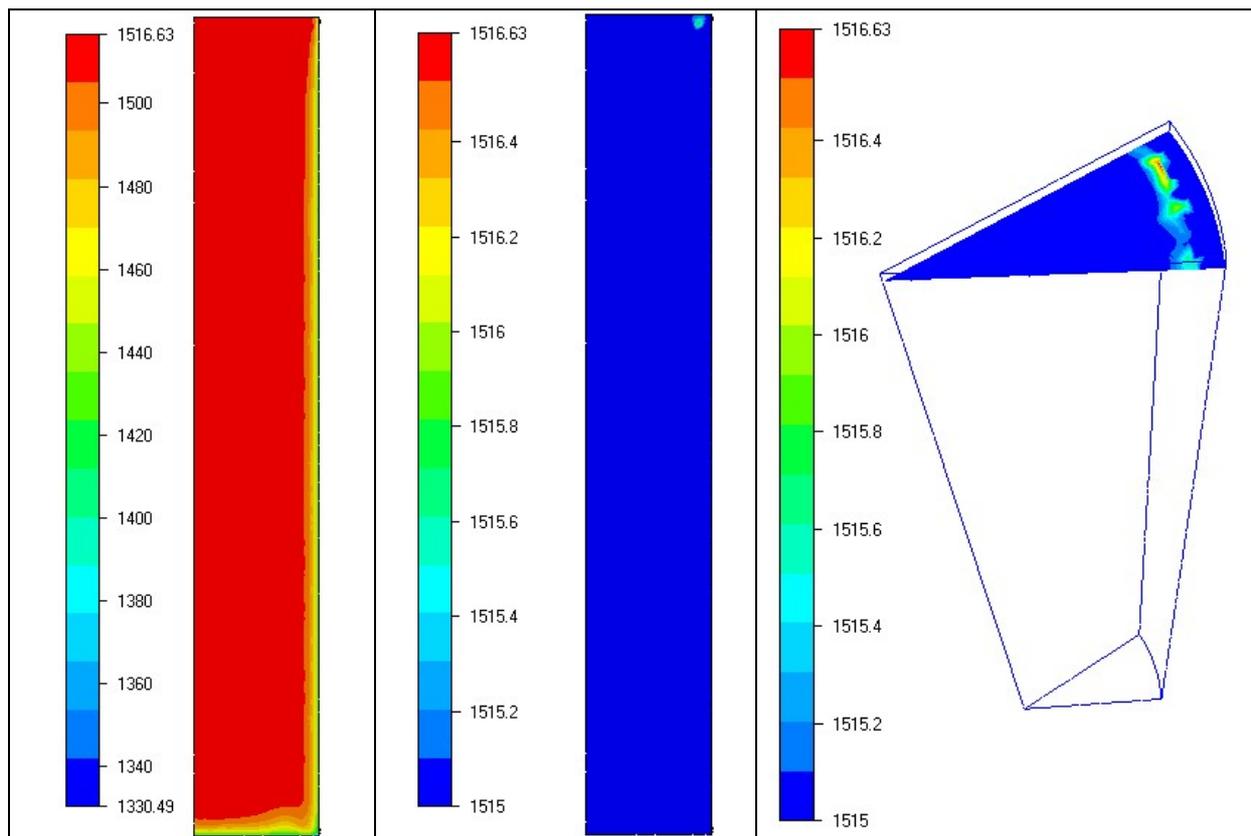


Figure 8 : Champ de température (en °C) et position de la température maximale pour le calcul sans solidification

Effet du choc thermique sur l'écoulement

L'autre aspect important concernant le choc thermique est son effet sur l'écoulement. Ainsi lorsque l'on visualise la vitesse verticale, on détecte un courant ascensionnel près de la paroi qui est induit par le choc thermique. En effet l'épaisseur surchauffée à proximité de la paroi génère un mouvement d'ensemble du liquide. La Figure 9 illustre cet effet pour le calcul avec condsplit et pas de temps constant. L'établissement normal de l'écoulement est donc largement modifié par l'apparition du choc thermique. Près de la paroi la vitesse verticale reste longtemps positive et ne s'inverse que vers les 20s. La formation de la couche limite va donc démarrer seulement à partir de cet instant où la thermique s'est stabilisée. On obtiendra ainsi une solution en vitesse décalée temporellement par rapport à la solution physique.

Analyse de la section centrale

L'évolution temporelle de la température et de la vitesse sur la section centrale prise à mi-hauteur dans le plan Oxz donne une image plus précise du choc thermique et aussi plus quantitative. Le choix de la section centrale est justifié principalement par le fait que cette zone n'est pas perturbée par les effets des surfaces inférieures et supérieures qui imposent une courbure des isothermes ou de l'écoulement. L'analyse de cette zone devrait donc en être facilitée.

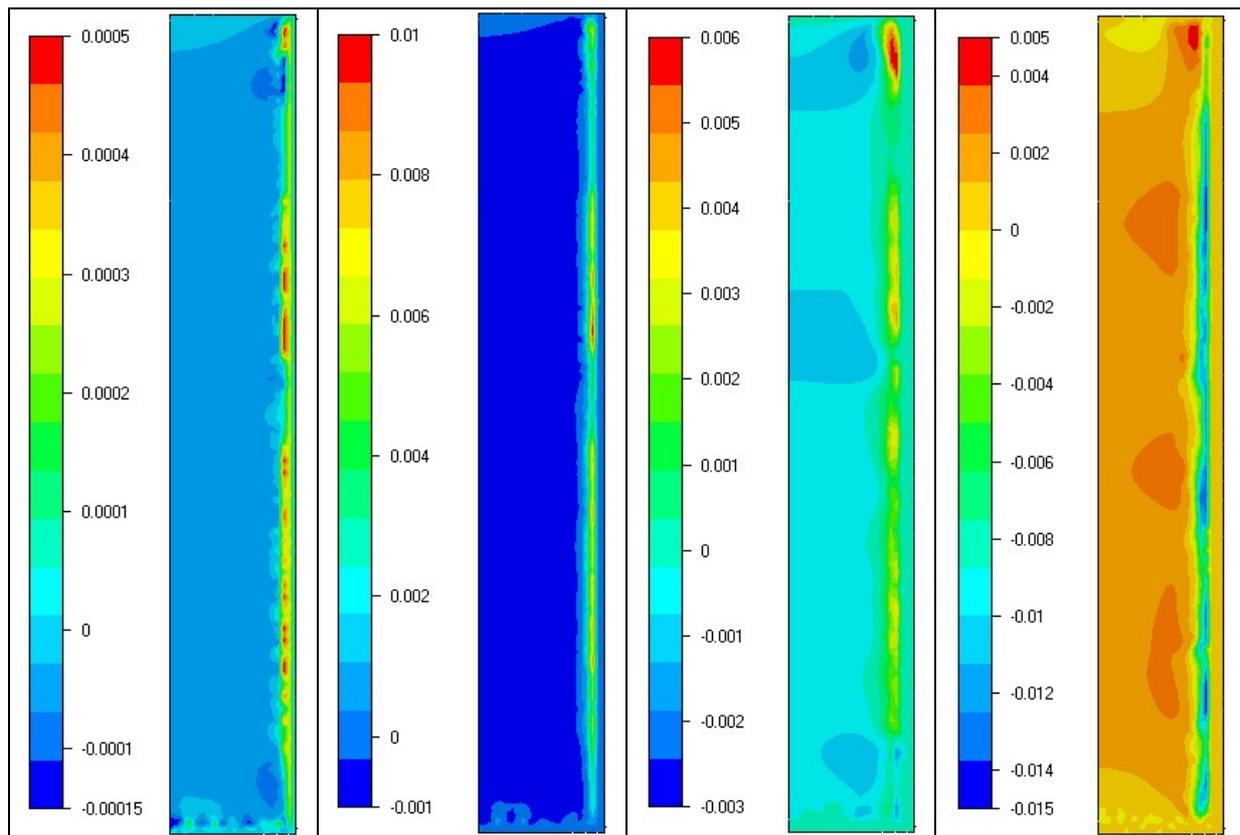


Figure 9 : Vitesse verticale (en m/s) dans le lingot à t=1s, 4s, 10s et 20s en utilisant condsplit et un pas de temps constant

L'analyse des informations sur cette section (Figure 10) pour les premières secondes de refroidissement montre un accroissement du choc thermique et son décalage du à la solidification. Les courbes de vitesse suivent la même évolution avec un temps de retard qui

provient de l'inertie du fluide. Si l'écoulement est d'abord bien orienté vers le bas la tendance s'inverse rapidement, après 0.75s soit au troisième incrément du calcul. L'effet de la diffusion thermique est aussi notable sur la courbe de température à 3s, pour laquelle le plateau de vitesse maximale est notablement plus large que pour les temps précédents. En effet le pic de température due au choc température n'a pas seulement augmenté ponctuellement mais a aussi réchauffé les nœuds voisins par diffusion de la chaleur.

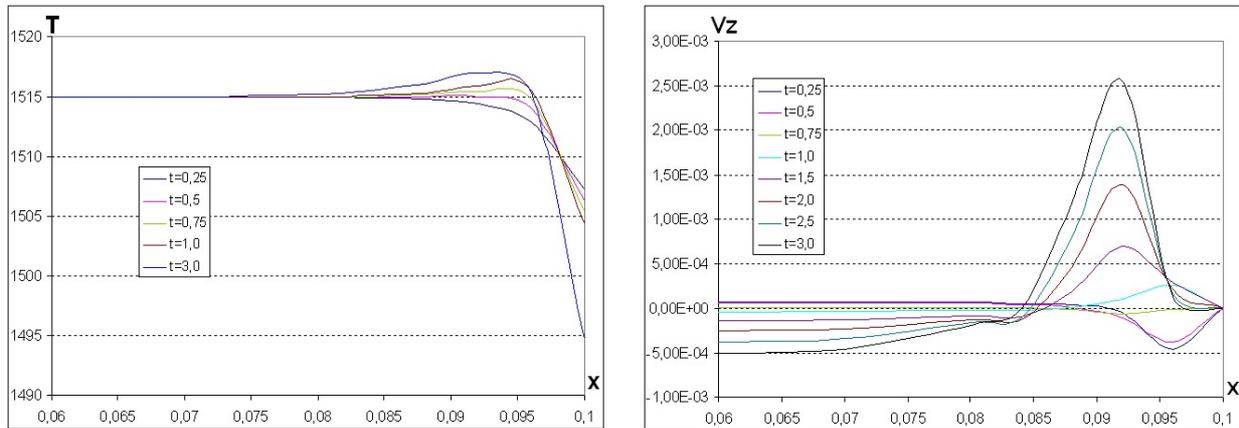


Figure 10 : Courbes de température (en °C) et de vitesse verticale (en m/s) sur la section centrale

L'ensemble des données présentées jusqu'à présent a permis de voir les différents aspects du choc thermique et de quantifier son effet à partir des données disponibles pour notre lingot. Ces informations nous ont déjà permis de montrer l'amélioration des résultats par la méthode condsplit mais aussi sa limitation pour les cas de solidification. Maintenant il convient d'observer plus finement l'effet du maillage à travers deux approches. La première a consisté à raffiner le maillage de manière anisotrope près de la paroi verticale en augmentant le nombre d'éléments dans l'épaisseur de la couche limite thermique et dynamique (à l'exception de la partie basse en contact avec le moule qui n'a pas été raffinée ce qui diminue la pertinence des comparaisons sur les températures maximales puisque le choc thermique dans cette zone restera inchangé). La deuxième approche consiste en l'application de la méthode de remaillage automatique.

Raffinement du maillage

Le maillage fin a été généré en imposant dans une épaisseur de 0.02m, une taille de maille anisotrope égale à (0.002 m ; 0.002 m ; 0.005 m) qui sont les valeurs dans les directions x, y et z. Ce nouveau maillage comporte 317903 éléments. L'utilisation d'un maillage plus fin près de la paroi améliore la capture du choc thermique, il ne subsiste alors un problème qu'à proximité de la paroi inférieure non remaillée. Dans cette simulation, nous appliquons la résolution en enthalpie avec condsplit qui est notre résolution par défaut. La Figure 11 présente le nouveau maillage utilisé, les températures et les vitesses à 4s et le champ de température à 20s. Dans ce calcul la perturbation du champ de température n'apparaissant qu'au pied du lingot cela n'affecte que peu l'écoulement qui est alors prédit de manière correcte. Ce nouveau maillage va nous servir de référence pour les prochaines comparaisons.

La méthode de remaillage automatique présentée dans le chapitre 3 permet aussi une amélioration notable des résultats. Le remaillage est déclenché à partir du 20^{ème} incrément, le

nombre d'éléments objectifs est de 200000 mais lors des premiers remaillages on va largement dépasser ce nombre avant d'arriver à une certaine stabilisation une fois que la zone pâteuse n'occupera pas la majeure partie du domaine. En effet pour conserver un maillage fin on a limité le coefficient multiplicatif de maille à 2. Ainsi les maillages comportent à 10s 299955 éléments et à 20s 301431 éléments (Figure 12). L'adaptation du maillage a conduit à un raffinement prononcé dans les zones soumises initialement au choc thermique, on peut aussi noter l'épaississement de la zone raffinée entre 10 et 20s qui est due à l'agrandissement de la zone pâteuse et à l'évolution de l'écoulement qui devient plus prononcé et donc avec des gradients plus importants en particulier au pied du lingot.

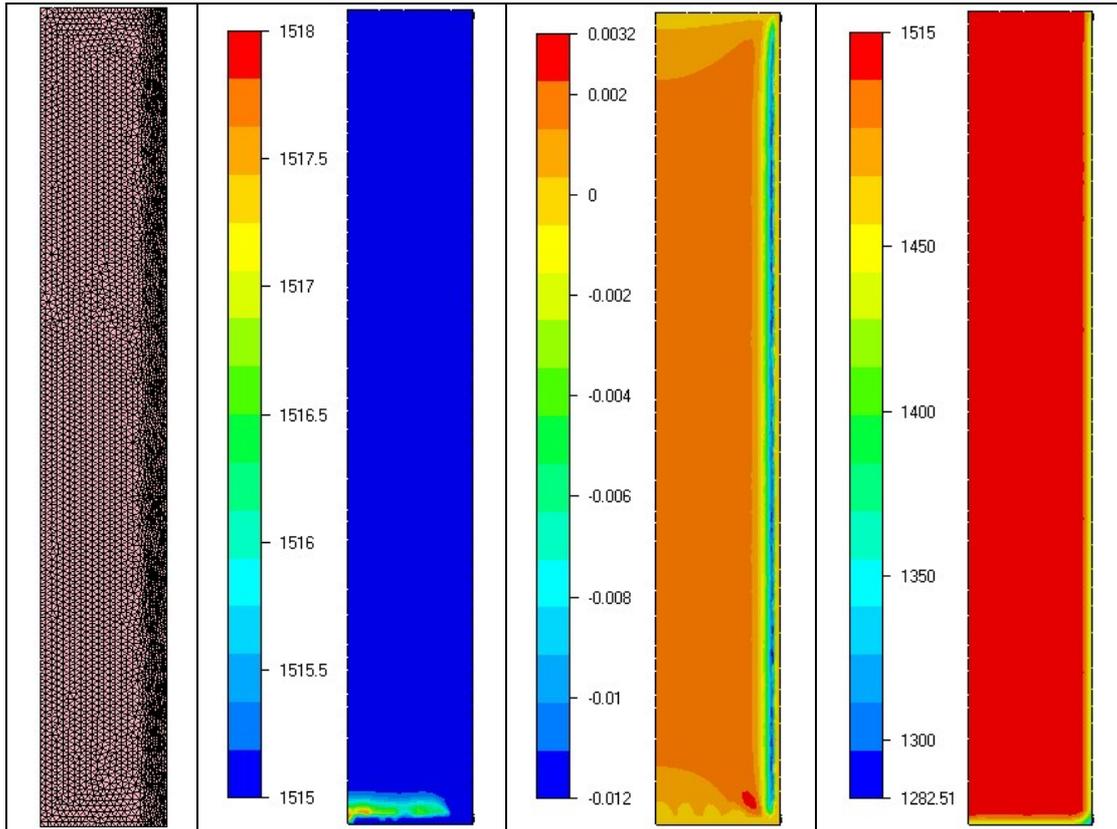


Figure 11 : Maillage anisotrope et raffiné à la paroi, température et vitesse verticale (en m/s) à t=4s et température (en °C) à t=20s

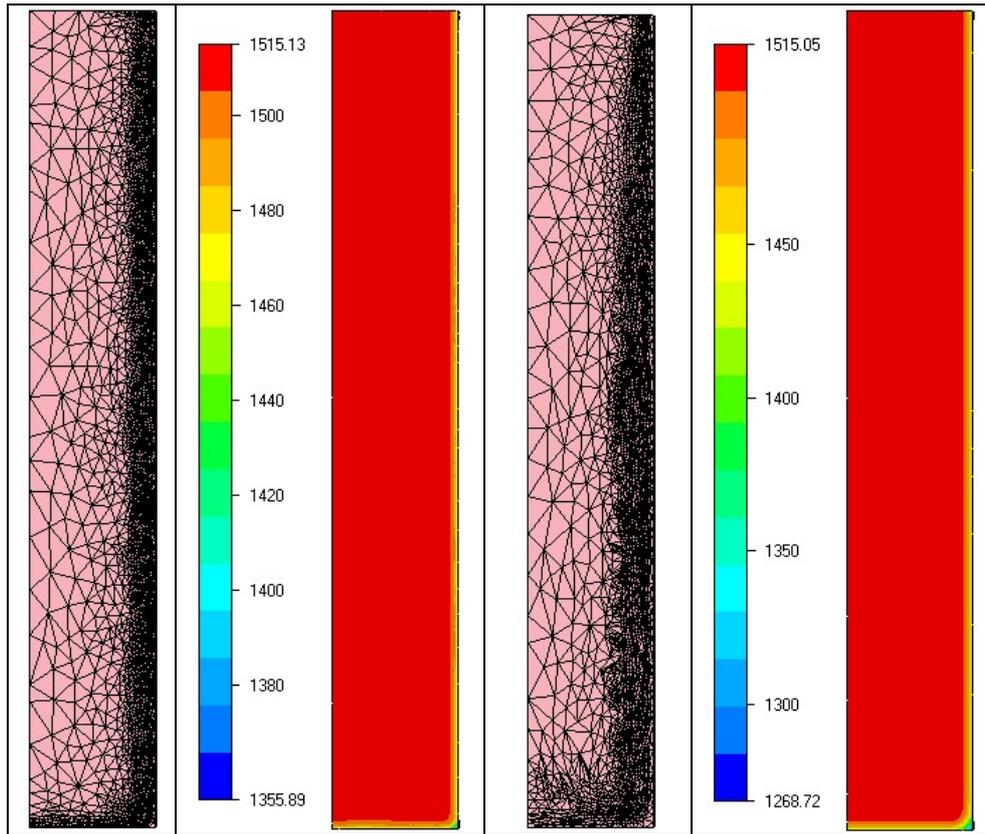


Figure 12 : Maillage adapté et température (en °C) à t=10s et 20 s

Comme indiqué Figure 13, le choc thermique n'est plus visible dès 10s mais on avait noté que déjà avec l'application de la méthode condsplit l'importance du choc thermique était faible à 10s. Ainsi pour mieux percevoir l'effet du remaillage et du maillage fin on se reporte à l'évolution de la température minimale et maximale. En effet l'étude de l'évolution de la température minimale nous donnera une information sur l'effet de la discrétisation sur la prédiction de la température dans le coin inférieur droit.

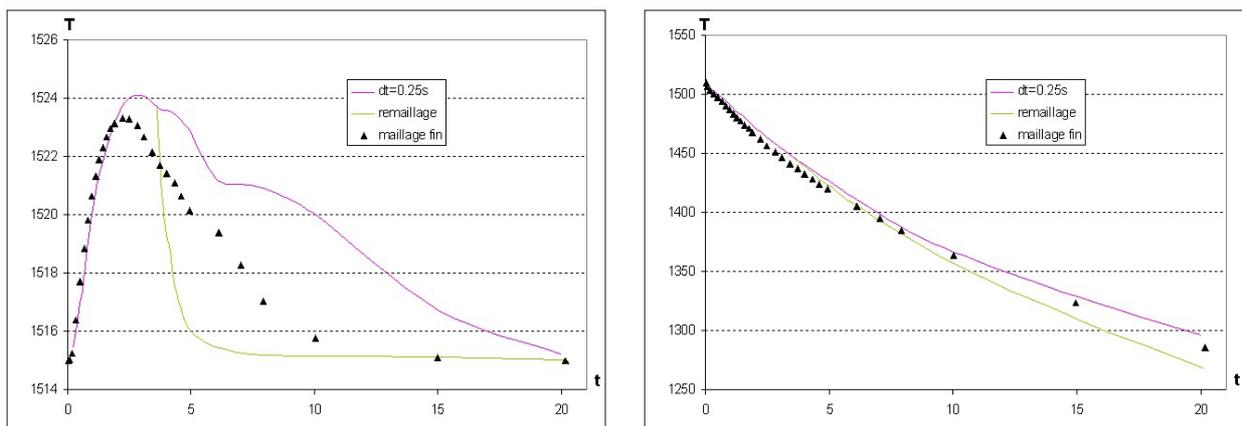


Figure 13 : Courbes des températures maximales et minimales (en °C) pour le maillage initial, le maillage adapté et le maillage fin sur la paroi verticale

Les courbes de la Figure 13 justifient pleinement l'utilisation du remaillage pour limiter l'effet du choc thermique même lorsqu'il est déjà initié. En effet au bout de 4 secondes de refroidissement après le début du remaillage, le choc thermique est complètement absorbé

(cf. Figure 13-a). Par contre le maillage fin subit l'influence de la paroi inférieure et le choc thermique apparaît bien mais on peut noter qu'il est tout de même plus faible que dans le cas standard. Il apparaît donc que le choc thermique est plus fort près de la paroi verticale et très certainement à proximité du coin inférieur qui est la partie la plus refroidie. La courbe des températures minimales montre d'autre part que le raffinement du maillage conduit à une diminution de la température la plus basse. Le maillage adapté ayant les éléments les plus petits dans le coin inférieur c'est bien lui qui prédit la température la plus basse. Cette tendance montre que logiquement lorsque les éléments sont trop grands ont sous-estime le refroidissement de plusieurs dizaines de degrés dans les régions les plus sensibles.

La comparaison des différentes méthodes peut aussi être réalisée à $t=10s$ sur la section centrale horizontale. Les courbes de la Figure 14 montrent alors que les courbes de température du maillage fin et du remaillage sont en bon accord et qu'il y a un léger décalage par rapport au maillage initial. Les courbes de vitesse comportent de gros écarts. La tendance est bonne pour avec le remaillage puisque l'on a bien une vitesse verticale négative près de la paroi mais l'amplitude est trop faible ce qui illustre bien que la mise en place de la couche limite a été retardée par le choc thermique. La situation est encore plus critique sur le maillage initial pour lequel l'écoulement ne s'est pas encore inversé.

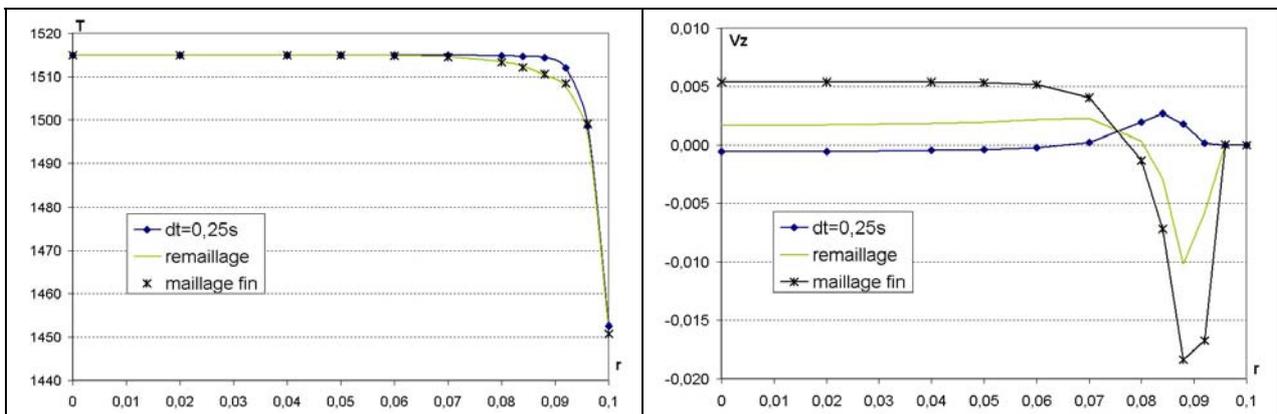


Figure 14 : Courbes de température (en °C) et de vitesse verticale (en m/s) sur la section centrale horizontale à $t=10s$ sur le maillage initial, le maillage fin et avec remaillage

Analyse de l'évolution de la vitesse et de la température en un point

Nous avons vu précédemment que les résultats avec remaillage étaient proches de ceux obtenus sur le maillage malgré un déclenchement du remaillage en plein choc thermique. Pour vérifier comment évoluent la température et la vitesse localement, nous avons sélectionné le point de coordonnées (0.088 ; 0 ; 0.33). Ce point a été sélectionné car il s'agit de notre capteur qui est le plus proche du pic de vitesse observé sur la Figure 14 pour la solution sur le maillage fin. Les courbes de la Figure 15 présentent l'évolution de la température et de la vitesse verticale en ce point pour nos trois maillages.

