

---

## 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

certaines 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  $\lambda_2$  est l'espacement interdendritique secondaire,  $k$  une constante égale à 5,  $\tau$  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.

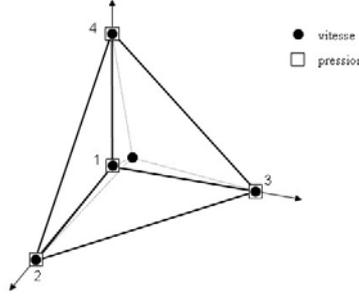


Figure 2-1 : Schéma décrivant l'élément tétraédrique P1+/P1

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  $\varphi_P$  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.  $\tau_{SUPG}$  est le coefficient de stabilisation (cf. [BROOKS, 1982] et [TEZDUYAR, 2000]).

Le calcul du coefficient  $\tau_{SUPG}$ , 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  $\tau_{LSIC}$  et le second dans l'équation de conservation de la masse en faisant intervenir le coefficient  $\tau_{PSPG}$ . On obtient alors l'équation suivante :

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

où  $\tau_{PSPG}$  est le terme de stabilisation de la pression (Pressure-Stabilizing/Petrov-Galerkin) et  $\tau_{LSIC}$  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

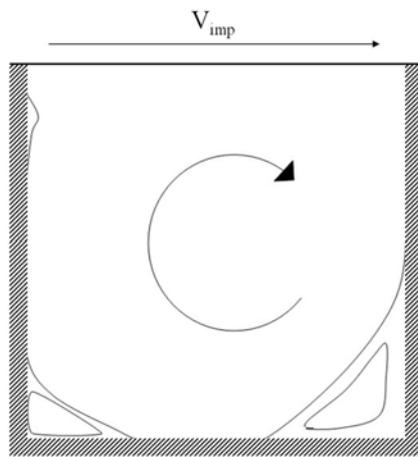
On peut remarquer que toutes ces formulations sont linéaires sauf la dernière. Cependant dans nos calculs nous n'effectuerons qu'une seule itération dans la résolution de Newton-Raphson de ce système.

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  $Re=400$  :

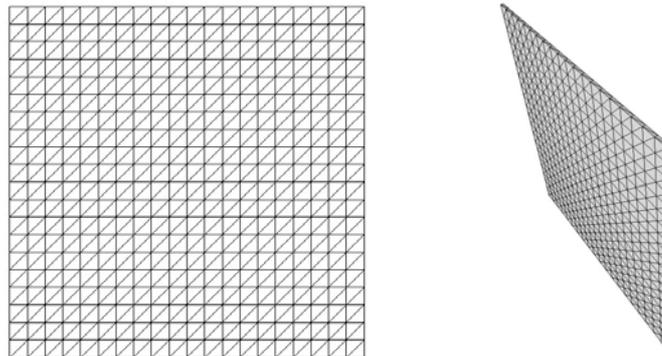
$$\rho = 40 \text{ kg m}^{-3}$$

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

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