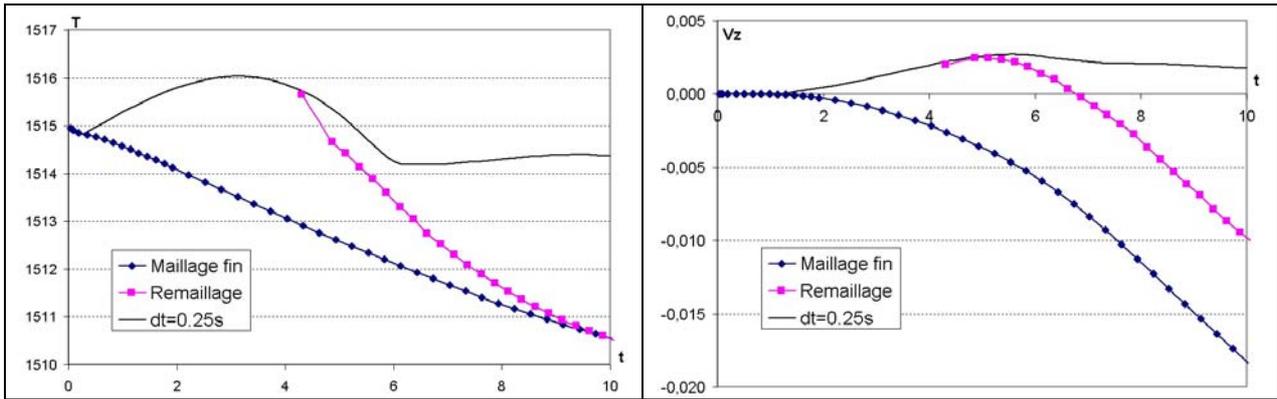


Figure 15 : Evolution de la température (en °C) et de la vitesse verticale (en m/s) au point (0.088 ; 0 ; 0.33) pour le maillage initial, le maillage fin et avec remaillage

Ces résultats amènent plusieurs conclusions : d'une part l'écoulement faussé, qui est généré par le choc thermique, semble perturber la solution puisque l'on capture même un réchauffement local en ce point après 6s bien que ce point soit dans le domaine liquide, la solidification ne peut donc pas justifier cette augmentation. Il se peut par contre que cet apport de chaleur provienne d'un nœud voisin pour lequel le choc thermique a été plus important. La perturbation due au choc thermique affecte durablement l'écoulement et on voit que la vitesse décroît lentement pour ne s'inverser que tardivement. D'autre part la comparaison des résultats du maillage fin et du maillage adaptatif montre que malgré la solution initiale en température perturbée par le choc thermique, la solution remaillée converge rapidement vers la solution du maillage fin. Par contre l'effet de l'inertie sur le mouvement du fluide se fait largement sentir et si l'évolution de la vitesse semble correcte on note un décalage temporel très marqué entre les deux solutions. On peut donc conclure que l'application du remaillage permet de retrouver rapidement la solution correcte au niveau de la thermique mais que la solution en vitesse ne pourra pas être récupérée. On obtiendra une solution décalée temporellement d'environ 3s ce qui correspond à peu près au temps de déclenchement du remaillage qui est d'environ 4s.

Comparaison avec les résultats de l'ancienne version de THERCAST

Dans la version précédente de THERCAST, développée au cours de la thèse d'Olivier Jaouen [JAOUEN, 1998], le traitement du choc thermique était différent. On cherchait un pas de temps qui permettait d'éviter le problème du choc thermique. On résolvait ensuite l'équation de la chaleur avec ce pas de temps et on interpolait linéairement les résultats pour retomber sur la valeur au pas de temps initial. Cette stratégie de thermique dite asynchrone permet d'éviter en grande partie le choc thermique mais induit aussi une diffusivité plus importante que celle physiquement observée. Cela a du à l'étape d'interpolation qui suppose une évolution linéaire de la température, ce qui n'est pas du tout le cas.

La Figure 16 démontre ainsi que le choc thermique est bien contrôlé mais que l'on a déjà un effet sensible sur la vitesse minimale. Le refroidissement est plus rapide en particulier au début de la solidification. Cet écart très net a sans doute des conséquences fortes sur l'écoulement et sur la vitesse de solidification.

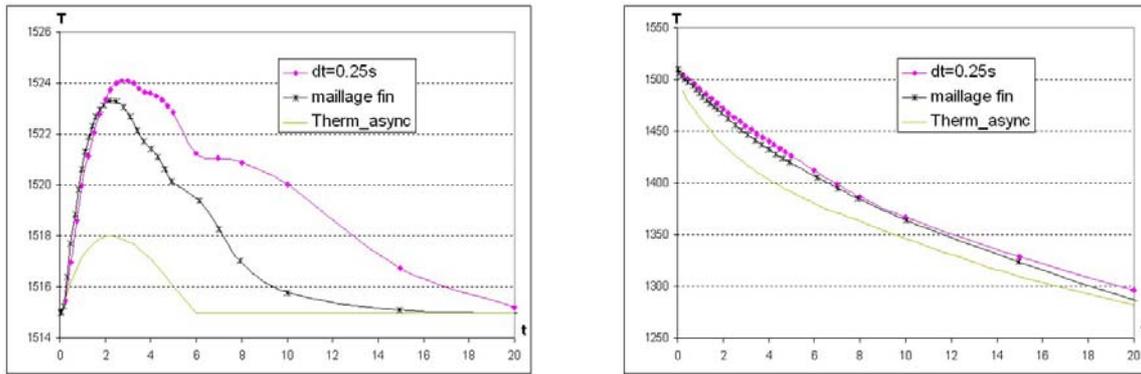


Figure 16 : Evolution de la température maximale et minimale (en °C) dans le lingot, comparaison avec la méthode thermique asynchrone

Ainsi lorsque l'on regarde les courbes de température et de vitesse verticale dans la section centrale horizontale (Figure 17), on note un écart important aussi bien en température qu'en vitesse par rapport aux résultats obtenus sur le maillage fin. La diffusivité de la méthode est particulièrement nette sur la courbe de température, la baisse de température prend place sur une zone plus large ce qui explique l'amélioration de l'absorption du choc thermique puisqu'il s'effectue sur une distance plus importante. Toutefois cette modification de la température induit un changement important dans la prédiction de l'écoulement. L'ordre de grandeur de la vitesse est plus faible et plus important encore, la position du minimum est décalée. Cela indique que le front de solidification est plus avancée et que l'écoulement a moins le temps de se mettre en place avant que l'alliage se solidifie dans cette zone de fort gradient thermique. L'écoulement sera donc globalement perturbé même s'il le sera sans doute de manière différente de celle que l'on a pu observer avec la méthode condsplit.

On peut ainsi dire que la méthode condsplit améliore de manière importante la résolution de la thermique mais induit quand même une perturbation forte de la vitesse. La résolution en thermique asynchrone permet une diminution du choc thermique et donc un écoulement qui va dans le bon sens mais la diffusion de la chaleur est largement surestimée. D'autre part l'application de la méthode de remaillage a montré qu'il était alors possible de récupérer une bonne solution en thermique en la combinant avec la méthode condsplit.

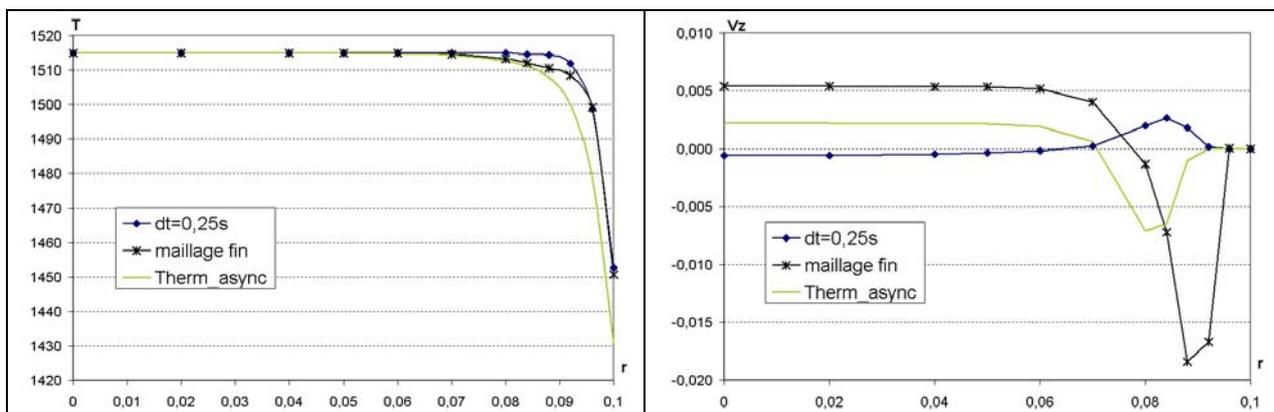


Figure 17 : Courbes de température (en °C) et de vitesse verticale (en m/s) sur la section centrale horizontale à t=10s, comparaison avec la méthode de thermique asynchrone

ANNEXE B

Analyse détaillée du lingot benchmark et comparaison de résultats après 180s de solidification

Dans cette annexe sont regroupés les résultats concernant l'étude des différentes simulations pour le lingot benchmark. La description du cas test est rappelée ainsi que les caractéristiques des matériaux. Ensuite sont étudiés les résultats en température, fraction liquide, vitesse, maillage et ségrégation en fonction du nombre d'éléments et de l'angle de la portion angulaire. Pour finir les résultats sur les deux faces des plans de symétrie sont comparés.

Description du cas test :

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot, d'un réfractaire et d'un moule cylindriques (Figure 1). Le lingot est refroidi uniquement par le moule et le réfractaire, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule et le réfractaire sont en contact avec l'air extérieur et sont refroidis par convection naturelle uniformément. La section simulée est de 10 degrés et est bornée par deux plans de symétries. Le lingot, le réfractaire et le moule sont initialement à des températures uniformes respectivement 1515°C pour le lingot et 250°C pour le moule et le réfractaire. Les caractéristiques du lingot, du moule et du réfractaire sont présentées dans le Tableau 1, le Tableau 2 et le Tableau 3.

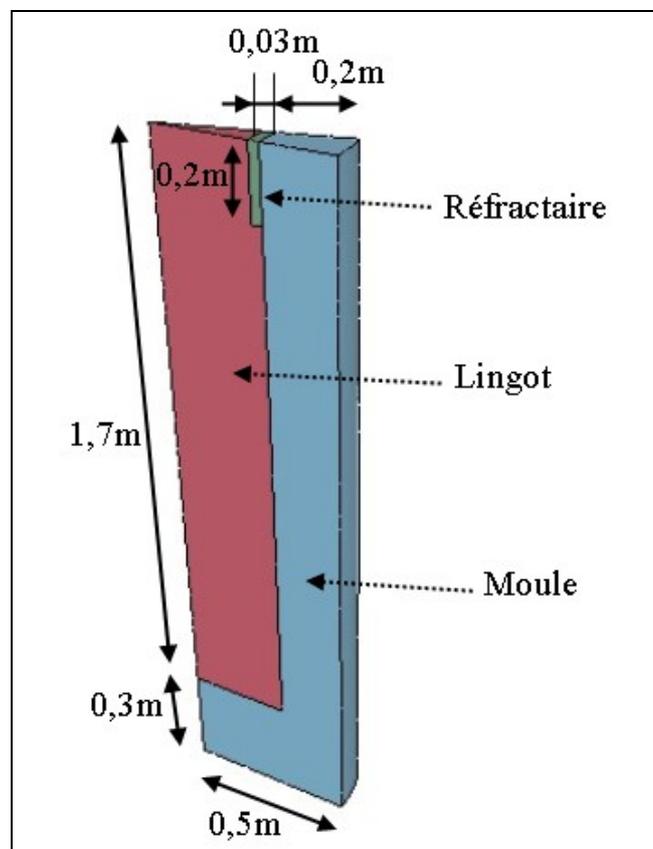


Figure 1 : Schéma du lingot et du moule et maillage initial

Tableau 1 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 35 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 715 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du fer pur T_{ls} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1525 °C |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |
| Transfert thermique avec le moule | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Transfert thermique avec le réfractaire | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 2 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Tableau 3 : Caractéristiques matériau du réfractaire et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|---|
| Masse volumique ρ | 1300 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 0.7 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 1050 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Présentation des simulations

Pour préciser cette étude du lingot benchmark nous nous limiterons à l'analyse de la solution à 180s pour les différentes simulations. En effet, le temps de calcul est important pour cette simulation et il n'est donc pas possible de lancer beaucoup de simulations différentes jusqu'à la fin de la solidification. Ces résultats de début de solidification devraient déjà nous donner une tendance et éventuellement quelques clés pour mieux comprendre notre problème.

Les résultats obtenus ici utilisent une stratégie avec des pas de temps variables en tout début de calcul pour ensuite employer un pas de temps variable par période. Le calcul ne produit donc pas forcément des résultats à exactement 180s et d'autre part le stockage des fichiers résultats se fait par période. C'est pourquoi certains résultats correspondront à des temps voisins de la valeur. Cependant cela ne fausse pas les comparaisons étant donné que les variations ne sont pas extrêmement rapides et nos comparaisons plutôt qualitatives.

Les résultats présentés ici sont donc pris à :

- 186,7s pour la simulation 1d5
- 180,6s pour la simulation 2d5
- 180s pour la simulation 2d5-db
- 180,6s pour la simulation 3d5

L'ensemble de ces simulations a été réalisé en appliquant la stratégie de remaillage adaptatif. L'identifiant des simulations correspond au nombre d'éléments objectif défini pour le remaillage (par exemple 1d5 correspond à 100 000 éléments). L'ajout du terme « -db » sert à indiquer que le maillage utilisé représente un secteur angulaire double du cas standard. Ainsi 2d5-db donne une densité de maillage égale à 1d5 puisque le volume a doublé.

Analyse des résultats en thermique

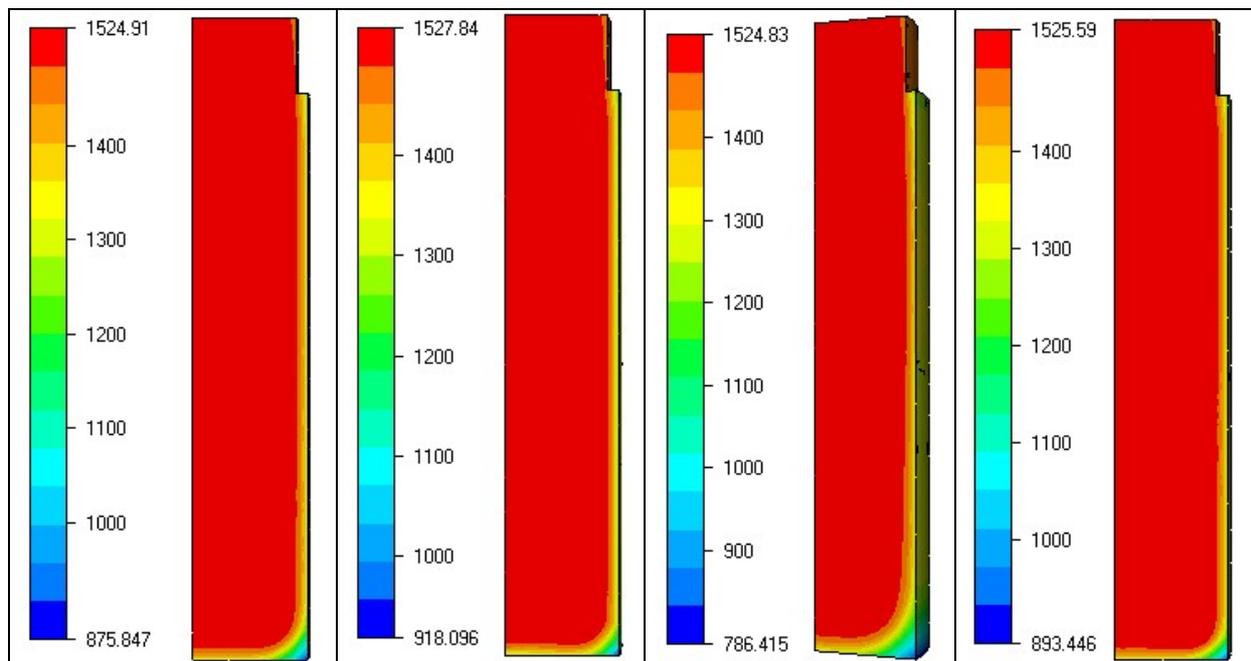


Figure 2 : Courbes de température (en °C) sur la face droite du lingot à 180s pour les simulations (1d5, 2d5, 2d5-db, 3d5)

Les résultats en température (cf. Figure 2) sont tout à fait comparables et les écarts sont assez faibles. Les courbes de fraction liquide de la Figure 3 confirment cette impression. Toutefois les résultats sur le lingot doublé présentent une « diffusion » plus grande qui correspond généralement à une taille d'éléments plus importante. Une zone est particulièrement différente, le coin inférieur droit qui est effectivement la zone la plus refroidie et qui se solidifie donc en premier entraînant un déraffinement du maillage car dans les zones solides une taille de maille plus importante est imposée par le remaillage.

La modification de la solution peut être due à une moins bonne résolution de la thermique du fait de la taille trop importante des éléments en contact avec le moule ou le réfractaire. Toutefois nous n'avons pas suffisamment analysé cette évolution pour identifier la cause exacte de cette différence dans les solutions en température.

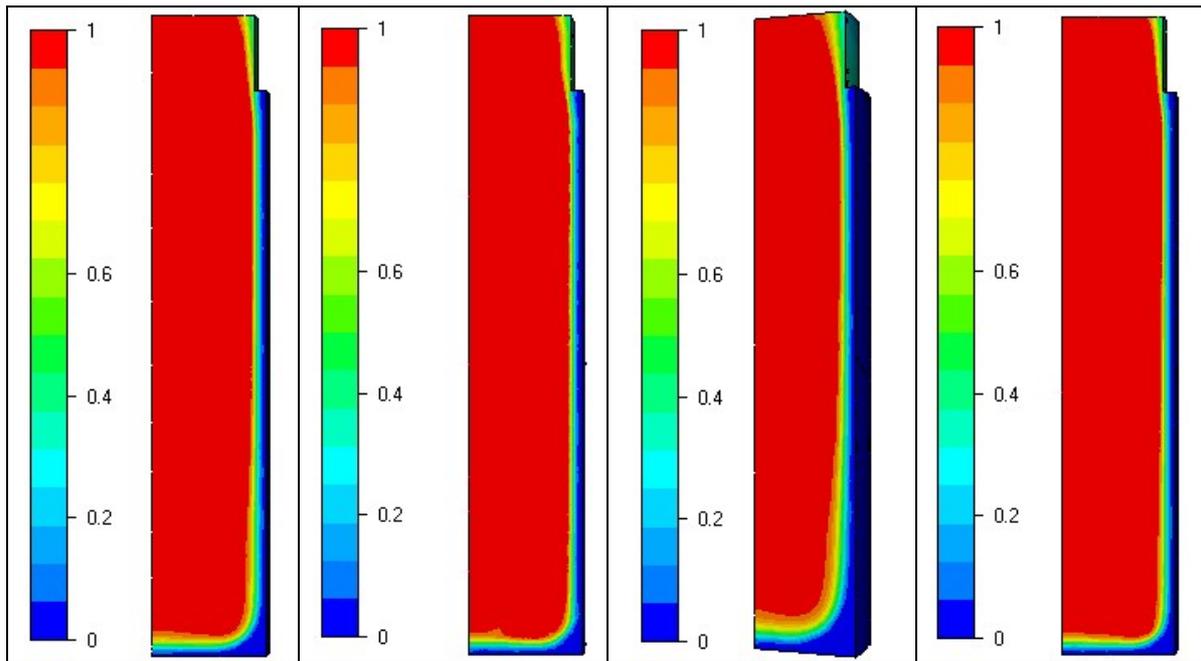


Figure 3 : Courbes de fraction liquide sur la face droite du lingot à 180s pour les simulations (1d5, 2d5, 2d5-db, 3d5)

Analyse du maillage

On peut vérifier sur la Figure 4 que la taille des éléments est plus importante dans le coin inférieur droit sur une zone plus étendue pour le calcul 2d5-db. Le contact avec le réfractaire ne laisse pas vraiment voir de différences sur ces images des maillages. Une telle évolution du maillage conduit donc à des écarts visibles sur les courbes de température et de fraction liquide. Cette évolution peut s'expliquer par une mauvaise capture initiale de la couche limite qui n'impose pas un raffinement initial suffisant permettant ensuite de bien simuler les forts gradients dans ces zones. Même si les écarts sont visibles, la solution reste quand même acceptable pour des interprétations qualitatives. Rappelons d'ailleurs que sur ce type de lingot pour lequel apparaissent des zones équiaxes importantes les mesures quantitatives ne seraient pas représentatives des expériences. En effet les ségrégations sont complètement différentes suivant que la solidification est colonnaire ou équiaxe. D'autre part, on peut aussi remarquer que ces images présentent le maillage sur une face et non pas sur le volume car il est quasiment impossible de visualiser un maillage volumique en 3D. On peut donc aussi comprendre l'augmentation de la diffusion comme un effet de l'augmentation du volume, en effet lors de la génération du maillage, une pièce plus massive pourra conduire à un maillage plus proche de l'objectif puisque les faces n'interféreront pas sur le maillage global. Alors que pour une pièce fine la proximité des faces des plans de symétrie peut induire une taille de maille inférieure dans l'épaisseur du volume. Ainsi il se peut que le maillage soit plus grossier à l'intérieur du volume sans que cela soit flagrant sur des images des faces. Cette modification de la taille du maillage dans la zone de contact avec le moule peut produire des effets indésirables car comme nous l'avons dans le cas du choc thermique, la taille des éléments dans ces zones influence fortement la thermique.

Comme nous pouvons nous en rendre compte la visualisation des résultats des simulations 3D est assez complexe et cela rend parfois l'analyse plus difficile. Nous

essayerons donc dans la suite de présenter aussi simplement que possible les résultats et de mettre en avant l'apparition de structures 3D et non plus axisymétriques.

L'analyse de ces images des maillages révèle aussi sur tous les cas sauf la simulation 2d5, une concentration de nœuds plus importante légèrement décalée par rapport à la zone de raffinement due à la couche limite dynamique. Cet effet est particulièrement notable sur la simulation 3d5. Cette concentration de nœuds correspond à une séparation de l'écoulement, deux boucles de recirculation sont présentes et la courbure des lignes de courant implique que les éléments deviennent isotropes dans cette zone qui présente aussi de forts gradients de vitesse ce qui explique ce raffinement.

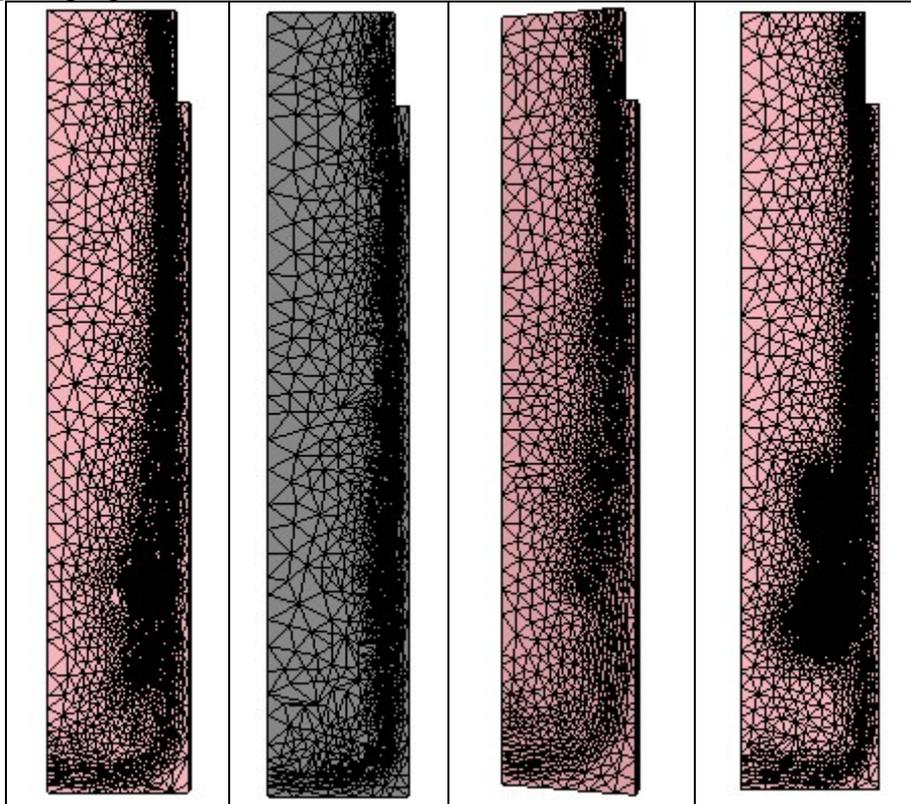


Figure 4 : Maillages sur la face droite du lingot à 180s pour les simulations (1d5, 2d5, 2d5-db, 3d5)

Analyse des vitesses verticales

Cette séparation apparaît nettement lorsque l'on visualise les vitesses verticales (Figure 5). La courbe de la simulation 2d5 présente les caractéristiques types d'un écoulement de convection naturelle le long d'une paroi alors que pour les autres calculs on s'aperçoit que la vitesse maximale est proche de l'axe et que la zone de vitesse négative n'est pas strictement parallèle à la paroi mais se décolle légèrement ou de manière plus importante le maillage est plus fin. Cette séparation de l'écoulement en une zone supérieure et une zone inférieure aura forcément un effet très important sur la ségrégation puisque cela induit un mouvement du liquide qui n'induirait pas une redistribution globale du soluté dans le bain liquide. Ce type de séparation n'apparaît en général que lorsque la cavité a un facteur de forme important (quasiment 6 dans notre cas).

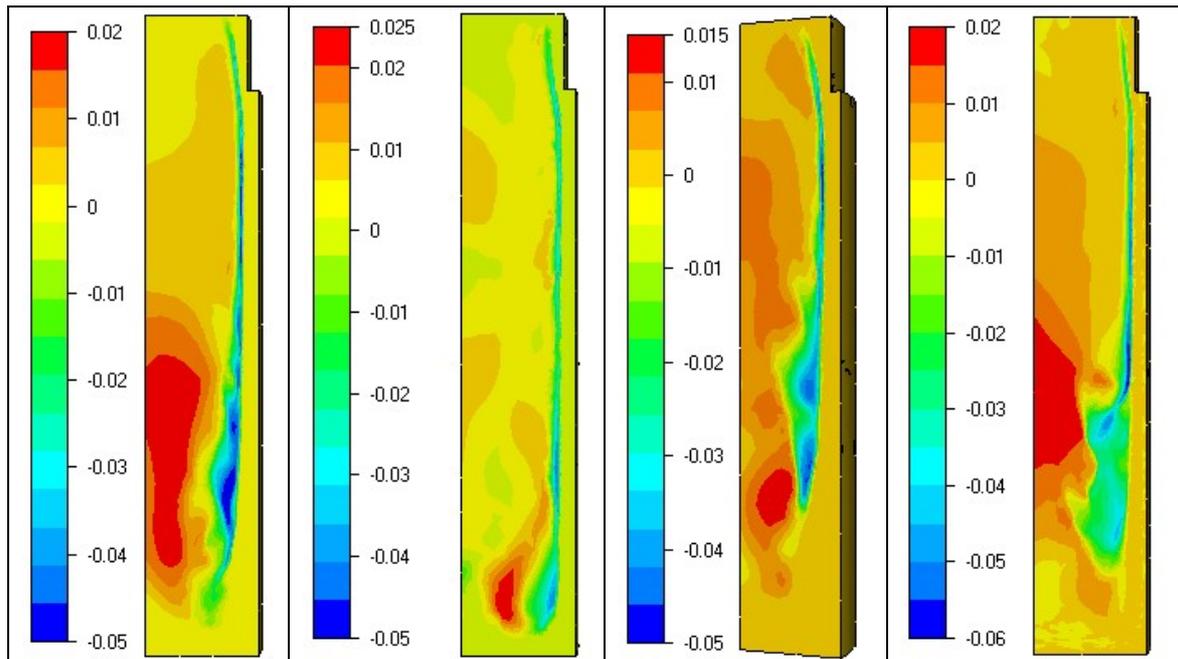


Figure 5 : Courbes de vitesse verticale (en m/s) sur la face droite du lingot à 180s pour les simulations (1d5, 2d5, 2d5-db, 3d5)

Analyse de la ségrégation

Les résultats en ségrégation donnent des tendances identiques pour trois simulations sauf la simulation 2d5-db dont l'évolution de maillage conduit à des résultats opposés en pied de lingot. En effet on peut identifier globalement quatre zones caractéristiques pour les ségrégations à ce temps là :

- paroi de la masselotte et angle avec le réfractaire
- pied du lingot sur l'axe
- pied du lingot à proximité de la paroi inférieure
- zone de couche limite verticale

Les trois premières zones présentent un appauvrissement de l'alliage alors que la dernière est enrichie. La première zone est commune aux quatre simulations, elle correspond au transport du soluté par l'écoulement vertical descendant le long de la paroi refroidie. L'appauvrissement sur l'axe doit correspondre à un écoulement vers le haut dans cette zone et ainsi tout le soluté rejeté lors de la solidification est redistribué dans le bain liquide. L'écart de concentration positive de la simulation 2d5-db doit donc correspondre à un écoulement inversé dans la zone qui imposerait de manière précoce une recirculation. L'écoulement de type couche limite implique l'appauvrissement de la troisième zone, les courbes de vitesse verticale de la simulation 2d5 (Figure 5) illustrent bien le type d'écoulement qu'elle induit. Même si ce type d'écoulement n'est plus présent dans l'écoulement actuel, il a marqué les courbes de concentration qui nous révèle l'histoire de l'écoulement. Plus cette zone est importante, plus la durée de ce type d'écoulement a été importante. Enfin la quatrième zone est le résultat du transport du soluté le long de la paroi et de la courbure progressive de l'écoulement, cet effet est particulièrement visible pour la simulation 3d5 où l'on observe une forte corrélation entre les courbes de vitesses verticales et les formes et positions de ces zones de ségrégation positive. L'évolution de la concentration dans le liquide s'effectuant de

manière beaucoup plus rapide que dans la zone pâteuse, la concentration moyenne est donc un reflet plus immédiat de l'écoulement.

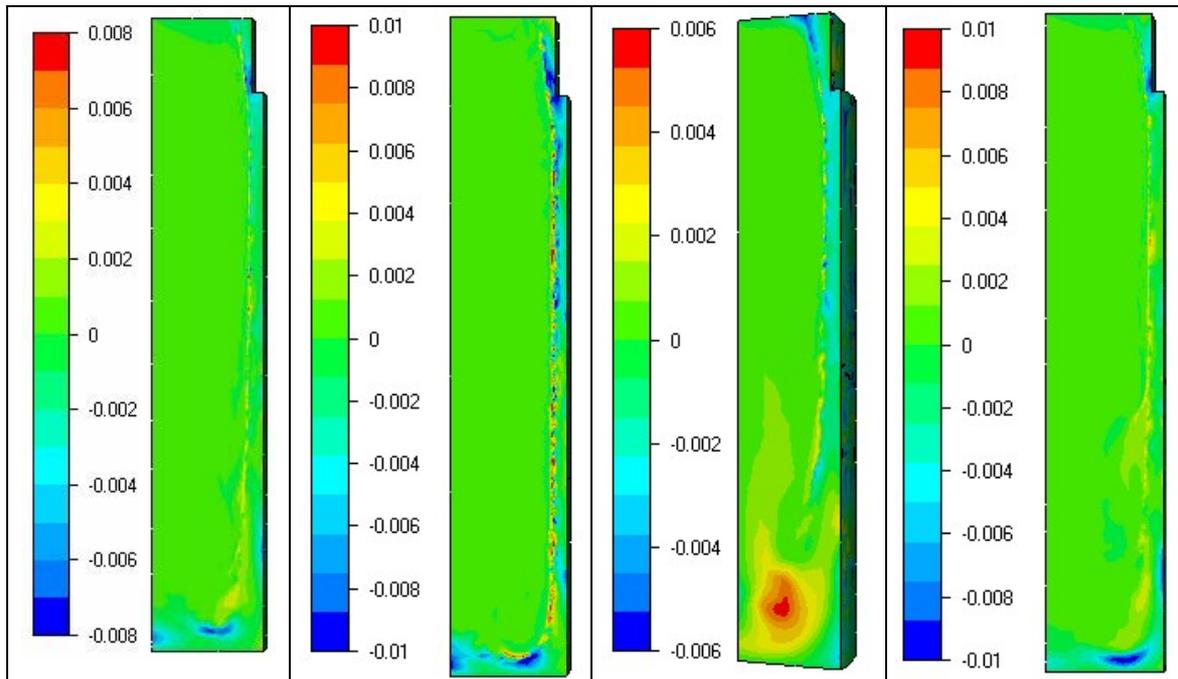


Figure 6 : Courbes d'écart de concentration moyenne (en wt%) sur la face droite du lingot à 180s pour les simulations (1d5, 2d5, 2d5-db, 3d5)

Analyse de la symétrie des solutions

Notre cas test étant axisymétrique, on pourrait s'attendre à des profils identiques sur les deux faces de notre portion de lingot. Des différences significatives pourraient toutefois apparaître car la solution peut être perturbée et des écoulements 3D peuvent se développer et cela d'autant plus que la portion angulaire est importante. Cela se vérifie sur les résultats de la Figure 7. En effet, les solutions en vitesse verticale sont assez similaires sur les deux faces dans le cas des simulations sur une portion angulaire de 10 degrés. Par contre, le cas de la simulation 2d5-db est plus complexe car si la visualisation de la vitesse ne révèle pas d'écart important à cet instant précis, les courbes de concentration présentées sur la Figure 8 sont beaucoup plus parlantes. En effet à la zone fortement positive du pied de lingot qui apparaît sur la face droite, il correspond une zone négative sur la face gauche. On peut donc supposer que la boucle de recirculation qui s'est formée dans ce calcul n'était pas purement dans un plan radial mais comprenait aussi une composante transversale qui a induit des échanges de concentration entre les deux faces.

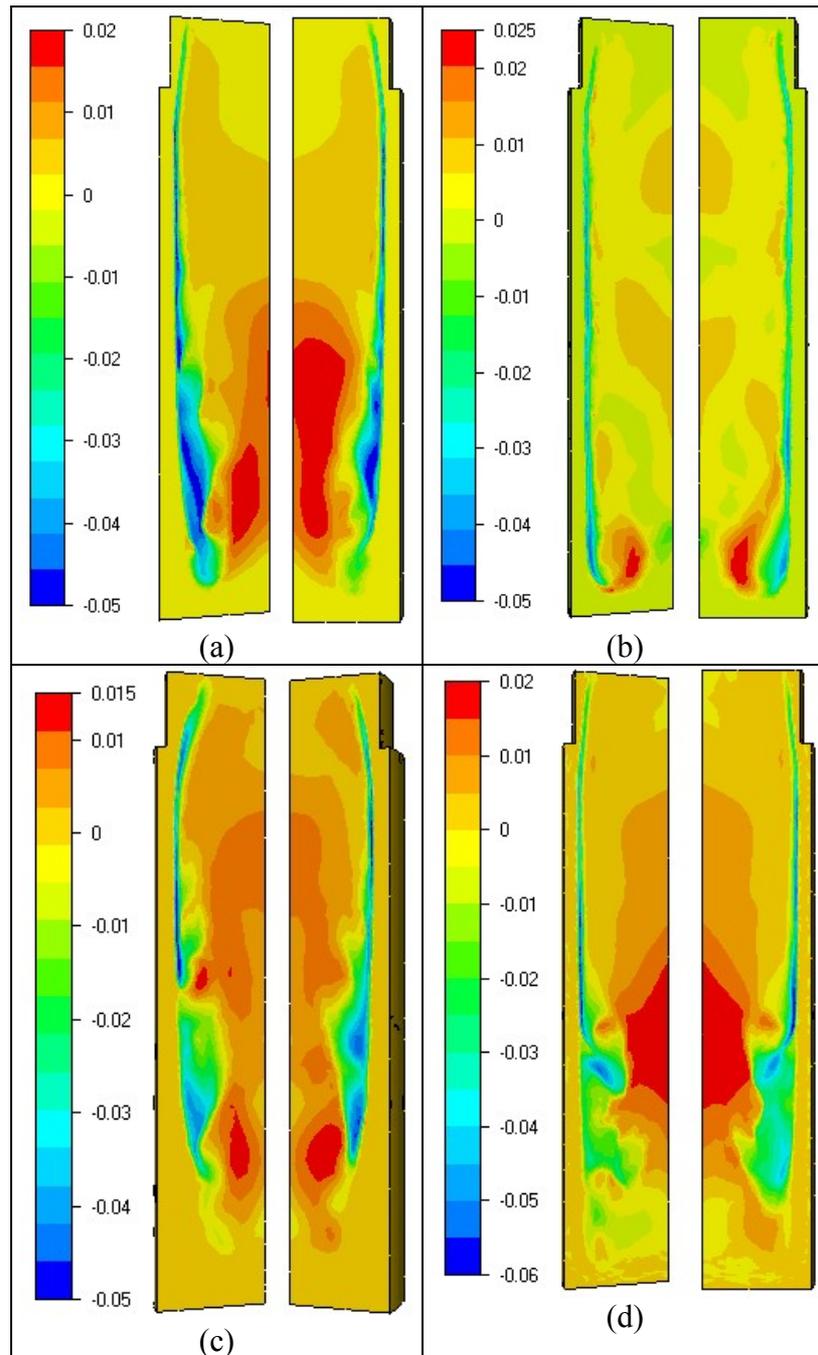


Figure 7 : Comparaison des champs de vitesse verticale (en m/s) à 180s sur les deux faces de la portion angulaire (simulation 1d5 (a), 2d5 (b), 2d5-db (c), 3d5 (d))

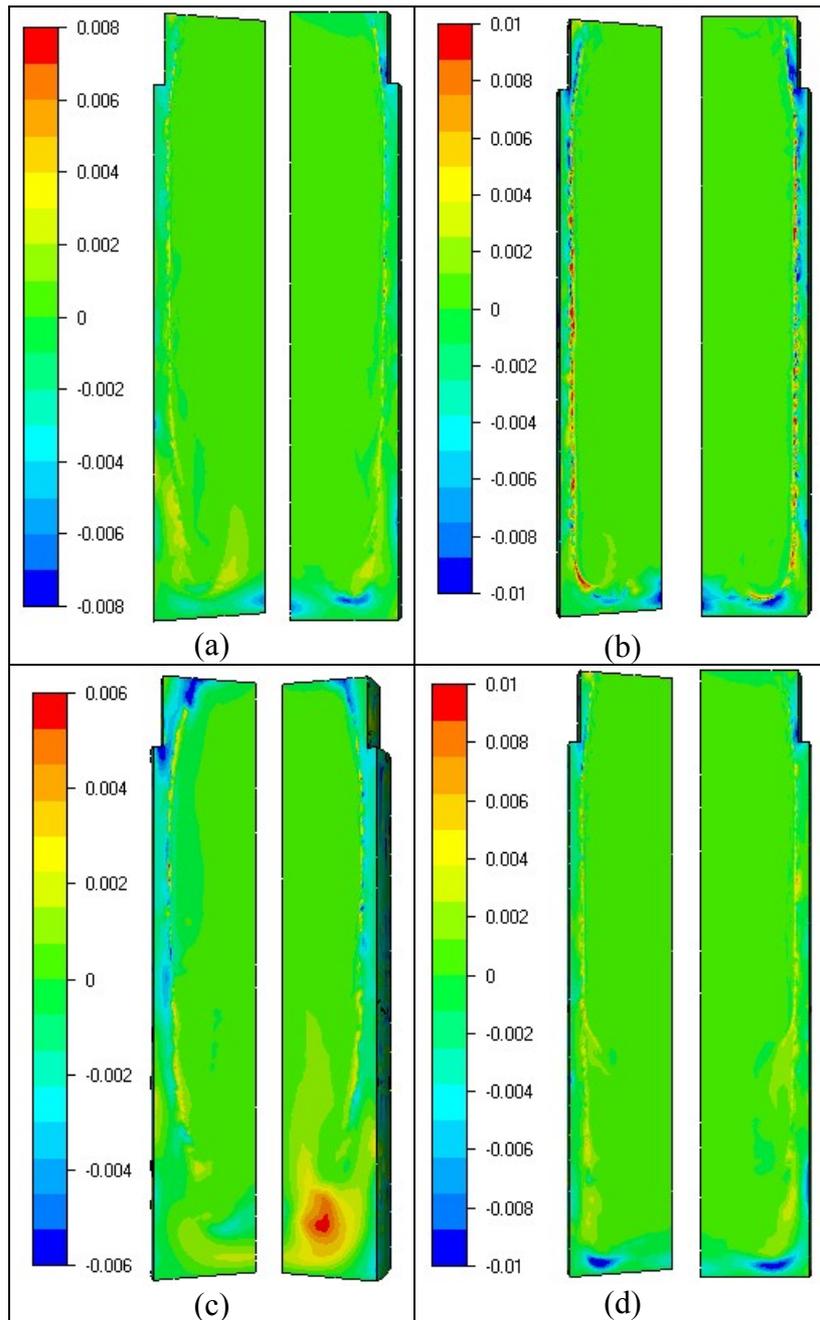


Figure 8 : Comparaison des champs de concentration (en wt%) à 180s sur les deux faces de la portion angulaire (simulation 1d5 (a), 2d5 (b), 2d5-db (c), 3d5 (d))

Toutefois de telles modifications de la ségrégation et aussi légèrement de l'écoulement ne modifient pas le maillage qui reste très similaire sur les deux faces (cf. Figure 9).

Ces résultats nous montrent donc que l'effet angulaire est très important sur la ségrégation à densité de maillage équivalent. D'autre part l'augmentation du nombre d'éléments a aussi un effet très important sur la prédiction de l'écoulement ce qui affecte aussi la ségrégation mais de manière moindre après un temps de refroidissement assez court tel que 180s.

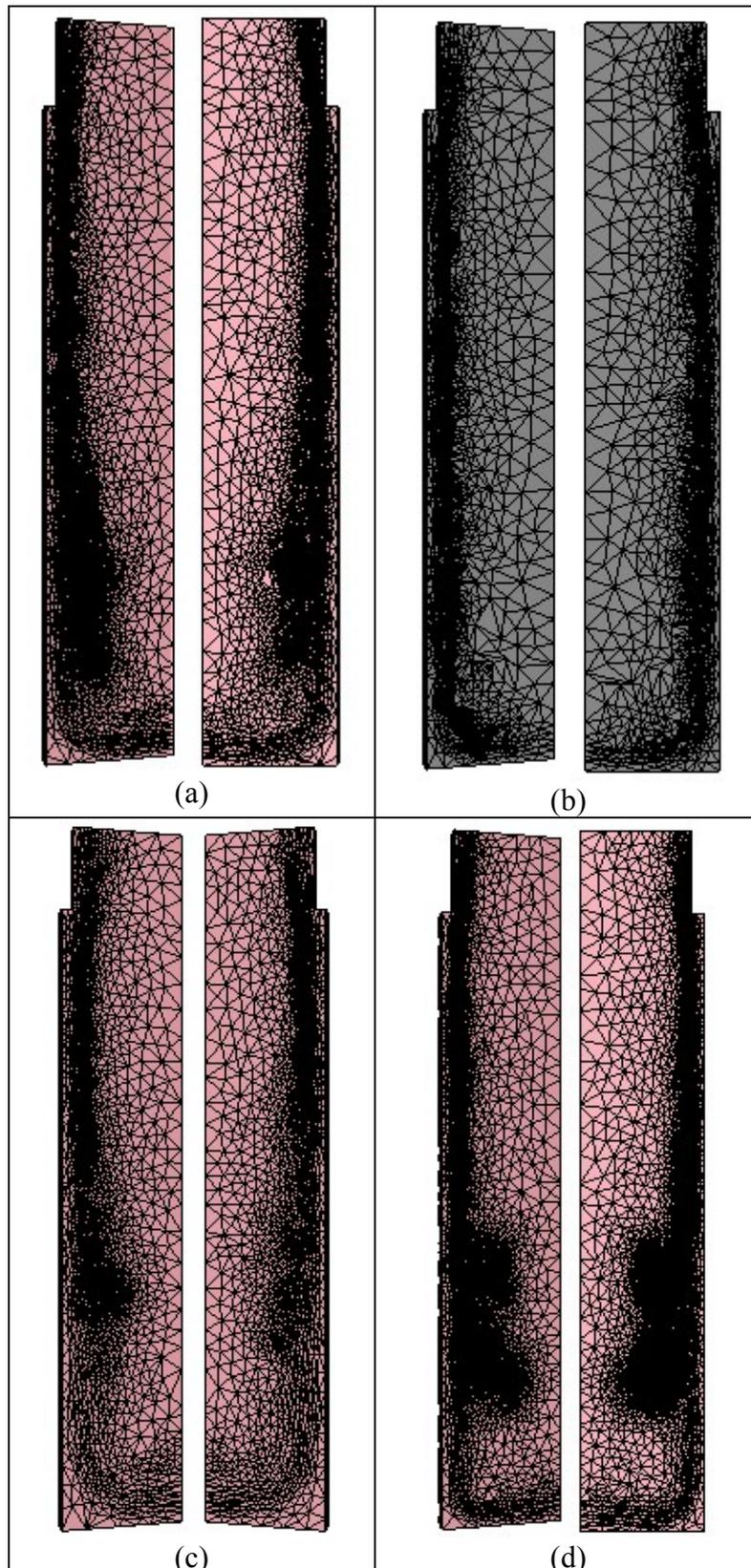


Figure 9 : Comparaison des maillages à 180s sur les deux faces de la portion angulaire (simulation 1d5 (a), 2d5 (b), 2d5-db (c), 3d5 (d))

ANNEXE C

Etude de l'écoulement sur le lingot intermédiaire pour différentes configurations de maillage et de géométrie

La description des caractéristiques de ce lingot et de cet alliage est donnée dans l'Annexe A et dans le chapitre d'application, elle ne sera donc pas reproduite ici.

Simulation sur maillage fixe initial

Les premiers calculs sur ce lingot ont été réalisés en utilisant un maillage généré par Gambit qui lui confère une certaine régularité comparativement aux maillages générés par MTC, toutefois il reste non structuré. Le nombre d'éléments de ce maillage est d'environ 93 000, ce qui est relativement faible comparativement à ceux utilisés par la suite.

Nous avons vu dans l'Annexe A que le choc thermique était complètement absorbé à partir de 20s mais qu'il restait une influence sur la vitesse, un décalage. Nous allons maintenant voir comment évolue ensuite l'écoulement à partir de 20s jusqu'à 120s. Dans cet intervalle la solidification progresse beaucoup et on devrait donc pouvoir observer son effet. D'autre part nous essayerons aussi de visualiser comment se produit la séparation de l'écoulement que nous avons détecté lors des simulations sur le lingot benchmark, dans l'hypothèse où ce lingot de plus faible taille produit des phénomènes similaires.

Pour l'évolution de l'écoulement, deux causes peuvent provoquer des perturbations, en premier lieu les effets du choc thermique qui se font sentir par des irrégularités aux niveaux des vitesses et des températures. En second lieu, et c'est ce qui nous intéresse principalement, l'effet du maillage sur la solution. Il sera sans doute difficile de démêler ces deux effets qui se conjugueront.

Lorsque l'on visualise l'écoulement on se rend compte qu'il est particulièrement complexe et que très rapidement il comprend plusieurs boucles de recirculation qui finissent par occuper l'ensemble du lingot. Les images de la Figure 1 montrent que si les irrégularités sont minimales à 20s et qu'alors l'écoulement est de type couche limite, rapidement ces irrégularités deviennent prépondérantes et dominent l'écoulement à partir de 45s. Ensuite ces perturbations, initialement localisées au pied du lingot, croissent et finissent par atteindre le haut du lingot à 120s. Cet écoulement est donc très différent de celui observé dans les simulations sur le lingot benchmark dans la mesure où un écoulement avec deux vortex principaux ne s'établit jamais et qu'il s'agit ici seulement d'une série de vortex instables qui se déplacent et envahissent l'ensemble du bain liquide.

L'origine de ces perturbations provient du couplage entre la thermique et la mécanique. En effet si l'on visualise l'historique de la thermique on remarque que des petites irrégularités présentes à 20s s'accroissent rapidement et conduisent à une modification cruciale de l'écoulement. La Figure 2 présente les isothermes entre 20s et 45s. Cette figure

montre clairement la croissance des oscillations de l'isotherme près du front de solidification qui devient finalement prépondérante.

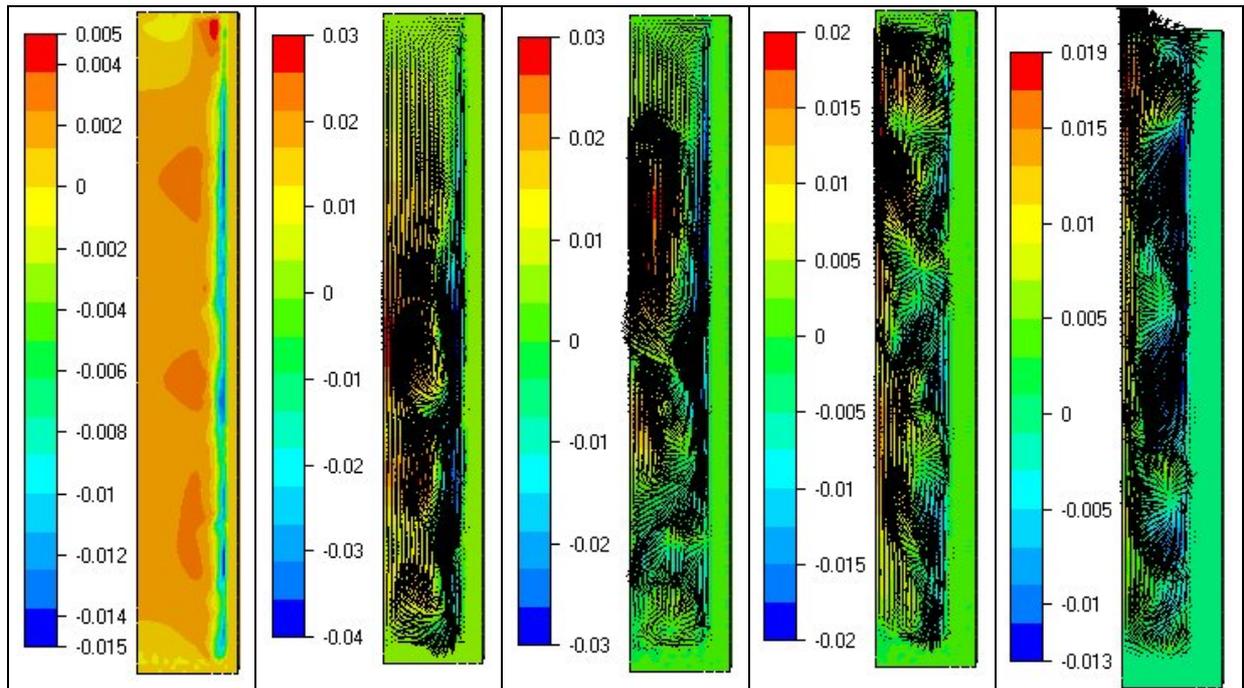


Figure 1 : Vitesse verticale (en m/s) et vecteur vitesse sur le maillage initial à t=20s, 45s, 60s, 90s et 120s

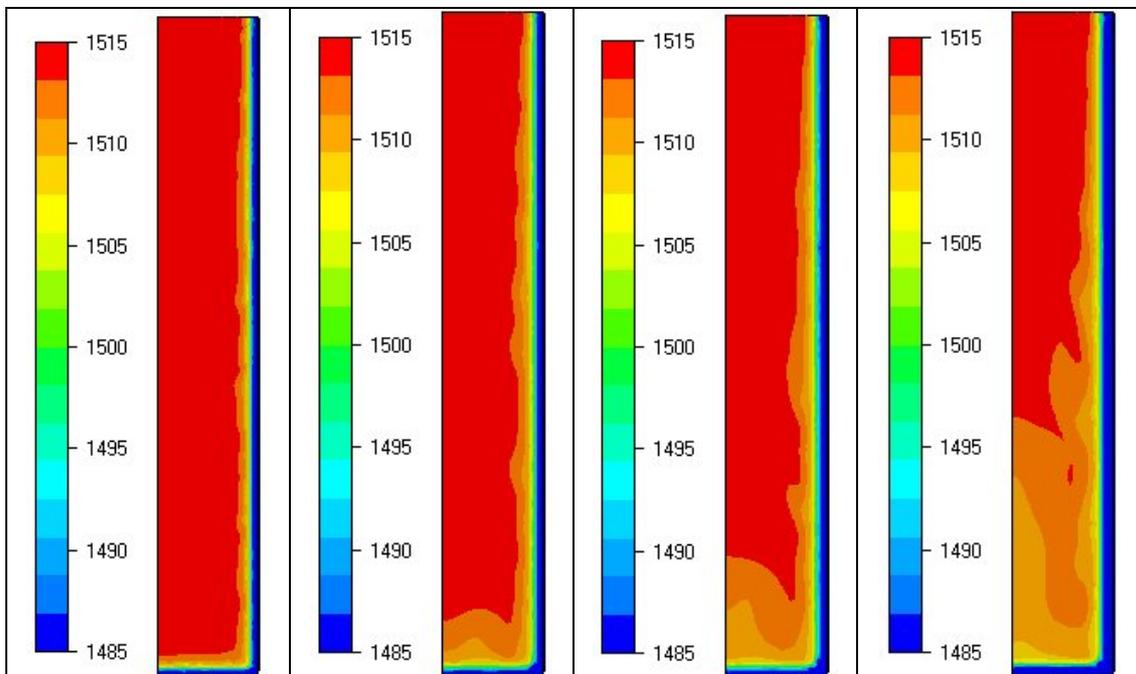


Figure 2 : Température (en °C) sur le maillage initial à t=20s, 30s, 35s et 45s

Un résultat de ce type peut s'expliquer par le fait que les irrégularités de la solution atteignent beaucoup plus facilement une taille critique lorsque le maillage est grossier. Or les

perturbations sont déjà présentes suite au choc thermique et elles ne font donc que croître ensuite. Ce résultat significatif nous conduit à une première conclusion : la simulation sur maillage grossier dans la zone liquide conduira certainement à des écoulement différents et comprenant plus de vortex. Dans la limite toutefois où le maillage n'est pas trop grossier car dans ce cas le nombre d'éléments serait trop faible pour voir l'apparition et la formation de vortex. Alors que pour des maillages intermédiaires comme celui-ci, la finesse n'est pas suffisante pour obtenir une solution très régulière mais suffisamment pour permettre l'apparition des vortex.

Simulation sur maillage fin à la paroi et sur une partie de l'axe

La simulation présente est réalisée sur un maillage beaucoup plus fin que précédemment. Le maillage a été affiné et étiré à proximité des parois. De plus deux zones de maillage fin ont été ajoutées : en pied de lingot et le long de l'axe. Au final on obtient le maillage présenté sur la Figure 3. Ce maillage comprend environ 380 000 éléments.

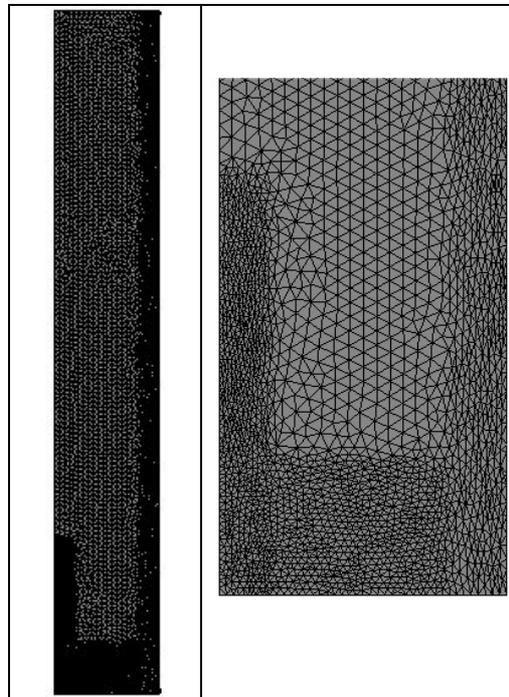


Figure 3 : Maillage fin aux parois et sur l'axe et zoom pied de lingot

Ce raffinement devrait être suffisant pour mieux capturer le choc thermique et aussi l'évolution de l'écoulement. L'analyse des isothermes de la Figure 4 montre que la solution est beaucoup plus régulière et ne présente pas les oscillations observées dans la simulation précédente. Par contre la bonne capture du choc thermique a conduit à la formation de l'écoulement de type couche limite dans les premiers instants du refroidissement et donc à la génération d'un régime convectif dans le pied du lingot. On peut ainsi noter une zone refroidie par l'écoulement qui n'apparaissait pas avec le maillage initial. Le décalage dans la solution mécanique observé lors de l'analyse du choc thermique de l'Annexe A affecte donc aussi les isothermes. Ces résultats en thermique permettent de supposer que la prédiction est bonne et que donc l'écoulement devrait partir sur des bases suffisamment saines pour que l'on puisse avoir une bonne confiance dans la suite de la solution.

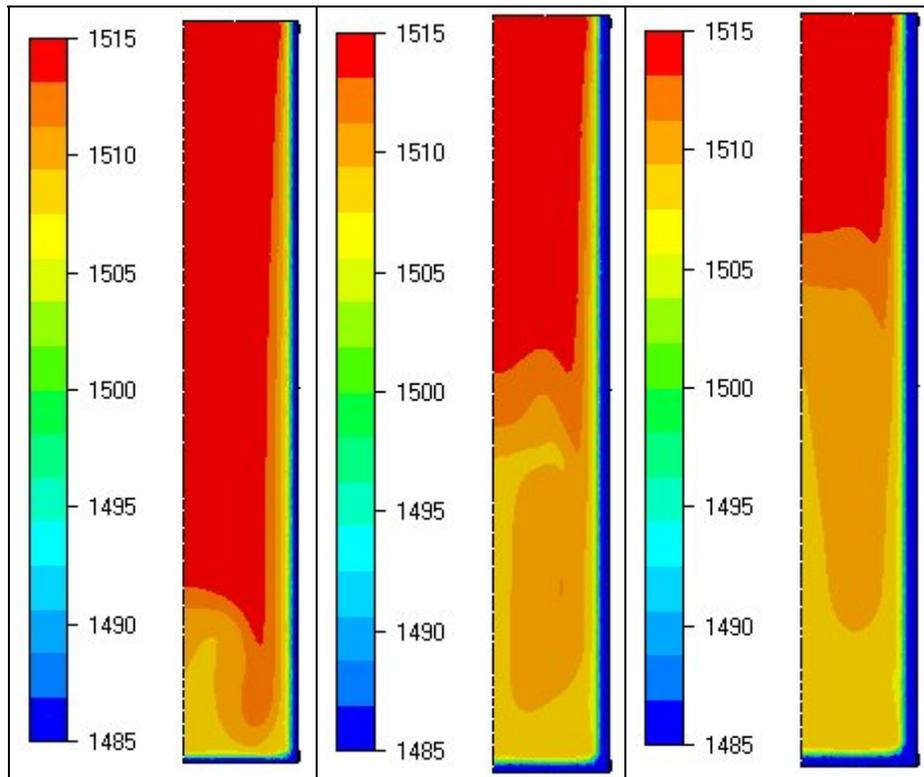


Figure 4 : Température (en °C) sur le maillage fin aux parois et sur l'axe à t= 20s, 35s et 45s

L'écoulement de type couche limite évolue rapidement par l'apparition d'un vortex dans le coin inférieur droit. Les images de la Figure 5 révèlent la croissance rapide de ce vortex qui occupe plus d'un quart de la cavité après 60s de refroidissement. Toutefois à cet instant la structure est stable et les perturbations quasiment négligeables, bien qu'on voie un début de perturbation à mi-hauteur avec une petite poche de vitesse verticale positive.

Pourtant cette régularité ne sera pas détruite dans cette zone mais bien dans le pied du lingot où le vortex secondaire finit par se diviser et créer une perturbation de taille critique qui va finalement induire un écoulement instable dans l'ensemble du lingot. La Figure 6 montre la séparation du vortex et les oscillations qui apparaissent sur les isothermes qui vont accélérer la dégénérescence de l'écoulement.

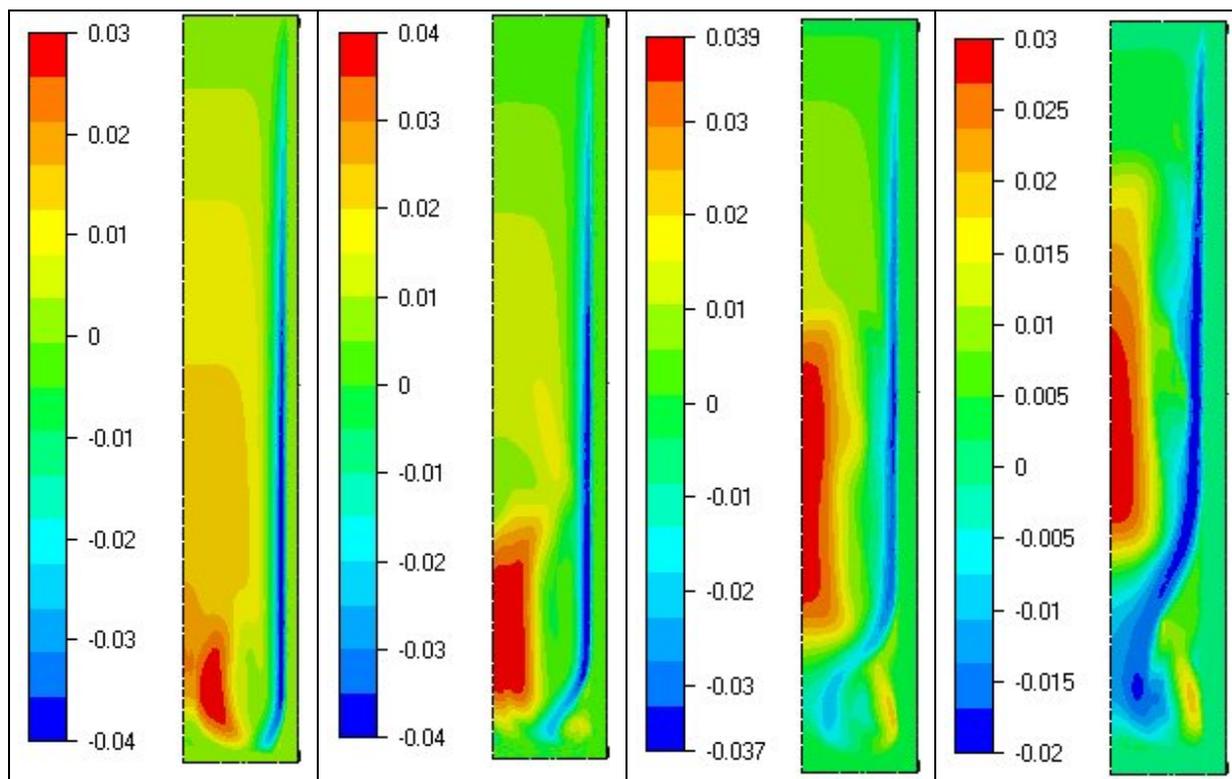


Figure 5 : Vitesse verticale (en m/s) sur le maillage fin aux parois et sur l'axe à t= 20s, 30s, 45s et 60s

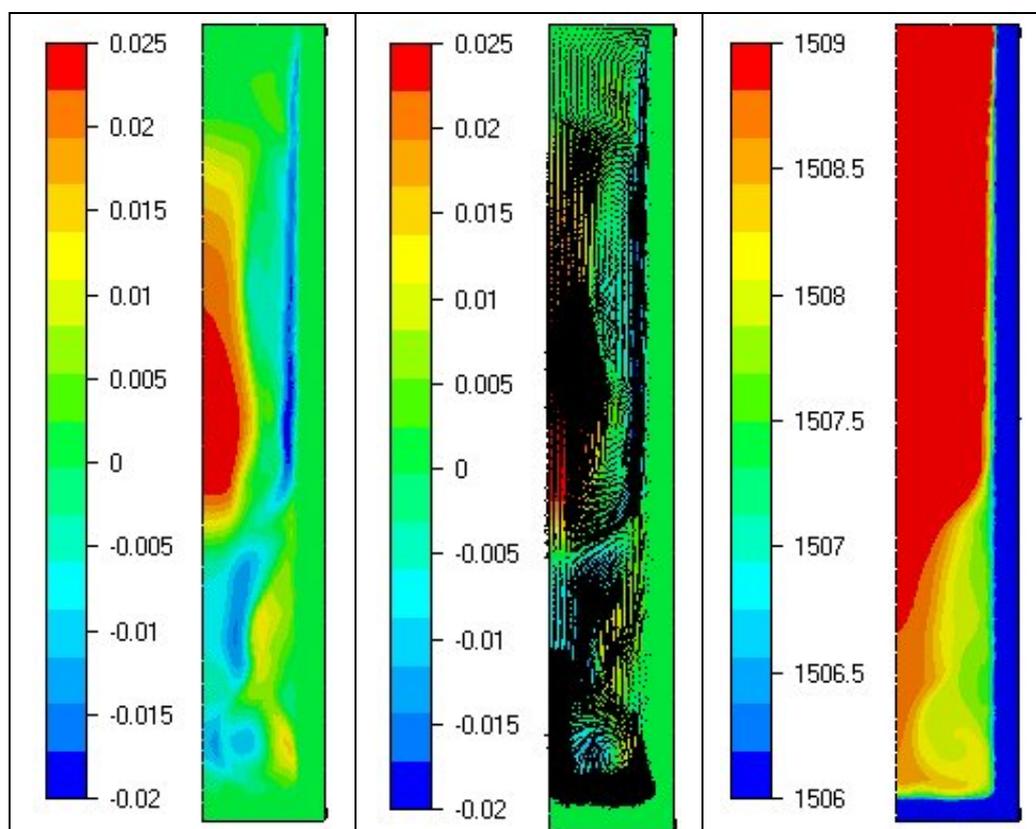


Figure 6 : Champ de vitesse verticale (en m/s), vecteur vitesse et température (en °C) sur le maillage fin aux parois et sur l'axe à t=70s

Finalement l'écoulement poursuit son évolution (cf. Figure 7) et la zone déstabilisée continue sa progression vers le haut pour occuper quasiment complètement le bain liquide. Les amplitudes des vitesses et la croissance de ces instabilités sont comparables à celles obtenues sur le maillage initial.

Ces résultats nous amènent donc à la conclusion suivante : dans ce type de lingot les perturbations qui se produisent à proximité du front de solidification ont tendance à atteindre un seuil critique, plus ou moins rapidement suivant la taille de maille. Lorsque ces perturbations ont atteint le seuil critique, elles déstabilisent complètement l'écoulement localement mais cette déstabilisation se propage ensuite dans le lingot.

L'initiation de ces perturbations vient sans doute de l'aspect non structuré du maillage qui induit des petites irrégularités et aussi sans doute des imprécisions numériques.

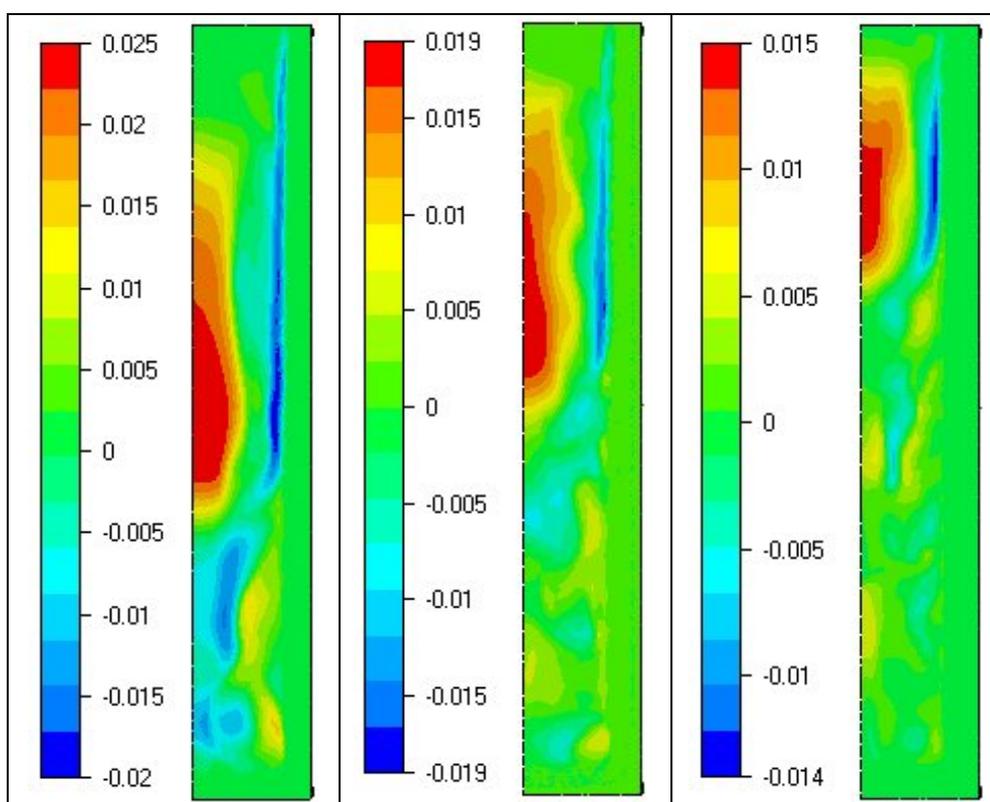


Figure 7 : Vitesse verticale (en m/s) sur le maillage fin aux parois et sur l'axe à t=70s, 90s et 120s

Simulation avec le remaillage 2d5

La simulation suivante va nous servir à valider l'application du remaillage pour la prédiction de l'écoulement. Le remaillage utilisé a pour objectif 200 000 éléments (d'où l'appellation 2d5). Le remaillage est appliqué au bout de 5s de refroidissement. Nous avons vu dans l'Annexe A que cela permettait d'améliorer grandement le traitement du choc thermique, on peut donc supposer que cela va conduire aussi à une amélioration de la prédiction de l'écoulement.

Les résultats de la Figure 8 montrent une évolution similaire à celle obtenue sur le maillage fin. Une fois de plus l'écoulement de type couche limite laisse la place à un écoulement à deux vortex principaux qui dégèrent et induisent des instabilités dans l'écoulement. Toutefois dans cette simulation apparaît une différence notable. L'évolution de la perturbation est freinée et modifiée par les remaillages. L'effet lissant de la technique de remaillage conduit à une diminution des perturbations et ainsi les vitesses dans la zone en pied de lingot semblent légèrement réduites mais surtout la taille des vortex est inférieure.

L'autre modification est la concentration de la vitesse le long de l'axe ce qui n'apparaît pas avec le maillage fixe. Dans cette zone le remaillage induit une augmentation du nombre d'éléments mais il se peut que cela soit insuffisant par rapport à la taille des éléments qui reste plus élevée dans le reste de la partie liquide. L'utilisation d'un maillage fixe ne permet pas de prédire la macroségrégation, on n'a donc dans la simulation précédente quasiment aucune variation de la concentration le long de l'axe. Il se peut donc que cela soit une des raisons de l'apparition de cet écoulement très important le long de l'axe. La carte de concentration est en effet très différente entre ces deux simulations (cf. Figure 9 où apparaît une ségrégation positive significative le long de l'axe). Cet effet n'apparaîtrait donc pas dans les simulations sur maillage fixe.

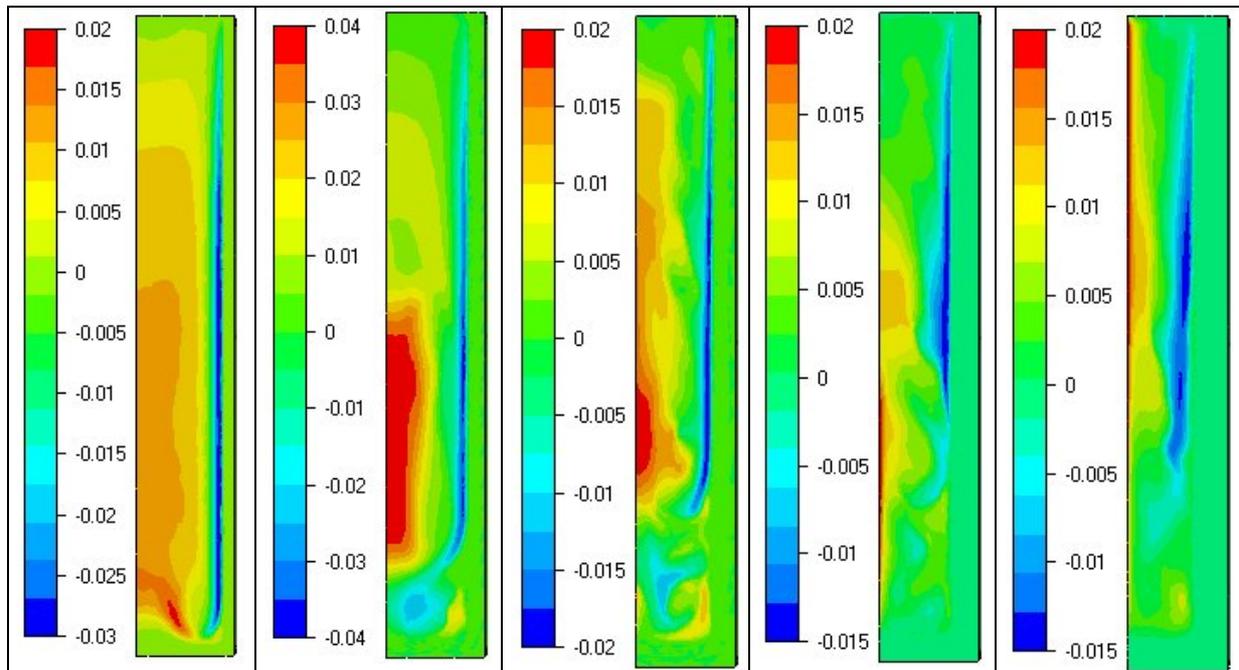


Figure 8 : Vitesse verticale (en m/s) pour le remaillage 2d5 à t= 20s, 45s, 70s, 90s et 120s

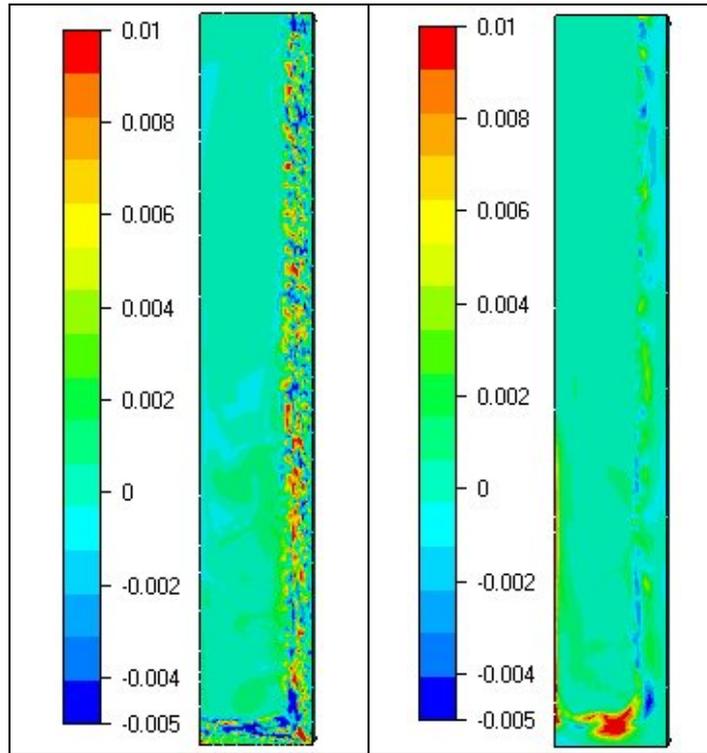


Figure 9 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) à t=90s entre la simulation sur maillage fin aux parois et sur l'axe (à gauche) et avec remaillage 2d5 (à droite)

Pour vérifier cette hypothèse il est donc nécessaire d'effectuer un calcul avec remaillage en conservant une concentration constante dans tout le domaine pour comparer avec les résultats sur maillage fixe. Ces résultats présentés sur la Figure 10 montrent des similitudes importantes entre les deux simulations. Cependant l'écoulement n'est pas aussi concentré sur l'axe. On remarque en particulier que la vitesse verticale positive à 120s est présente sur une zone assez large alors que lorsque l'on ajoute la ségrégation, le maximum se situe uniquement sur l'axe. La vitesse atteinte est alors plus élevée. Il semblerait donc que la ségrégation soit à l'origine de cette modification de l'écoulement qui n'apparaît pas avec le maillage fixe raffiné aux parois et sur l'axe. Cet exemple démontre une fois de plus le couplage fort existant entre la résolution de l'écoulement et la macroségrégation.

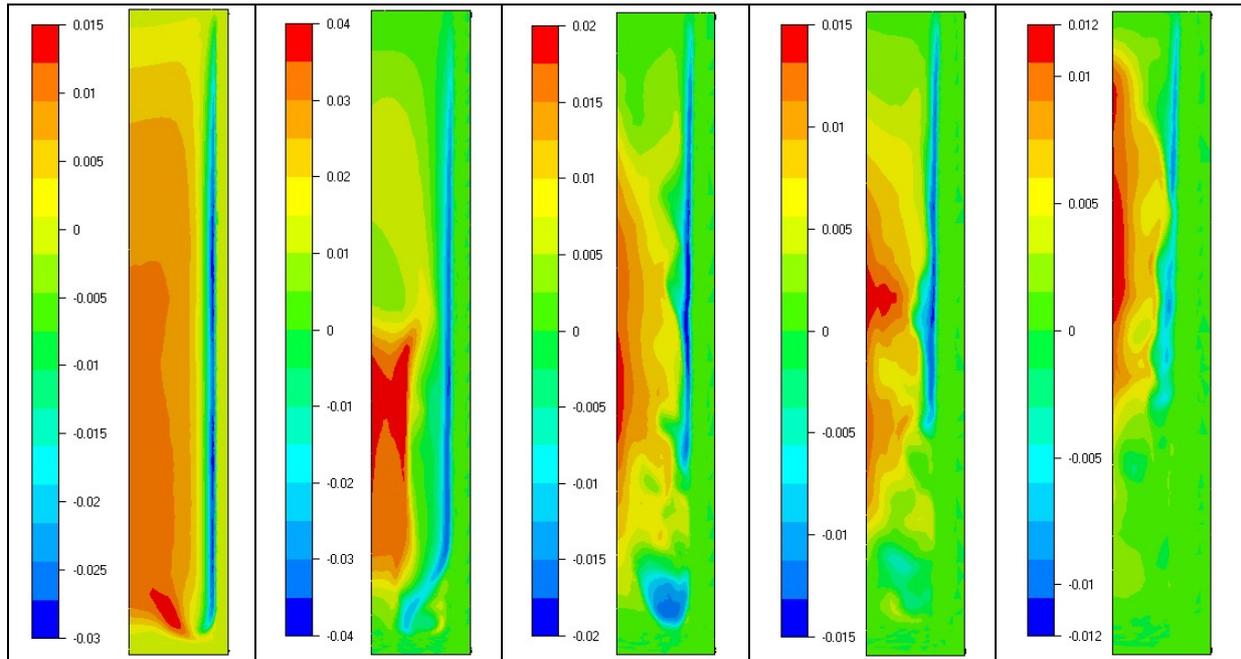


Figure 10 : Vitesse verticale (en m/s) pour le remaillage 2d5 sans ségrégation à t= 20s, 45s, 70s, 90s et 120s

Simulation sur le quart de lingot avec un maillage fixe

De manière à tester l'effet de l'angle de la portion de cylindre, nous avons réalisé aussi des calculs sur une portion de 90°. Le premier maillage sur ce quart de lingot utilise la même taille de maille que pour le maillage initial et comprend donc environ 268 000 éléments. Nous pourrions ainsi comparer directement avec la première simulation puisque les maillages sont équivalents.

L'évolution de l'écoulement, illustrée sur la Figure 11, est très proche de celle obtenue lors de la simulation sur le portion de 30°. Les oscillations à proximité de la paroi se retrouvent aussi dans cette simulation. Cela conduit une fois de plus à la formation de nombreuses instabilités qui finissent par dominer l'écoulement.

L'étude des champs de température (cf. Figure 12) en début de refroidissement montre de manière équivalente que le choc thermique a produit des perturbations qui se développent et amplifient ces instabilités.

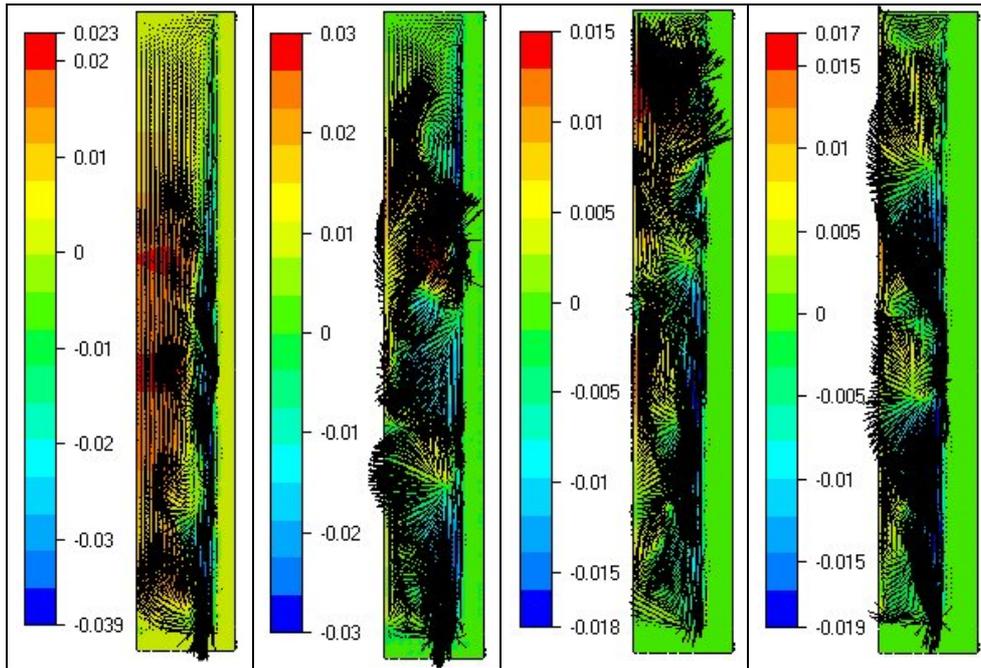


Figure 11 : Vitesse verticale (en m/s) et vecteur vitesse sur le quart de lingot avec le maillage initial à t= 45s, 60s, 90s et 120s

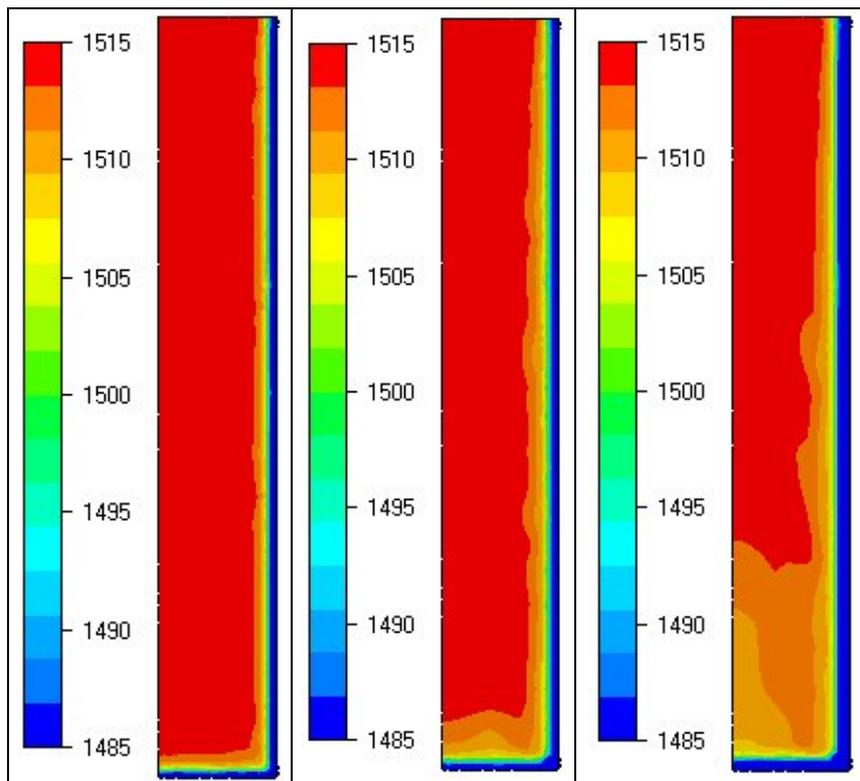


Figure 12 : Température (en °C) sur le quart de lingot avec le maillage initial à t=20s, 30s et 45s

En conclusion, les résultats obtenus au niveau de l'écoulement et de la température ne sont pas affectés par la portion de cylindre qui est simulée. Toutefois dans ces deux cas, le fait d'utiliser un maillage fixe conduit à une absence de macroségrégation qui pourrait avoir un

effet notable sur l'écoulement et introduire une évolution différente. D'autre part il est à noter que l'aspect 3D de l'écoulement est sans doute affecté par la portion de lingot simulée, comme nous le verrons dans la suite. Nous pensons toutefois que cet effet est secondaire par rapport à la génération d'instabilités. Le fait que ces instabilités soient 3D ou planes ne change pas leur effet de brassage très important comparativement à un écoulement stable qui aurait tendance à provoquer des ségrégations plus importantes.

Simulation sur quart de lingot avec remaillage

Les simulations précédentes ont montré l'importance du maillage sur la formation et le développement de l'écoulement, nous allons maintenant nous intéresser à deux simulations menées sur le quart de lingot en appliquant le remaillage avec pour objectif 200 000 et 300 000 éléments.

Les Figure 13 et Figure 14 présentent les champs de vitesse à différents instants pour ces deux simulations. On note comme précédemment la formation dès 45s d'une seconde zone de recirculation qui reste stable jusqu'à $t=70s$. A cet instant les instabilités deviennent dominantes, mais pour ces deux calculs on remarque ensuite une évolution différente avec une relative stabilisation ensuite qui laisse apparaître un écoulement dominant. Cet écoulement est concentré sur le haut de la cavité pour la simulation quart_3d5 et du type de celui obtenu sur le maillage fin aux parois et sur l'axe. Par contre l'écoulement présent dans la simulation quart_2d5 est complètement différent avec une concentration de l'écoulement le long de l'axe et des vitesses verticales très importantes.

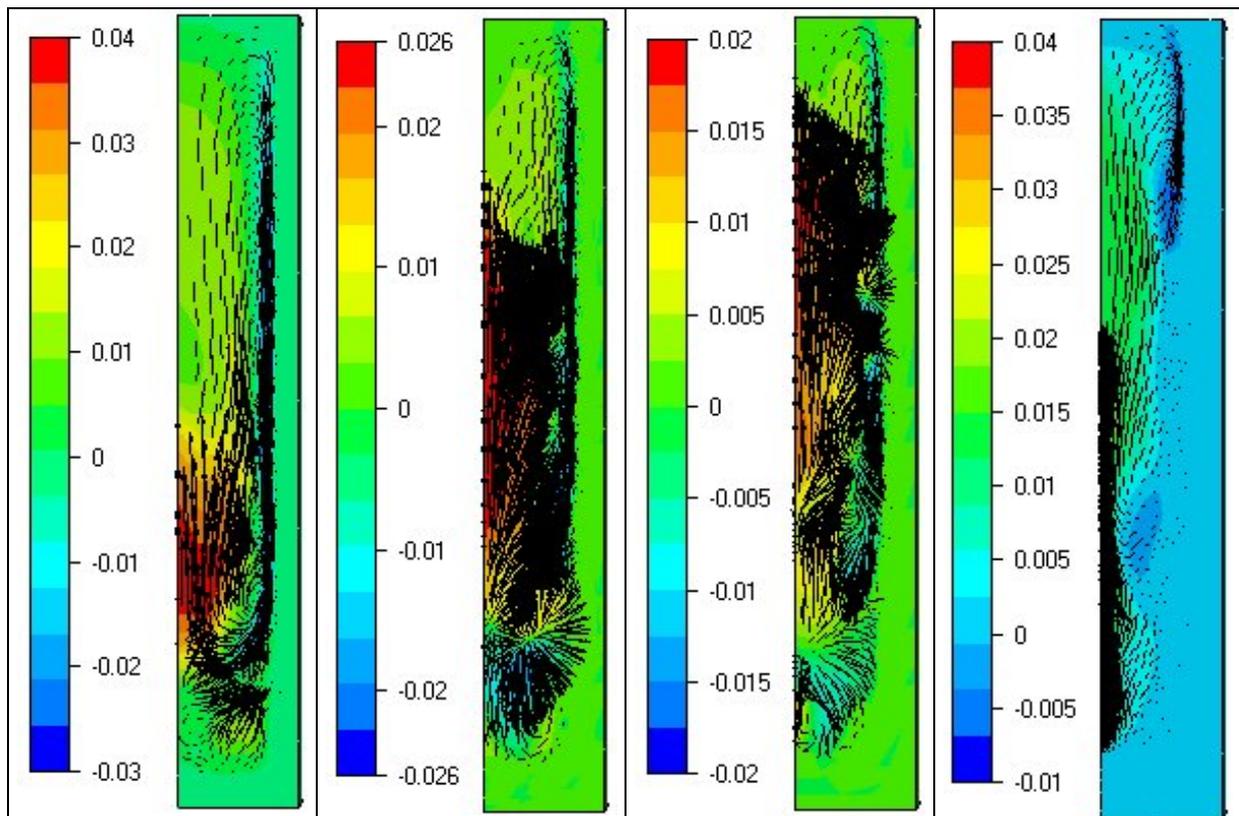


Figure 13 : Vitesse verticale (en m/s) et vecteur vitesse pour la simulation quart_2d5 à $t=45s$, $60s$, $70s$ et $90s$

Ce phénomène rappelle celui observé dans la simulation sur le lingot benchmark. Il apparaît donc que cela puisse être un effet de la densité de maillage insuffisante puisque ce type d'écoulement n'apparaît plus dans la simulation quart_2d5. Toutefois avant de faire des conclusions définitives, il conviendrait d'approfondir l'analyse.

Une autre particularité apparaît sur ces deux simulations, les résultats à 60s sont caractérisés en pied de lingot par un écoulement qui apparaît comme sortant de la pièce. Cela signifie certainement que l'écoulement est 3D et que l'on a donc une recirculation générée entre les deux faces. Pour bien visualiser cet effet nous allons observer maintenant une coupe dans le lingot. Dans le pied du lingot, la section à une hauteur de $z=0.066$, soit 10% de la hauteur totale du lingot, semble bien convenir. Les images de la Figure 15 montrent les vitesses en x, en y et en z sur cette section pour la simulation quart_3d5 à $t=45s$. A cet instant l'écoulement a déjà une structure 3D comme le montre l'aspect non axisymétrique de la solution.

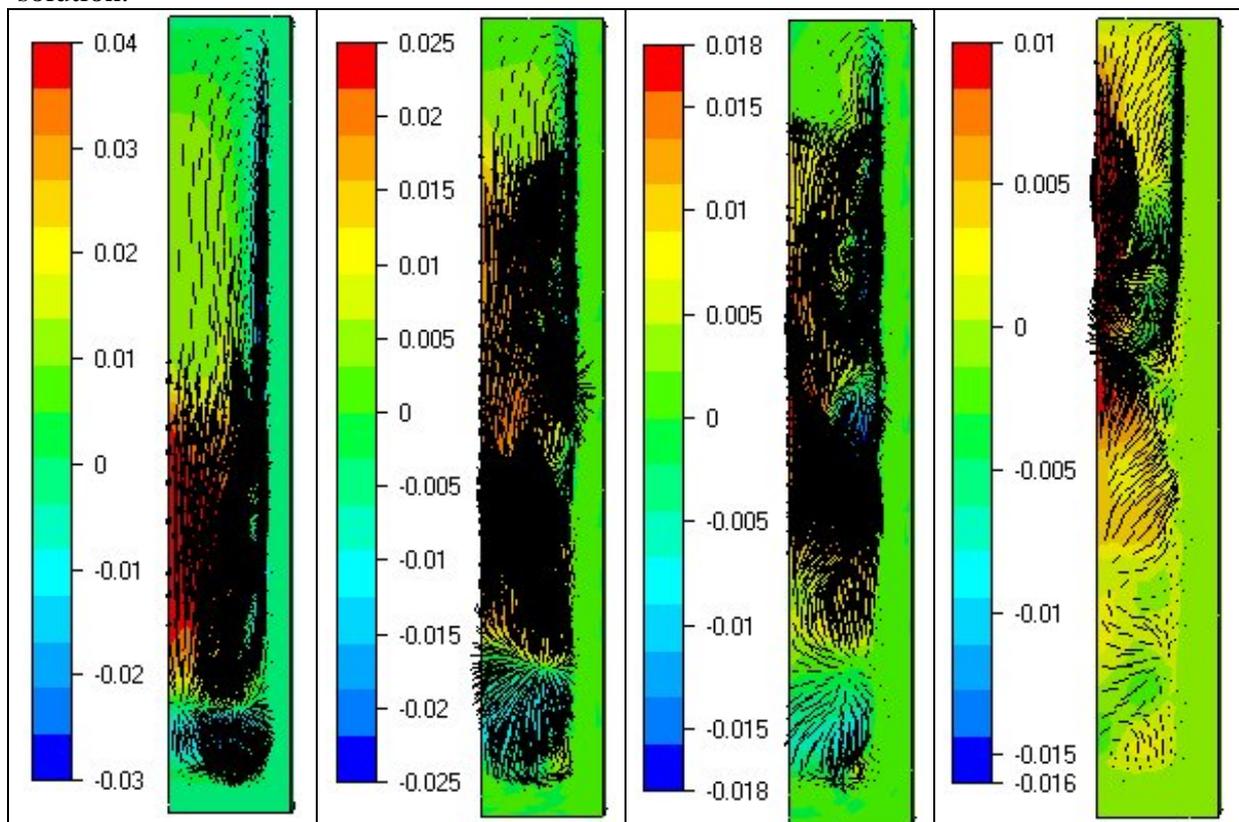


Figure 14 : Vitesse verticale (en m/s) et vecteur vitesse pour la simulation quart_3d5 à $t=45s$, 60s, 70s et 90s

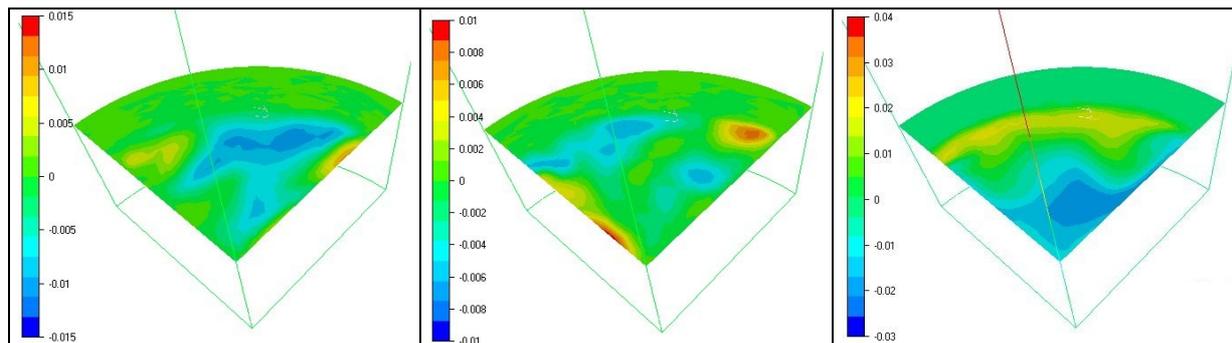


Figure 15 : Vitesse (en m/s) en x, en y et en z sur la section à $z=0.066$ pour la simulation `quart_3d5` à $t=45s$

Toutefois l'aspect 3D n'est pas encore très important mais il va en s'accroissant. Initialement la solution est axisymétrique et l'écoulement reste dans des plans radiaux. Mais rapidement la solution se modifie et tend vers un écoulement complètement 3D avec une recirculation entre les deux faces. La Figure 16 montre le passage d'une solution axisymétrique vers une solution 3D. Cette caractéristique est particulièrement prononcée à $t=90s$ où l'on peut voir que la vitesse verticale est de signe opposé sur les deux faces. On note d'autre part à $t=35s$ que l'écoulement se modifie légèrement à proximité des plans de symétrie. Il se peut que cela soit une modification de l'écoulement qui est en train d'apparaître ou simplement un effet du calcul par le post-processeur dans valeurs dans la coupe.

Cet exemple révèle que la simulation sur une portion géométrique importante du lingot permet l'apparition de structures 3D et modifie complètement l'écoulement. La simulation avec 300 000 éléments ne comporte sans doute pas suffisamment d'éléments pour être considéré comme une solution de référence. D'autre part cette tendance doit être vérifiée sur un maillage fixe pour s'affranchir des lissages du remaillage.

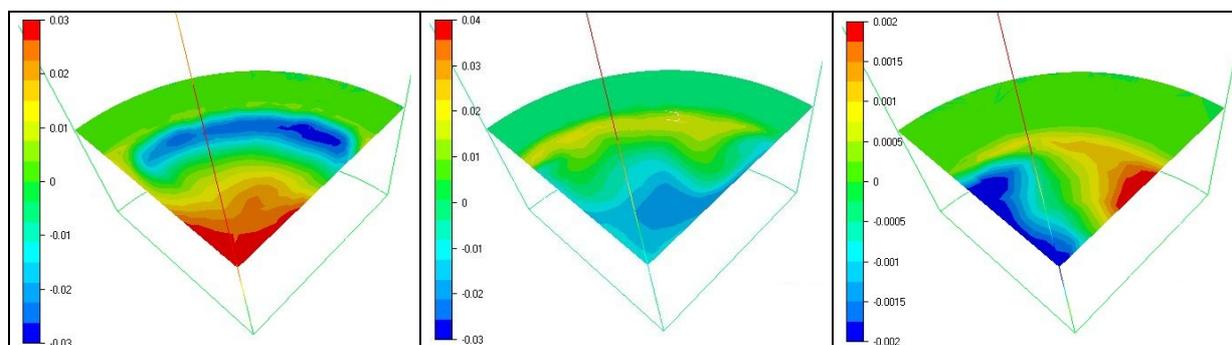


Figure 16 : Vitesse verticale (en m/s) sur la section à $z=0.066$ pour la simulation `quart_3d5` à $t=35s$, $45s$ et $90s$

La visualisation des résultats pour la simulation sur le quart de lingot avec le maillage initial présente le même type d'évolution bien qu'elle soit un peu plus lente. Les images de la Figure 17 montre la dégénérescence de l'aspect axisymétrique de la solution pour obtenir vers 120s un écoulement très similaire à celui apparu dans la simulation `quart_3d5`. On peut ainsi conclure que l'apparition de l'écoulement 3D si elle dépend du maillage (un maillage trop grossier ne permettant pas l'apparition de ces structures complexes), n'est pas affectée par

l'utilisation du remaillage et semble dans ces deux cas se renforcer progressivement à partir d'un écoulement initial axisymétrique.

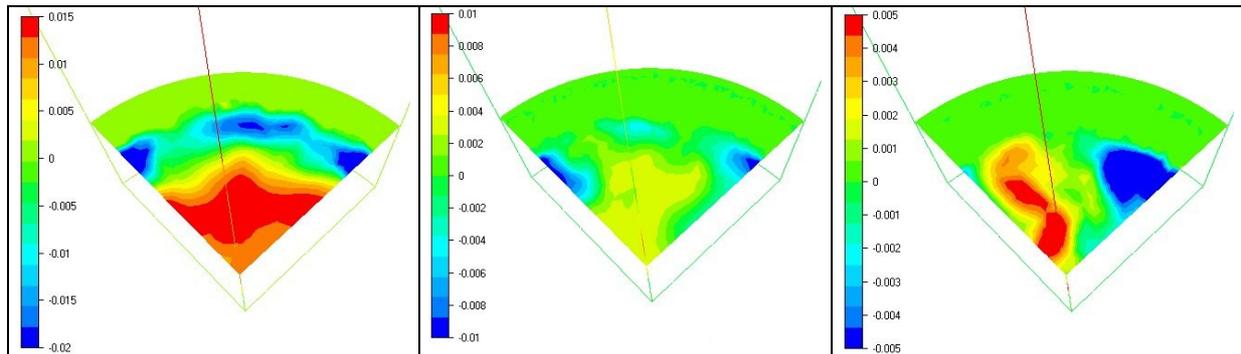


Figure 17 : Vitesse verticale (en m/s) sur la section $z=0.066$ pour la simulation sur le quart de lingot avec le maillage initial à $t=45s, 90s$ et $120s$

Pour finir l'étude de l'aspect 3D de l'écoulement, il est nécessaire de voir comment se comporte un maillage sur une portion plus étroite du lingot. Notre cas de référence avec son maillage raffiné aux parois et sur l'axe est tout à fait approprié et révèle une évolution différente. La Figure 18 regroupe les résultats à différents temps, dans chacun de ces cas la solution apparaît bien axisymétrique même si quelques perturbations sont visibles. Ces irrégularités peuvent cependant provenir de la coupe à travers un maillage non structuré. De toute façon ces modifications de l'écoulement sont négligeables par rapport à celles précédemment observées.

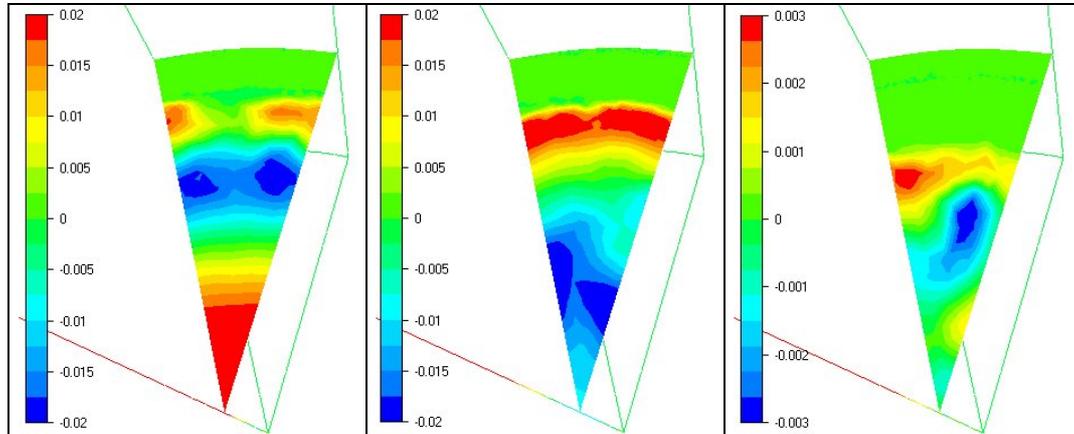


Figure 18 : Vitesse verticale (en m/s) dans la section à $z=0.066$ pour la simulation avec le maillage raffiné aux parois et sur l'axe à $t=35s, 45s$ et $120s$

En conclusion, il semble que l'angle de la portion de cylindre simulée affecte l'écoulement qui restera axisymétrique si elle est égale ou inférieure à 30° . En effet des perturbations commencent à apparaître pour cette valeur sans toutefois avoir l'espace nécessaire pour se développer. De telles évolutions ne peuvent bien entendu pas être captées par une simulation 2D. D'autre part dans tous nos calculs, l'écoulement est initialement axisymétrique et ne se déstabilise que vers 45s. Cette instabilité correspond à la même période temporelle que la formation d'un vortex secondaire important. Il est possible que ces deux

phénomènes soient liés et se renforcent mutuellement. Mais nous manquons de résultats pour pouvoir affirmer et démontrer ce lien.

Ces calculs nous ont aussi montré l'importance du maillage sur les résultats. L'utilisation d'un maillage trop grossier conduisant à des instabilités le long du front de solidification qui perturbent ensuite considérablement l'écoulement. Enfin nous avons aperçu un écoulement particulier dans la simulation `quart_2d5` qui correspond à ce qui a été observé sur le lingot benchmark. Cependant cet écoulement est moins critique et permet tout de même une résolution plus correcte de la ségrégation. La densité de maillage est cependant supérieure dans les calculs sur le lingot intermédiaire. Les problèmes sur le benchmark proviennent donc certainement d'une densité de maille trop faible.



ANNEXE D

Analyse du début de solidification du lingot lsmr (Lingot Simplifié avec Moule et Réfractaire)

Description du cas test

Le cas test étudié ici est constitué d'un lingot, d'un réfractaire et d'un moule plans (Figure 1). Ce cas test aura donc l'avantage de présenter une configuration 2D qui permettra de réduire grandement le nombre d'éléments nécessaires. L'utilisation de l'approche pseudo-2D, impliquant un seul élément dans l'épaisseur, a en effet été introduite dans la méthode de remaillage. Le lingot est refroidi uniquement par le moule et le réfractaire, la surface libre est considérée comme adiabatique. Le moule et le réfractaire sont en contact avec l'air extérieur et sont refroidis par convection naturelle uniformément sur toutes leurs faces. Le lingot, le réfractaire et le moule sont initialement à de températures uniformes de respectivement 1515°C pour le lingot et 250°C pour le moule et le réfractaire. Les caractéristiques du lingot, du moule et du réfractaires sont présentées dans le Tableau 1, le Tableau 2 et le Tableau 3.

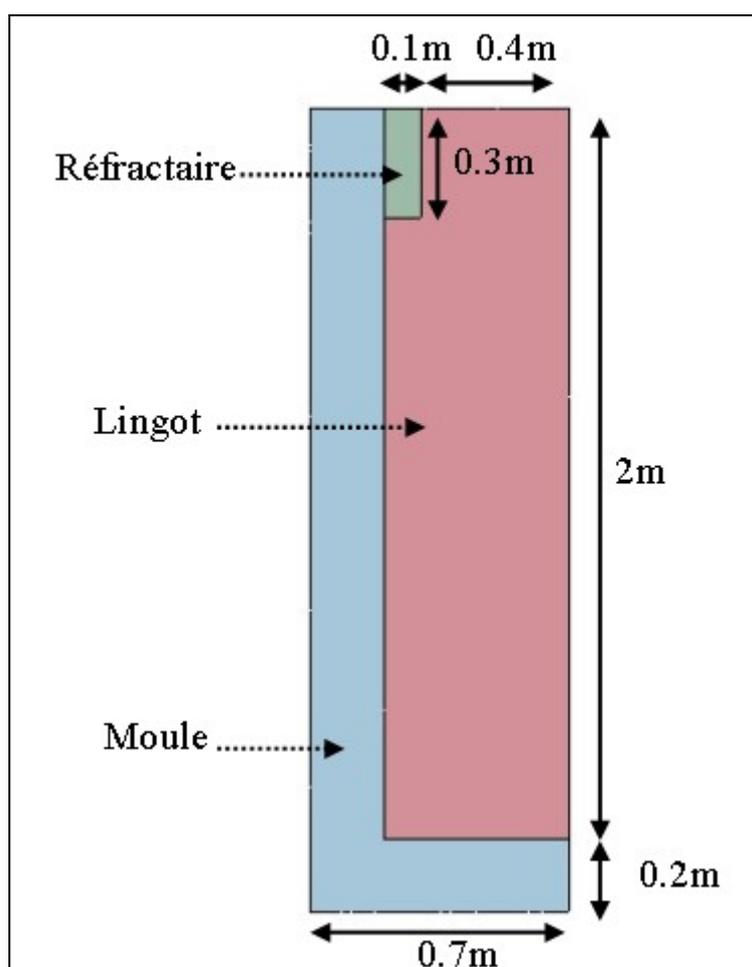


Figure 1 : Schéma du lingot, du moule et du réfractaire

Tableau 1 : Caractéristiques de l'alliage du lingot

| | |
|---|---|
| Masse volumique de référence ρ_0 | 7060 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 500 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Viscosité dynamique μ | 4.2 10 ⁻³ Pa s |
| Coefficient de dilatation thermique β_T | 8.85 10 ⁻⁵ K ⁻¹ |
| Chaleur latente de fusion Δh_{ls} | 3.09 10 ⁵ J kg ⁻¹ |
| Température de fusion du fer pur T_{ls} | 1538 °C |
| Pente du liquidus m | -80 K (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de partition k_p | 0.18 |
| Espacement dendritique secondaire λ_2 | 100 μm |
| Coefficient de dilatation solutal β_c | 4.16 10 ⁻² (wt%) ⁻¹ |
| Coefficient de diffusion solutal D_c | 10 ⁻⁹ m ² s ⁻¹ |
| Température initiale T_0 | 1515 °C |
| Concentration initiale c_0 | 0.38 wt% |
| Transfert thermique avec le moule | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Transfert thermique avec le réfractaire | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |

Tableau 2 : Caractéristiques matériau du moule et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|--|
| Masse volumique ρ | 7000 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 30 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 540 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Tableau 3 : Caractéristiques matériau du réfractaire et conditions aux limites

| | |
|-------------------------------------|---|
| Masse volumique ρ | 1300 kg m ⁻³ |
| Conductivité thermique κ | 0.7 W m ⁻¹ K ⁻¹ |
| Chaleur massique c_p | 1050 J kg ⁻¹ K ⁻¹ |
| Coefficient d'échange thermique h | 100 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 50 °C |
| Température initiale T_0 | 250 °C |

Evolution de l'écoulement

L'évolution de l'écoulement dans le lingot comporte différentes phases en début de solidification qui peuvent être caractérisées par la présence de vortex ou la formation d'une couche limite et d'une boucle de recirculation principale. En effet, initialement l'origine du mouvement se trouve vers la paroi refroidie en contact avec les moules. La convection naturelle génère un mouvement descendant le long de la paroi. La boucle de recirculation est alors très mince et proche de la paroi mais elle s'élargit progressivement pour prendre en compte toute la cavité. Les Figure 2 et Figure 3 montrent bien cet élargissement qui atteint le plan de symétrie aux alentours de 46s. La limitation de cette boucle de recirculation par la paroi va conduire à une stabilisation progressive de la forme de l'écoulement. On note en effet que les écoulements à 246s et 326s sont très similaires aussi bien pour V_x que pour V_z , bien que la progression du front de solidification décale au fur et à mesure la position de la boucle de recirculation.

D'autre part l'analyse des vitesses maximales permet de montrer que le maximum des vitesses est obtenu très rapidement. En effet au bout de seulement 46s environ le pic de

vitesse en z est atteint (cf. Figure 4). Ensuite l'écoulement est freiné par la zone pâteuse et la force motrice pour la convection naturelle diminue ainsi que la hauteur de la zone ce qui implique une diminution du nombre de Rayleigh initialement égal à $1.2 \cdot 10^9$. Et donc un ralentissement de l'écoulement. Les courbes de la Figure 4 révèlent aussi que la vitesse négative en z est quasiment égale à la vitesse maximale en x. La bifurcation de l'écoulement en pied du lingot conserve donc la vitesse d'entraînement générée dans la couche limite. Par contre on note une symétrie entre les courbes V_x max (maximum de la vitesse en x) et V_z max (maximum de la vitesse en z), les maximum de l'un correspondant au minimum de l'autre. Cela peut indiquer que dans cette zone globalement la norme de la vitesse est spatialement conservée mais se répartit entre les deux composantes malgré la variation temporelle.

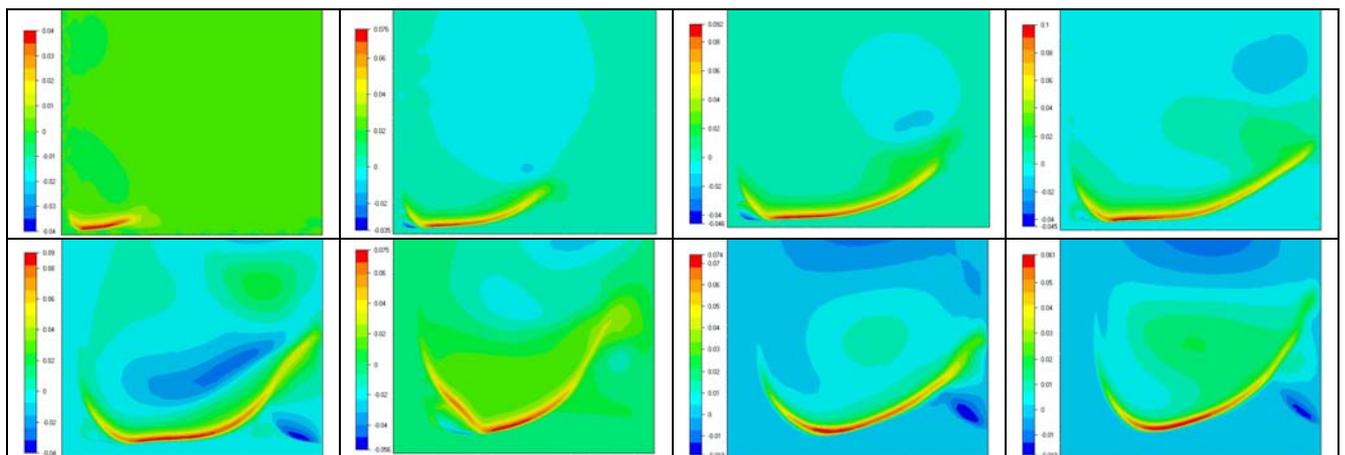


Figure 2 : Evolution de la vitesse horizontale (en m/s) en bas du lingot (t=16s, 26s, 36s, 46s, 96s, 196s, 246s, 326s)

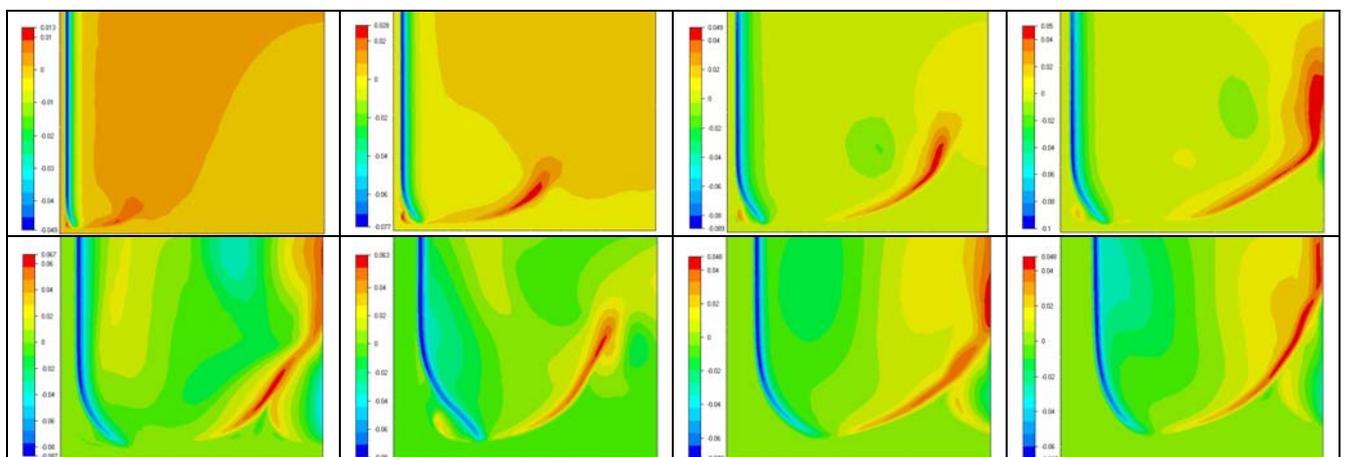


Figure 3 : Evolution de la vitesse verticale (en m/s) en bas du lingot (t=16s, 26s, 36s, 46s, 96s, 196s, 246s, 326s)

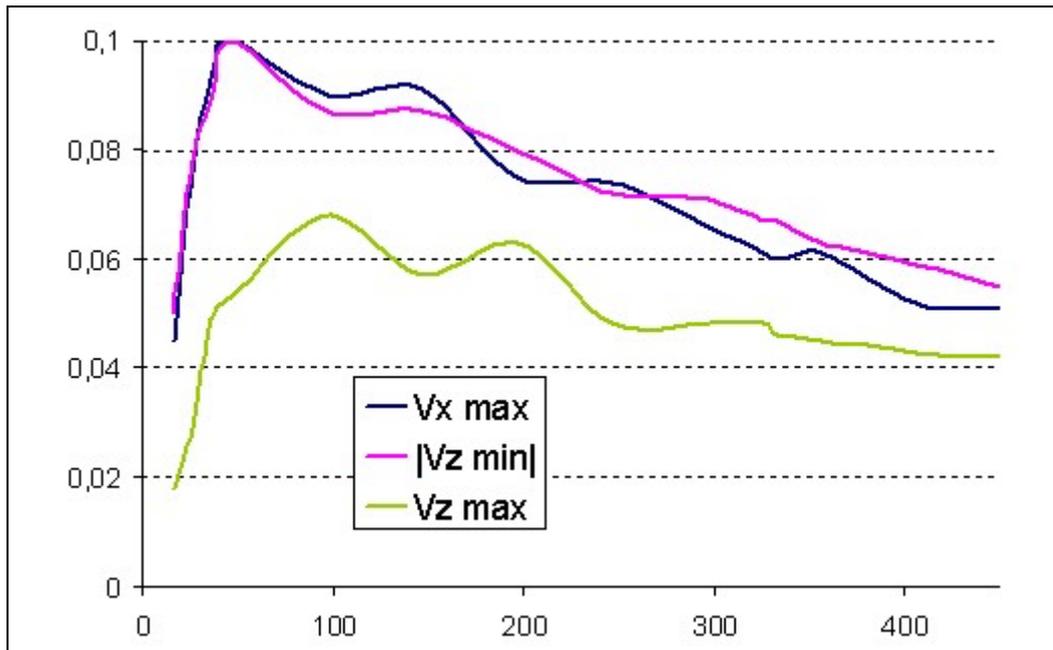


Figure 4 : Evolution de la vitesse maximale en x et en z et de la valeur absolue de la vitesse minimale en z

Description des vortex

Les Figure 2 et Figure 3 montrent aussi l'apparition de deux principaux vortex en pied de lingot près de la zone de contact avec le moule, où l'écoulement de couche limite bifurque, et près du plan de symétrie. Cette dernière zone est la plus stable puisqu'elle se maintient pendant tout le début de la solidification et influence largement l'écoulement général et la macroségrégation comme nous le verrons par la suite. Malgré une croissance importante et perturbatrice vers 196s elle se stabilise ensuite. La capture de cette zone de recirculation est donc particulièrement importante contrairement aux deux autres vortex que nous allons voir maintenant. En effet en plus deux vortex présentés, un troisième se forme naturellement dans l'angle entre le moule et le réfractaire.

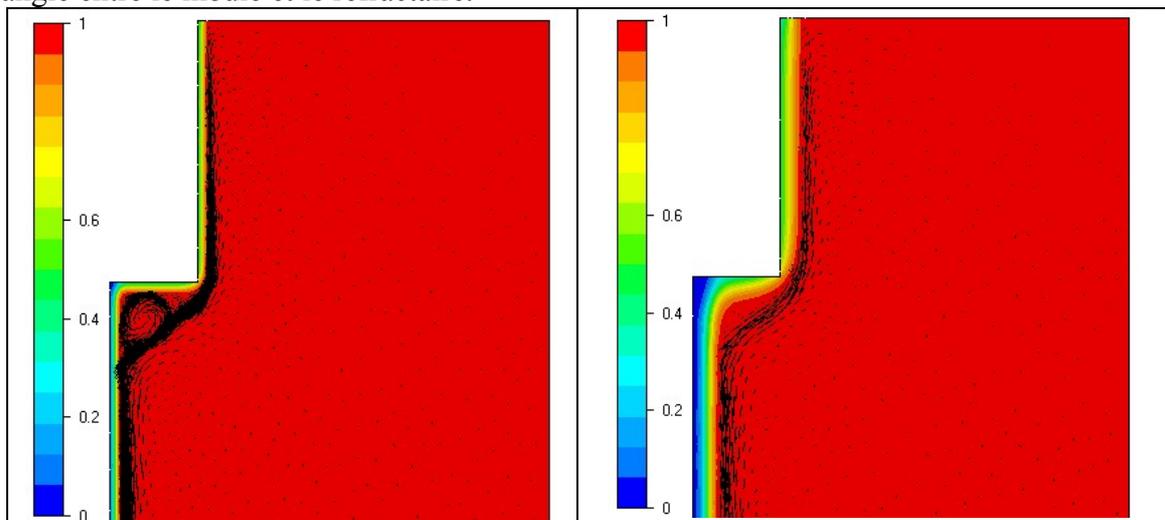


Figure 5 : Zone de recirculation sous le réfractaire, vecteur vitesse et fraction liquide (t=26s et t=96s)

Toutefois sa durée de vie est assez limitée comme le montre les courbes de la Figure 5. D'autre part ce vortex est de faible dimension et ne perturbe pas l'écoulement principal. Cette zone de recirculation peut toutefois conduire à un léger appauvrissement un peu en dessous du vortex puisque le soluté sera entraîné vers le haut et réinjecté dans le liquide sans que cette zone puisse profiter de l'enrichissement provenant de l'écoulement principal. Toutefois étant donnée la durée assez brève de ce phénomène, ces effets seront négligeables pour cette simulation.

Le vortex en pied de lingot vers la surface refroidie est lui plus durable mais finit quand même par disparaître à 246s alors qu'il est encore bien formé à 196s (cf. Figure 6). L'effet de ce vortex devrait être assez prononcé car il apparaît dans une zone où l'écoulement arrivant est enrichi de tout le soluté rejeté le long de la couche limite. Cette zone de contact entre le l'écoulement principal et le vortex constitue donc un point d'arrêt qui devrait conduire à une accumulation de soluté.

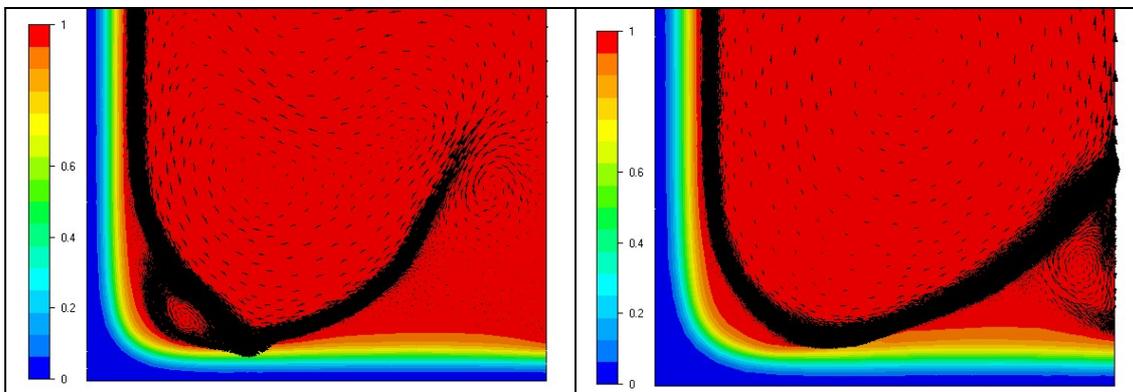


Figure 6 : Zone de recirculation en pied de lingot vers la paroi, vecteur vitesse et fraction liquide (t=196s et t=246s)

Ces exemples d'étude des vortex montrent bien à quel point la prédiction du champ de vitesse est importante pour expliquer les éventuelles évolutions de la concentration et même la forme du front de solidification. Ainsi la Figure 6 montre que la fraction liquide est bombée dans le vortex principal, cela indique donc localement une solidification plus précoce et donc certainement un appauvrissement en soluté dans cette zone.

Un autre phénomène apparaît aussi au milieu de la zone liquide. Lors de l'élargissement de la zone de recirculation principale il apparaît un vortex au dessus de la « langue » de vitesse horizontale élevée en pied de lingot. Cet effet est dû à la mise en mouvement rapide du fluide qui provoque cette dépression juste au dessus. Ensuite lors de l'entrée en contact avec le plan de symétrie on observe un dédoublement de ce vortex (cf. Figure 7) du fait de la nouvelle bifurcation de l'écoulement due au « rebond » de l'écoulement sur le plan de symétrie. Cet exemple illustre bien la complexité de l'écoulement et son évolution tortueuse en début de solidification. Le problème consiste ensuite à savoir s'il est nécessaire de simuler toute cette évolution pour être capable de prédire correctement la macroségrégation. Pour l'instant aucune réponse rigoureuse n'a pu être apportée.

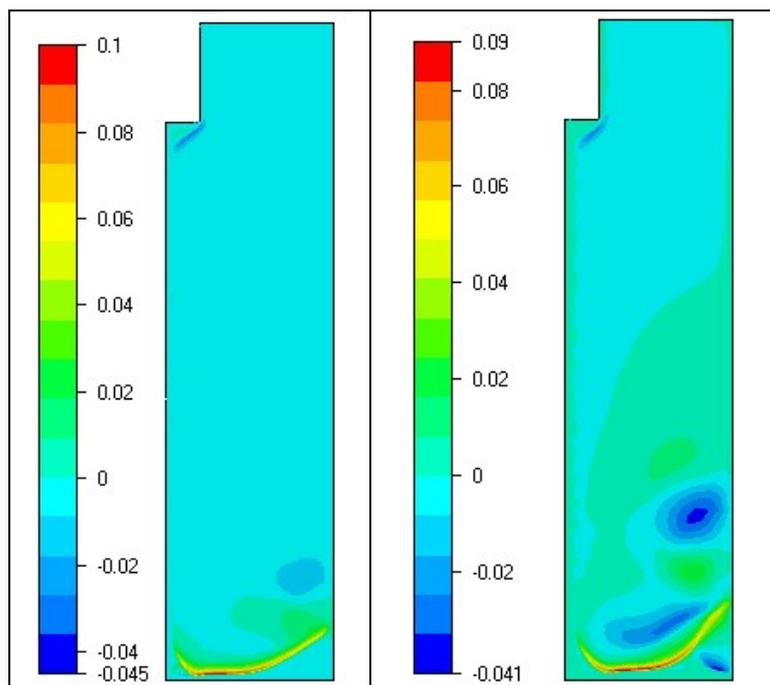


Figure 7 : Dédoublage du vortex, vitesse horizontale (en m/s) à t=46s et t=96s

Evolution de la concentration moyenne

Pour finir voyons l'effet de ces vortex et des autres caractéristiques décrites plus haut sur l'écoulement dans le lingot. La Figure 8 présente la courbe des écarts de concentration en conservant une échelle proche du maximum et du minimum pour la figure de gauche alors qu'à droite l'échelle a été modifiée pour mettre en valeur les zones de ségrégation positive et négative.

La première remarque consiste à noter l'appauvrissement dans la zone de contact avec le réfractaire (sauf près de la surface). Cet appauvrissement s'explique très bien par le rejet de soluté qui s'effectue dans cette zone et qui est entraîné par l'écoulement, comme dans cette zone la solidification est comparativement très lente, la zone pâteuse freine peu l'écoulement. La zone du vortex en dessous du réfractaire présente aussi un appauvrissement mais vraiment faible qui n'est d'ailleurs pas décelable sur la figure de gauche. Par contre les effets des deux vortex au pied du lingot sont aisément identifiables puisque l'on voit nettement la zone enrichie par le vortex proche de la paroi et la zone appauvrie par le vortex due au plan de symétrie. Ce dernier vortex induit d'ailleurs une zone légèrement enrichie juste au dessus par l'entraînement d'une partie du liquide de l'écoulement principal vers le front de solidification.

La figure de droite impose aussi de remarquer un appauvrissement dans la partie liquide du domaine. A priori on pourrait s'interroger sur l'origine de cette zone de ségrégation négative qui correspond à la zone où remonte l'écoulement principal. Cela s'explique par l'origine du fluide. En effet si le liquide qui est en contact pendant une partie du trajet avec une zone en train de se solidifier et appauvrie comme celle en pied de lingot et bien la concentration au liquidus sera plus faible. Et ainsi cette zone correspond en fait à l'écoulement de liquide froid passé près du front de solidification appauvrie en soluté. Cette hypothèse est d'ailleurs vérifiée lorsque l'on visualise les courbes de températures (après un changement d'échelle) sur la Figure 9.

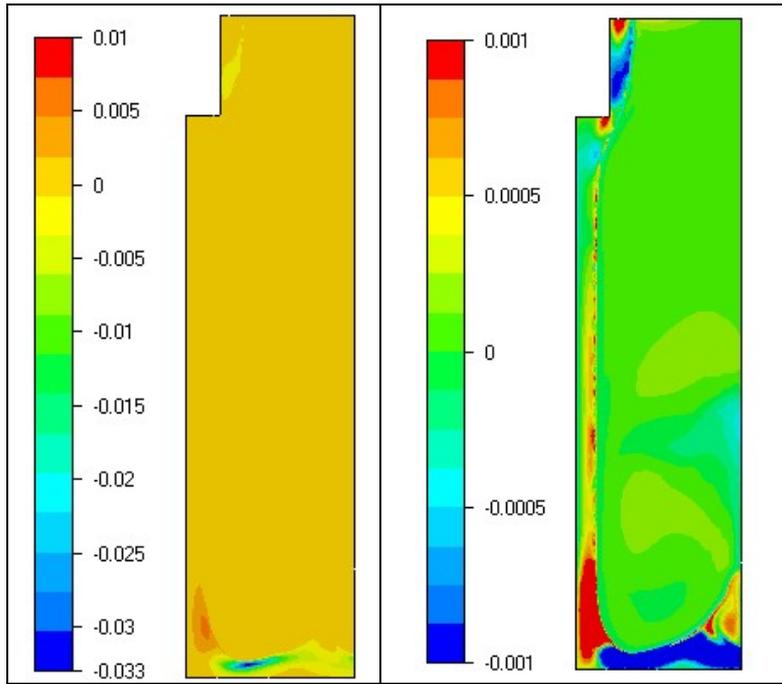


Figure 8 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) à t=326s (changement de l'échelle sur la figure de droite)

Cette étude du début de la solidification sur le lingot lsmr a permis de mettre en avant la complexité de l'écoulement après la formation de la couche limite sur la zone en contact avec le moule. D'autre part le couplage entre l'apparition des vortex et les écarts de concentration moyenne a été mis en évidence.

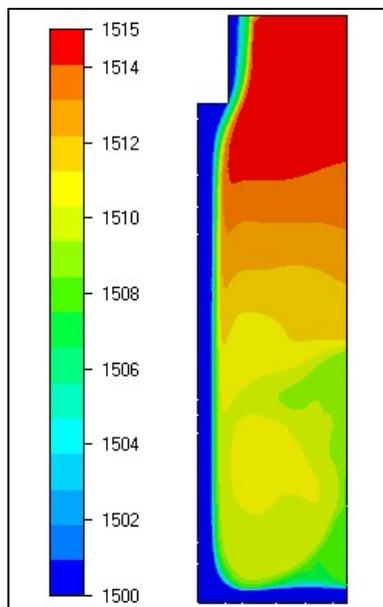


Figure 9 : Courbes de température (en °C) à 326s après un changement d'échelle

Description du lingot seul

Une autre simulation a été réalisée qui prend en compte seulement le lingot et remplace la présence du moule et du réfractaire par respectivement une condition de transfert thermique convectif et par une paroi adiabatique. La Figure 10 rappelle les dimensions et les nouvelles conditions que l'on impose. Le Tableau 4 fournit ensuite les données supplémentaires ou modifiées par rapport au lingot lsmr présenté précédemment.

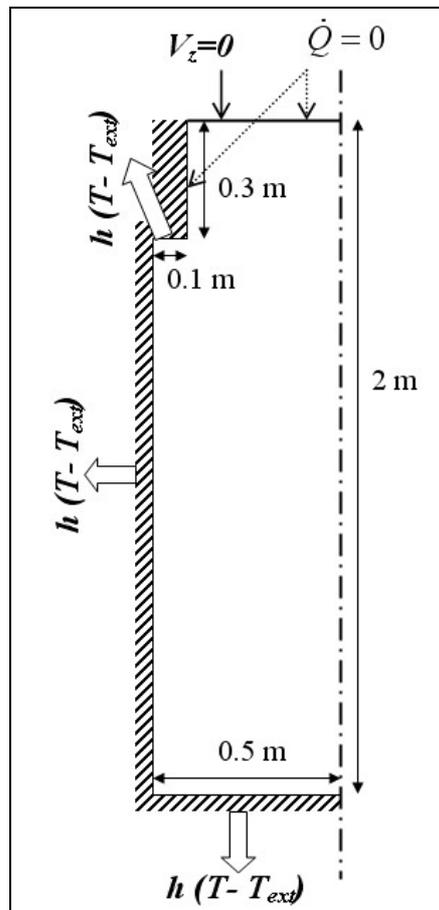


Figure 10 : Schéma du lingot et du moule

Tableau 4 : Conditions aux limites et initiales pour le lingot seul

| | |
|-------------------------------------|---------------------------------------|
| Température initiale T_0 | 1528 °C |
| Coefficient d'échange thermique h | 500 W m ⁻² K ⁻¹ |
| Température extérieure T_{ext} | 200 °C |

L'objectif de cette simulation supplémentaire est de vérifier l'effet de la prise en compte du moule et du réfractaire au niveau de l'écoulement et de la macroségrégation. Pour cela nous allons présenter les résultats de manière similaire à l'analyse précédente en mettant l'accent sur les différences les plus notables.

La mise en données révèle déjà des comportements qui seront différents. La présence des moules induit une chute de température plus brutale en début de solidification par comparaison avec l'imposition d'un flux convectif qui restera beaucoup plus régulier mais

plus important sur le long terme. En effet avec l'augmentation de la température de contact entre la pièce et le moule, le transfert de chaleur diminue. Alors que dans le cas d'un flux convectif la diminution ne provient que de la baisse de la température de la pièce. Cet écart affectera donc la solution mais on peut estimer que son importance ne faussera pas pour autant la comparaison car les coefficients d'échange thermique pour le lingot seul ont été pris égaux aux coefficients de transfert thermique avec les moules.

Evolution de l'écoulement pour le lingot seul

La formation de l'écoulement dans ce type de lingot suit toujours la même logique avec le développement d'une couche limite le long de la paroi et la déviation de l'écoulement en pied de lingot avec une boucle de recirculation qui s'élargit pour finir par atteindre le plan médian. Cette évolution est confirmée par les résultats obtenus sur le lingot seul avec l'évolution de la vitesse horizontale sur la Figure 11 et de la vitesse verticale sur la Figure 12. On distingue aussi clairement sur ces figures la formation des vortex de pied de lingot. L'aspect le plus important sur ces images est l'instabilité de l'écoulement qui semble plus prononcée que précédemment, des boucles de recirculation de plus faible dimension apparaissent. Le vortex principal situé dans le coin droit oscille plus fortement.

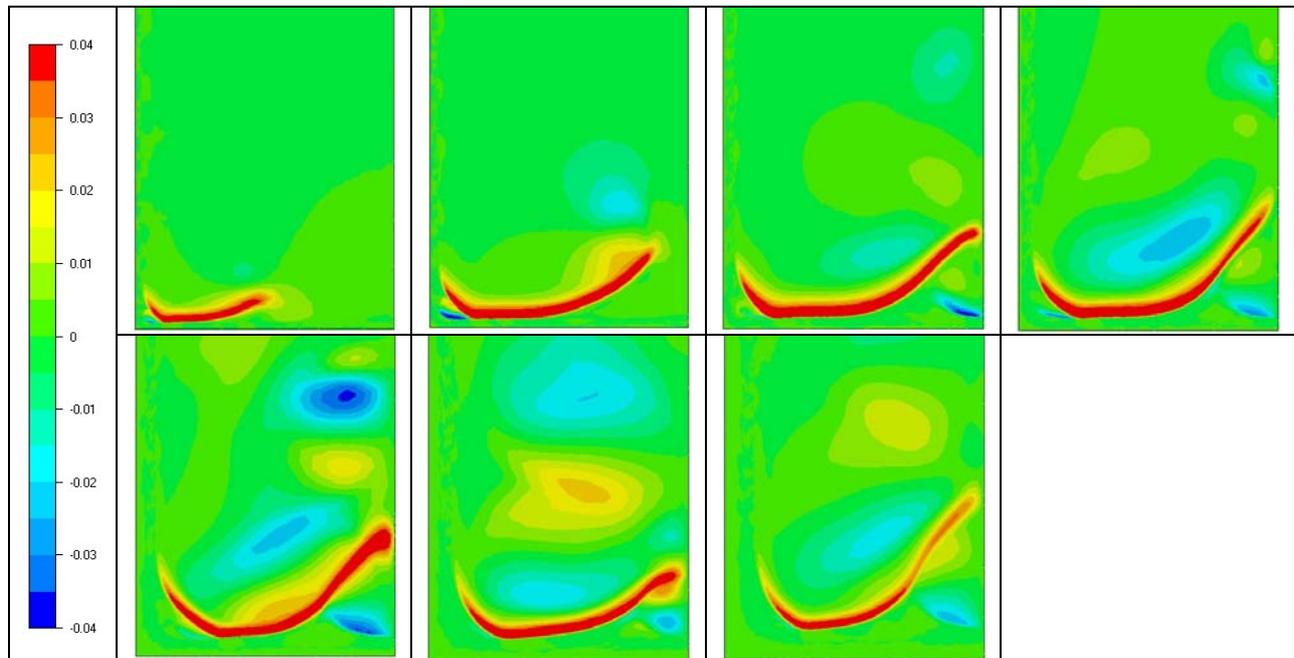


Figure 11 : Evolution de la vitesse horizontale (en m/s) en bas du lingot seul (t=26s, 40s, 60s, 80s, 150s, 200s, 300s)

Toutefois ces variations ne sont visibles que parce que les écoulements sont très similaires. La conclusion que l'on peut tirer de cette rapide comparaison se divise en deux points. Le premier point est que la présence ou non de moule ne modifie pas fondamentalement l'écoulement en pied de lingot. Par contre l'effet est très sensible sur la partie haute en contact avec le réfractaire. La Figure 13 montre que la couche limite débute pour le lingot seul en dessous de l'épaule du réfractaire. La recirculation dans la partie masselotte sera donc beaucoup plus déconnecté du reste du lingot. En effet la condition d'adiabaticité (appliquée sur la hauteur verticale dans la zone du réfractaire) est beaucoup plus stricte que la présence d'un réfractaire qui induit tout de même des échanges de chaleur et un

refroidissement local même s'il est très lent après le premier contact thermique. L'accélération du fluide s'effectuant sur une distance moindre les vitesses atteintes seront donc plus faibles. D'autre part le transport de soluté dans cette zone sera aussi affecté. Cette différence se résorbera avec la solidification lorsque le front de solidification aura atteint l'épaisseur du réfractaire.

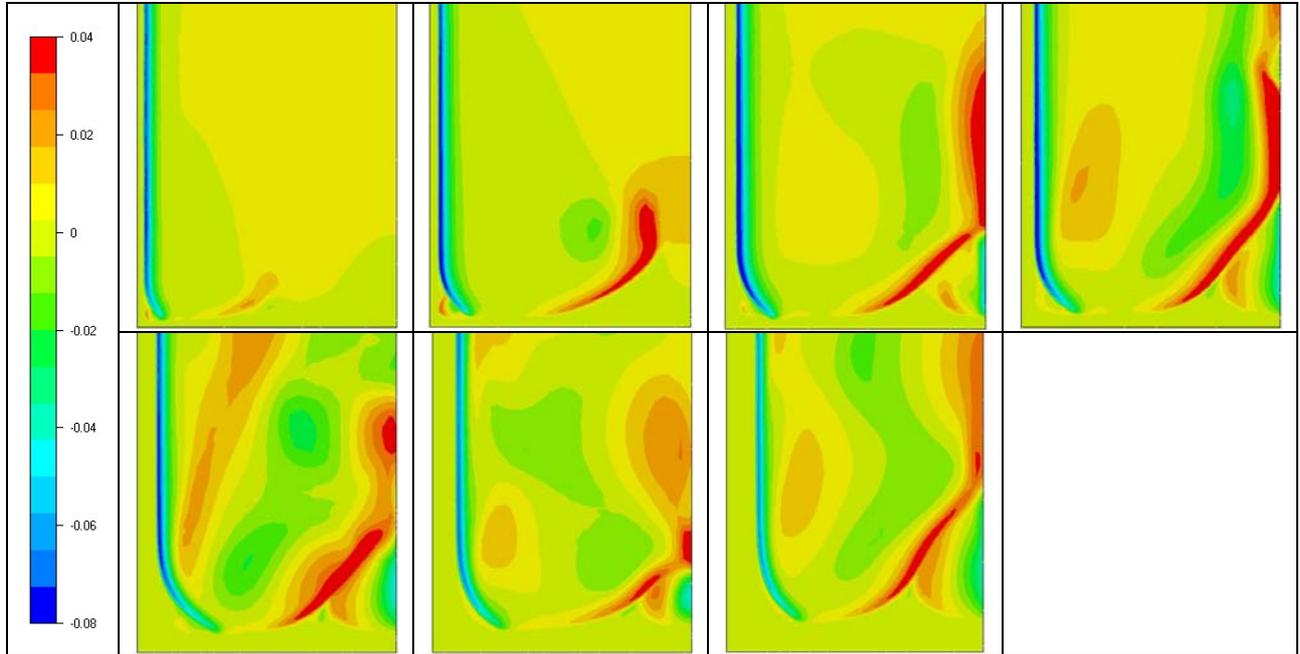


Figure 12 : Evolution de la vitesse verticale (en m/s) en bas du lingot seul (t=26s, 40s, 60s, 80s, 150s, 200s, 300s)

Le deuxième point est plus discutable, cette comparaison révèle les différences d'instabilités de l'écoulement entre deux simulations assez proches. De plus ces deux simulations sont fortement contraintes par l'imposition d'un seul élément dans l'épaisseur et par les deux plans de symétrie. Ainsi malgré cette rigidité du système, des instabilités locales se développent, croissent et disparaissent de manière différente entre les deux calculs. Certes les vortex principaux restent aux mêmes positions avec les mêmes amplitudes à quelques oscillations près. Ainsi lors de comparaisons quantitatives entre des simulations, il faudra tenir compte de cette part variable de l'écoulement. On peut supposer de plus que la diminution de la rigidité du système entraînera une plus grande liberté d'évolution de ces mini-vortex instationnaires.

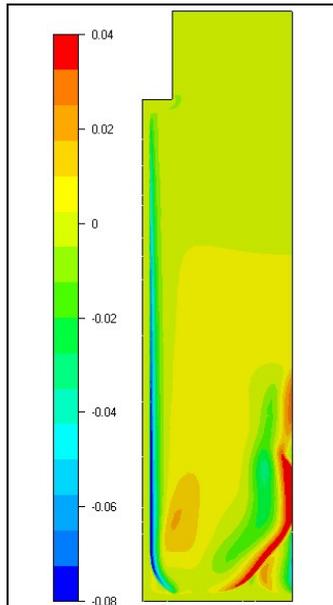


Figure 13 : Vitesse verticale (en m/s) pour le lingot seul à t=80s, vue complète du lingot

Description des vortex pour le lingot seul

Les vortex qui apparaissent dans la simulation sur le lingot seul sont situés aux mêmes positions que sur la simulation complète sauf la recirculation en dessous du réfractaire qui n'est pas présente à cause de l'imposition de la paroi adiabatique. La Figure 14 montre la présence des deux vortex bien formés à t=130s et la disparition du plus petit dès 200s. Une évolution très similaire à celle observée précédemment même si les temps ne sont pas identiques.

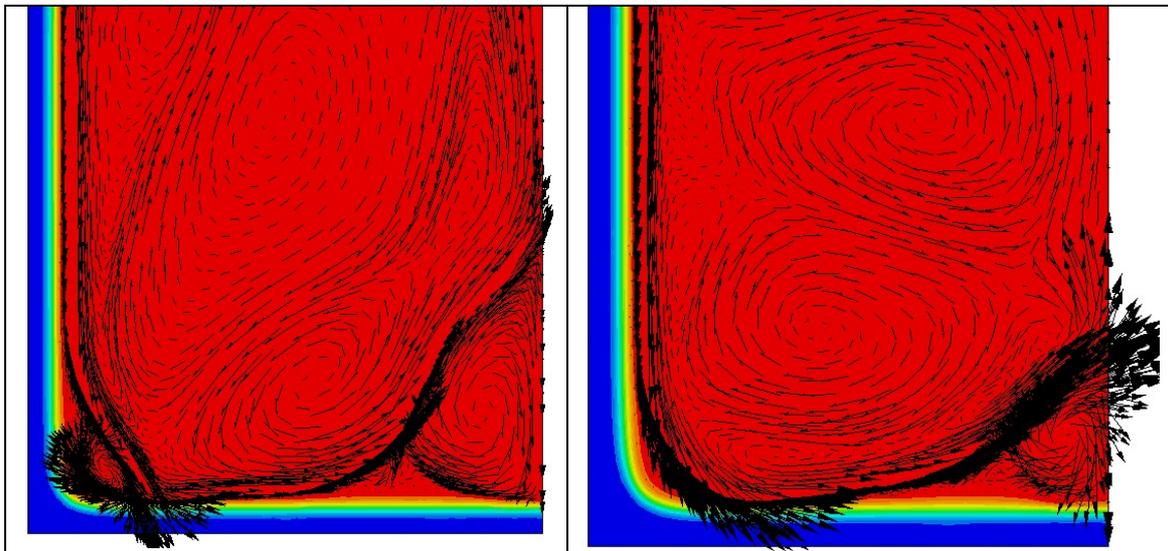


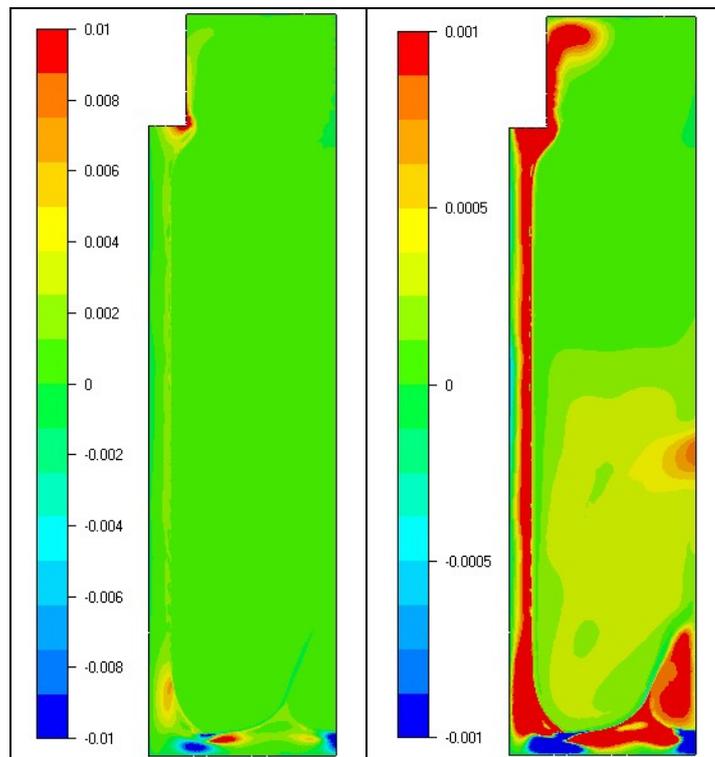
Figure 14 : Vortex en pied du lingot seul à t=130s et t=200s

Ces vortex ont un effet important sur la macroségrégation en début de solidification et donc leur durée de stabilité et leurs oscillations affecteront sans doute la macroségrégation dans cette zone.

Evolution de la concentration moyenne pour le lingot seul

Le dernier point à étudier est bien sûr la macroségrégation. Et là les résultats divergent plus fortement. La Figure 15 révèle en effet une ségrégation plus faible mais plus généralisée pour le lingot seul. La couche limite est partout enrichie en soluté par la solidification et seulement deux poches de ségrégation négative sont formées par les vortex. Si ces résultats de début de solidification ne sont pas représentatifs de la carte finale de macroségrégation, ils permettent tout de même de réaliser les variations possibles sur la ségrégation par une modification de l'écoulement.

On peut ainsi noter que la formation d'un vortex dans le plan médian en bas conduit à la fois à la formation d'une ségrégation négative mais aussi à l'emprisonnement d'une partie du soluté dans la boucle de recirculation qui n'est donc pas redistribué dans le bain liquide.



**Figure 15 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) pour le lingot seul à t=320s
(changement d'échelle sur la figure de droite)**

Cette dernière comparaison révèle la variabilité des résultats de macroségrégation sur un lingot, au moins en début de solidification. La suite du calcul introduisant de nombreuses variations dans l'écoulement mais celui-ci conservant globalement la même structure on peut supposer que la moyenne sur une période plus longue conduira à des profils de ségrégation plus similaires. Mais cela n'est pas l'objectif de cette annexe, seul le début de la solidification est traité ici, des résultats à des temps plus longs sont présentés dans le corps du texte.

Références

- [AHMAD, 1998] N. Ahmad, H. Combeau, J.L. Desbiolles, T. Jalanti, G. Lesoult, M. Rappaz, C. Stomp. “Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between finite volume method and finite element method predictions and a confrontation with experiments”, *Metall. Mat. Trans. A*, 29, 1997, p.617-630.
- [AKAMATUS, 1995] S. Akamatsu, G. Faivre, T. Ihle. “Symmetry-broken double fingers and seaweed patterns in thin-film directional solidification of a nonfaceted cubic-crystal”, *Physical Review*, E51(5), 1995, p.4751-4773.
- [ALMEIDA, 2000] R.C. Almeida, R.A. Feijóo, A.C. Galeão, C. Padra, R.S. Silva. “Adaptive finite element computational fluid dynamics using an anisotropic error estimator”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 182, 2000, p.379-400.
- [BECKERMANN, 1988] C. Beckermann, R. Viskanta. “Natural convection solid/liquid phase change in porous media”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 31(1), 1988, p.35-46.
- [BECKERMANN, 2000] C. Beckermann. “Modeling of macrosegregation: past, present and future”, *Flemings Symposium*, Boston, June 2000
- [BECKERMANN, 2002] C. Beckermann. “Modelling of macrosegregation: applications and future needs”, *Int. Mat. Rev.*, 47(5), 2002, p.243-261.
- [BELHAMADIA, 2004] Y. Belhamadia, A. Fortin, E. Chamberland. “Three-dimensional anisotropic mesh adaptation for phase-change problem”, *J. Comput. Physics*, 201, 2004, p.753-770.
- [BELLET, 2004a] M. Bellet, V.D. Fachinotti. “ALE method for solidification modelling”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193, 2004, p.4355-4381.
- [BELLET, 2004b] M. Bellet, S. Le Corre, V.D. Fachinotti. “A 2-phase finite element model to study concurrent fluid flow and solid deformation occurring in mushy zones during the solidification of metallic alloys”, *Proc. S2P, Int. Conf. on Semi-Solid Processing of Alloys and Composites*, Limassol, Chypra, 21-23 September, 2004.
- [BENNACER, 2001] R. Bennacer, A. Tobbal, H. Beji, P. Vasseur. “Double diffusive convection in a vertical enclosure filled with anisotropic porous media”, *Int. J. Therm. Sci.*, 40, 2001, p.30-41.
- [BENNON, 1987] W.D. Bennon, F.P. Incropera. “A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – I Model Formulation”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 1987, 30(10), p.2161-2170.

-
- [BERGMAN, 1996] T.L. Bergman, M.T. Hyun. "Simulation of two-dimensional thermosolutal convection in liquid metals induced by horizontal temperature and species gradients", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 39(14), 1996, p.2883-2894.
- [BERTRAND, 1999] O. bertrand, B. Binet, H. Combeau, S. Couturier, Y. Delannoy, D. Gobin, M. Lacroix, P. Le Quere, M. Medale, J. Mencinger, H. Sadat, G. Vieira. "Melting driven by natural convection a comparison exercice: first results", *Int. J. Therm. Sci.*, 38, 1999, p.5-26.
- [BHAT, 1995] M.S. Bhat, D.R. Poirier, J.C. Heinrich. "Permeability cross flow trough columnar-dendritic alloys", *Metall. Mat. Trans. B*, 26, 1995, p.1049-1056.
- [BOETTINGER, 2002] W.J. Boettinger, J.A. Warren, C. Beckermann, A. Karma. "Phase-field simulation of solidification", *Annu. Rev. Mater. Res.*, 32, 2002, p.163-194.
- [BOUSQUET-MELOU, 2002] P. Bousquet-Melou, B. Goyeau, M. Quintard, F. Fichot, D. Gobin. "Average momentum equation for interdendritic flow in a solidifying columnar mushy zone", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 45, 2002, p.3651-3665.
- [BOUSSETTA, 2005] R. Boussetta. *Estimateurs d'erreur et remaillage adaptatif: application à la simulation 3D des procédés de mise en forme des matériaux.*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [BROOKS, 1982] A.N. Brooks, T.J.R. Hughes. "Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 32, 1982, p.199-259.
- [BROWN, 2002] S.G.R. Brown, J.A. Spittle, D.J. Jarvis, R. Walden-Bevan. "Numerical determination of liquid flow permeabilities for equiaxed dendritic structures", *Acta Materiala*, 50, 2002, p.1559-1569.
- [CARSLAW, 1990] H.S. Carslaw, J.C. Jaeger. "Conduction of heat in solids", Second Edition Oxford Science publication, 1990, 540p.
- [CHAKRABORTY, 2002] S. Chakraborty, P. Dutta. "An analytical solution for conduction-dominated unidirectional solidification of binary mixtures", *Appl. Math. Modelling*, 26, 2002, p.545-561.
- [CHAKRABORTY, 2003] S. Chakraborty, P. Dutta. "Three-dimensional double-diffusive convection and macrosegregation during non-equilibrium solidification of binary mixtures", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 46, 2003, p.2115-2134.
- [CHUNG, 2001] J.D. Chung, J.S. Lee, M. Choi, H. Yoo. "A refined similarity solution for the multicomponent alloy solidification", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 44, 2001, p.2483-2492.
- [COMBEAU, 1996] H. Combeau, J.-M. Drezet, A. Mo, M. Rappaz. "Modeling of microsegregation in macrosegregation computations", *Metall. Mat. Trans. A*, 27, 1996, p.2314-2327.

-
- [COSTES, 2004] F. Costes. *Modélisation thermomécanique tridimensionnelle par éléments finis de la coulée continue d'aciers*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2004.
- [COUPEZ, 2000] T. Coupez. "Génération de maillage et adaptation de maillage par optimisation locale", *Revue européenne des éléments finis*, 9, 2000, p.403-423.
- [DANIELS, 2004] P.G. Daniels, M. Punpocha. "Cavity flow in a porous medium driven by differential heating", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 47, 2004, p.3017-3030.
- [DANTZIG, 1989] J.A. Dantzig. "Modelling, liquid-solid phase changes with melt convection", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 28, 1989, p.1769-1785.
- [DESBIOLLES, 2003] J.L. Desbiolles, Ph. Thevoz, M. Rappaz. "Micro-/macroségrégation modeling in casting: a fully coupled 3D model", *Proceedings of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes X*, TMS 2003, p.245-252.
- [DE VAHL DAVIS, 1983] G. De Vahl-Davis. "Natural convection of air in a square cavity: A benchmark numerical solution", *Int. J. Num. Meth. Fluids.*, 3, 1983, p.249-264.
- [FACHINOTTI, 2004] V.D. Fachinotti, M. Bellet. "A diffusion-split method to deal with thermal shocks using standard linear tetrahedral finite elements", *Proc. NUMIFORM'2004, 8th Int. Conf. on Numerical Methods in Industrial Forming Processes*, Columbus (OH, USA), 13-17 june 2004, S. Ghosh, J.M. Castro & J.K. Lee (eds.), American Institute of Physics, New York (2004), p.2258-2263.
- [FELICELLI, 1991] S.D. Felicelli, J.C. Heinrich, D.R. Poirier. "Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys", *Metall. Trans. B*, 22, 1991, p.847-859.
- [FELICELLI, 1997] S.D. Felicelli, D.R. Poirier, J.C. Heinrich. "Macroseggregation patterns in multicomponent N-base alloys", *J. Crystal Growth*, 177, 1997, p.145-161.
- [FLEMINGS, 1974] M.C. Flemings. *Solidification Processing*. McGraw-Hill, 1974, 374 p.
- [FREY, 1999] P.J. Frey, P.-L. George. *Maillages – applications aux éléments finis*. Hermes, 1999, 841 p.
- [FRIES, 2004] T.-P. Fries, H. Matties. "A review of Petrov-Galerkin stabilization approaches and an extension to meshfree methods", <http://opus.tu-bs.de/opus/volltexte/2004/549/>.
- [GANESAN, 1990] S. Ganesan, D.R. Poirier. "Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification", *Metall. Trans. B*, 21, 1990, p.349-361.
- [GHIA, 1982] U. Ghia, K.N. Ghia, C.T. Shin. "High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method", *J. Comp. Phys.*, 48, 1982, p.387-411.

-
- [GOYEAU, 1996] B. Goyeau, J.-P. Songbe, D. Gobin. “Numerical study of double-diffusive natural convection in a porous cavity using the Darcy-Brinkman formulation”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 39(7), 1996, p.1363-1378.
- [GOYEAU, 1997] B. Goyeau, T. Benihaddadene, D. Gobin, M. Quintard. “Averaged momentum equation for flow through a nonhomogeneous porous structure”, *Transport Pours Med.*, 28, 1997, p.19-50.
- [GRUAU, 2004] C. Gruau. *Génération de métriques pour l’adaptation anisotrope de maillages, application à la mise en forme des matériaux*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2004.
- [GUILLEMOT, 2004] G. Guillemot. *Formation de structures de grains dans des alliages à solidification dendritique – Modélisation couplée automates cellulaires et éléments finis*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Nancy, 2004.
- [GUO, 2003] J. Guo, C. Beckermann. “Three-dimensional simulation of freckle formation during binary alloy solidification: effect of mesh spacing”, *Numerical Heat Transfer Part A*, 44, 2003, p.559-576.
- [HAN, 2003] Q. Han, A.J. Duncan, S. Viswanathan. “Permeability measurements of the flow of interdendritic liquid in equiaxed aluminum-silicon alloys”, *Metall. Mat. Trans. B*, 34, 2003, p.25-28.
- [HANNOUN, 2003] N. Hannoun, V. Alexiades, T.Z. Mai. “Resolving the controversy over tin and gallium melting in a rectangular cavity heated from the side”, *Num. Heat Trans. B*, 44, 2003, p.253-276.
- [HANS, 2002] S. Hans, P.-E. Richy, B. Lusson, A. Grellier. “Application de la simulation numérique pour le compréhension des phénomènes et l’optimisation de la solidification de lingots d’acier”, *Congrès Matériaux 2002*, Tours, 21-25 octobre 2002.
- [HEBDITCH, 1974] D.J. Hebditch, J.D. Hunt. “Observations of ingot macrosegregation on model systems”, *Metall. Trans.*, 5, p.1557-1564.
- [HEINRICH, 2004] J.C. Heinrich, D.R. Poirier. “Convection modeling in directional solidification”, *C.R. Mécanique*, 332, 2004, p.429-445.
- [JAOUEN, 1998] O. Jaouen. *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l’analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [JURIC, 1996] D. Juric, G. Tryggvason. “A front-tracking method for dendritic solidification”, *J. Computational Physics*, 123, 1996, p.127-148
- [KAMPFER, 2002] T.U. Kämpfer. *Modeling of macrosegregation using an adaptive domain decomposition*. Ph.D. Thesis, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2002.
- [KOBAYASHI, 1988] S. Kobayashi. “Solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase: theoretical analysis”, *J. Cryst. Growth*, 88, 1988, p.87-96.

-
- [KRUGER, 2003] O. Krüger, M. Picasso, J.-F. Scheid. “A posteriori error estimates and adaptive finite elements for a nonlinear problem related to solidification”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192, 2003, p.535-558.
- [LAN, 2002] C.W. Lan, C.C. Liu, C.M. Hsu. “An adaptive finite volume method for incompressible heat flow problems in solidification”, *J. Comput. Physics*, 178, 2002, p.464-497.
- [LEMMON, 1979] E.C. Lemmon. “Phase-change techniques for finite element conduction codes”, *Numerical Methods in Thermal Problems*, Editors R.W. Lewis and K. Morgan, Pineridge Press, 1979, p.149-158.
- [LE QUERE, 1999] P. Le Quéré, D. Gobin. “A note on possible flow instabilities in melting from the side”, *Int. J. Therm. Sci.*, 38, 1999, p.595-600.
- [LIU, 2005] W. Liu. *Finite element modelling of macrosegregation and thermomechanical phenomena in solidification processes*, Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2005.
- [LOULOU, 1999] T. Loulou, E.A. Artyukhin, J.P. Bardon. “Estimation of thermal contact resistance during the first stages of metal solidification process: I- experiment principle and modelisation”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 42, 1999, p.2119-2127.
- [MAJCHRKAZ, 2004] E. Majchrkaz, B. Mochnacki, J.S. Suchy. “Sensitivity analysis of macrosegregation simulation with respect to partition and diffusions coefficients”, *Int. J. Cast Metals Research*, 17(2), 2004, p.72-78.
- [MARTY, 2001] P. Marty. “Transferts thermiques convectifs”, Cours IUP GSI, INPG, 2001, <http://www.legi.hmg.inpg.fr/~marty/cours-convection-iup3.pdf>.
- [NI, 1991] J. Ni, C. Beckermann. “A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification”, *Metall. Trans. B*, 22, 1991, p.349-361.
- [NI, 1995a] J. Ni, F.P. Incropera. “Extension of the continuum model of transport phenomena occurring during metal alloy solidification – I The conservation equations”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 38(7), 1995, p.1271-1284.
- [NI, 1995b] J. Ni, F.P. Incropera. “Extension of the continuum model of transport phenomena occurring during metal alloy solidification – II Microscopic considerations”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 38(7), 1995, p.1285-1296.
- [OLDENBURG, 1992] C.M. Oldenburg, F.J. Spera. “Hybrid model for solidification and convection”, *Num. Heat Tr. B-Fund.*, 21, 1992, p.217-229.
- [OLIVER, 1987] D.L.R. Oliver, J.E. Sunderland. “A phase change problem with temperature-dependent thermal conductivity and specific heat”, *Int. J. Heat Mass Trans.*, 30 (12), p.2657-2661.
- [PALLE, 1996] N. Palle, J. A. Dantzig. “An Adaptive Mesh Refinement Scheme for Solidification Problems”, *Metall. Mat. Trans.*, 27A, 1996, p.707-718.

-
- [PIWONKA, 1966] T.S. Piwonka, M.C. Flemings. "Pore formation in solidification", *Trans. MSA*, 236, 1966, p.1157-1165.
- [POIRIER, 1987] D.R. Poirier. "Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys", *Metall. Mat. Trans. B*, 18, 1987, p.245-255.
- [PRAKASH, 1989] C. Prakash, V. Voller. "On the numerical solution of the continuum mixture model equations describing binary solid-liquid phase change", *Num. Heat Trans. B*, 15, 1989, p.171-189.
- [PRESCOTT, 1991] P.J. Prescott, F.P. Incropera, W.D. Bennon. "Modeling of dendritic solidification system reassessment of the continuum momentum equation", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 34(9), 1991, p.2351-2359.
- [PRESCOTT, 1996] P.J. Prescott, F.P. Incropera. "Convection heat and mass transfer in alloy solidification", *Advances in Heat Transfer*, 28, 1996, p.231-338.
- [PUSTAL, 2003] B. Pustal, B. Böttger, A. Ludwig, P.R. Sahm, A. Bührig-Polaczek. "Simulation of macroscopic solidification with an incorporated one-dimensional microsegregation model coupled to thermodynamic software", *Metall. Mat. Trans. B*, 34, 2003, p.411-419.
- [RABIA, 2004] B. Rabia. *La formation des structures équiaxes: mouvement des grains, croissance-refusion, conséquences sur les macroségrégations*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Nancy, 2004.
- [RAMOS, 1992] M. Ramos, Y. Cerrato, J. Gutierrez. "An exact solution for the finite Stefan problem with temperature-dependent thermal conductivity and specific heat", *Rev. Int. Froid*, 17 (2), 1994, p.130-135.
- [ROY, 2005] C.J. Roy. "Review of code and solution verification procedures for computational simulation", *J. of Computational Physics*, Vol. 205, 2005, p.131-156.
- [SAEID, 2004] N.H. Saeid, I. Pop. "Transient free convection in a square cavity filled with a porous medium", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 47, 2004, p.1917-1924.
- [SCHNEIDER, 1995] M.C. Schneider, C. Beckermann. "Formation of macrosegregation by multicomponent thermosolutal convection during the solidification of steel", *Metall. Mat. Trans. A*, 26, 1995, p.2373-2388.
- [SINGH, 2001] A.K. Singh, R. Pardeshi, B. Basu. "Modelling of convection during solidification of metal and alloys", *Sadhana*, 26, 2001, p.139-162.
- [STELIAN, 2003] C. Stelian, T. Duffar, I. Nicoara. "Comparison between numerical simulation and experimental measurement of solute segregation during directional solidification", *J. Crystal Growth*, 255, 2003, p.40-51.
- [SUNDARRAJ, 1994] S. Sundarraj, V.R. Voller. "A dual scale model of microsegregation phenomena", *Transport phenomena in solidification, ASME 1994, AMD-vol. 182*, p.29-42.

-
- [SWAMINATHAN, 1997] C.R. Swaminathan, V.R. Voller. "Towards a general numerical scheme for solidification systems", *Int. J. Heat Mass Trans.*, 40(12), 1997, p.2859-2868.
- [TEZDUYAR, 2000] T.E. Tezduyar, Y. Osawa. "Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190, 2000, p.411-430.
- [THIEBAUT, 1999] G. Thiébaud, D. Dall'ava, J.C. Maubrou, G. Paradis, H. Combeau, G. Lesoult, N. Tran-Dihn. "Solidification process and characterization of a mass-gravity foundry ingot", *J. Mat. Proc. Tech.*, 92-93, 1999, p.71-76.
- [THUINET, 2005] L. Thuinet. *Solidification des aciers ternaires: modélisation de la microségregation en croissance dendritique colonnaire, prise en compte de la réaction péritectique*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Nancy, 2005.
- [VANNIER, 1993] I. Vannier, H. Combeau, G. Lesoult. "Numerical model for prediction of final composition of heavy steel ingots", *Mat. Sci. Eng. A*, 173, 1993, p.317-321.
- [VENNEKER, 2002] B.C.H. Venneker, L. Katgerman. "Modelling issues in macrosegregation predictions in direct chill castings", *J. Light Metals*, 2, 2002, p.149-159.
- [VOLLER, 1989] V.R. Voller, A.D. Brent, C. Prakash. "The modeling of heat, mass and solute transport in solidification systems", *Int. J. Heat Mass Trans.*, vol. 32 (9), 1989, p.1719-1731.
- [VOLLER, 1999] V.R. Voller. "A semi-analytical model of microsegregation in a binary alloy", *J. Cryst. Growth*, 197, 1999, p.325-332.
- [WANG, 1993] C.Y. Wang, C. Beckermann. "A unified solute diffusion model for columnar and equiaxed dendritic alloy solidification", *Mater. Sci. Eng. A-Struct.*, 171, 1993, p.199-211.
- [WITHAKER, 1986] S. Whitaker. "Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy's law", *Transport Porous Med.*, 1, 1986, p.3-25.
- [WOLF, 1988] F. Wolff, C. Beckermann, R. Viskanta. "Natural convection of liquid metals in vertical cavities", *Experimental Thermal and Fluid Sciences*, 1, 1988, p.83-91.
- [XU, 1991a] D. Xu, Q. Li. "Numerical method for solution of strongly coupled binary alloy solidification problems", *Num. Heat Tr. A-Appl.*, 20, 1991, p.181-201.
- [XU, 1991b] D. Xu, Q. Li. "Gravity and solidification-shrinkage-induced liquid flow in a horizontally solidified alloy", *Num. Heat Tr. A-Appl.*, 20, 1991, p.203-221.
- [XU, 2001] D. Xu. "A unified microscale parameter approach to solidification transport process-based macrosegregation modeling for dendritic solidification: Part I. Mixture average-based analysis", *Metall. Mat. Trans. B*, 32, 2001, p.1129-1141.

[ZIENKIEWICZ, 2000]

O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor. "The finite element method – Volume 1 The Basis", Fifth Edition, Oxford, Butterworth-Heinemann, 2000.

RESUME

Cette thèse a pour objectif d'étudier la modélisation et la résolution numérique de la macroségrégation pendant la solidification de lingots d'alliages métalliques binaires. La macroségrégation est une hétérogénéité de la concentration en éléments d'alliages à l'échelle du lingot. Ces changements de concentration affectent de manière importante les propriétés mécaniques et chimiques du matériau. Il est donc essentiel de pouvoir prédire ces hétérogénéités pour assurer la qualité des lingots.

Après avoir décrit le contexte tant industriel que bibliographique de ce travail, nous précisons les différents modèles implémentés dans le code de calcul THERCAST, un logiciel de solidification développé au CEMEF. La description des équations macroscopiques employées sera précédée d'une discussion sur la manière de valider la modélisation de la macroségrégation. Nous aborderons ensuite la théorie du remaillage adaptatif et nous décrirons les éléments essentiels de la stratégie de remaillage développée dans le cadre de cette thèse. Ces modèles seront appliqués à la simulation de la solidification de plusieurs lingots. La validation se fera sur un lingot de petite taille par comparaison avec des résultats expérimentaux et des simulations avec d'autres logiciels. Ensuite nous analyserons en détail les prédictions de THERCAST sur un lingot plan, un lingot 3D similaire à un lingot industriel et finalement un lingot plus petit qui nous permettra une étude numérique plus complète.

Les limitations de notre modélisation et les phénomènes qu'elle a permis de mettre en évidence seront enfin discutés et permettront de définir quelques orientations intéressantes pour poursuivre cette étude de la macroségrégation.

Mots-clés : solidification, macroségrégation, éléments finis 3D, remaillage adaptatif

ABSTRACT

This thesis aims at studying the modeling and the numerical resolution of macrosegregation during ingot solidification of binary metallic alloys. Macrosegregation is an heterogeneity of solute concentration at the ingot scale. This solute segregation modifies drastically the mechanical and chemical properties. So it is essential to predict such heterogeneities to ensure the product quality.

After describing the industrial context and a review of the current research in this field, the models implemented in THERCAST (the solidification software developed at CEMEF) are presented. The set of macroscopic equations is preceded by a discussion on the validation of macrosegregation software. Then, the theory of remeshing and our adaptive anisotropic remeshing strategy are explained. These developments are applied to the simulation of different ingots. The first one, a small ingot, is used to validate our code by comparison with experimental results and numerical results from others codes. Then a deeper analysis of THERCAST simulations is made on a large 2D ingot, a 3D ingot similar to an industrial case and an intermediate ingot for more complex numerical studies.

The models limitations and the phenomena identified during this study are finally discussed and will permit to define interesting orientations to continue this work on macrosegregation.

Keywords: solidification, macrosegregation, 3D finite elements, adaptive remeshing
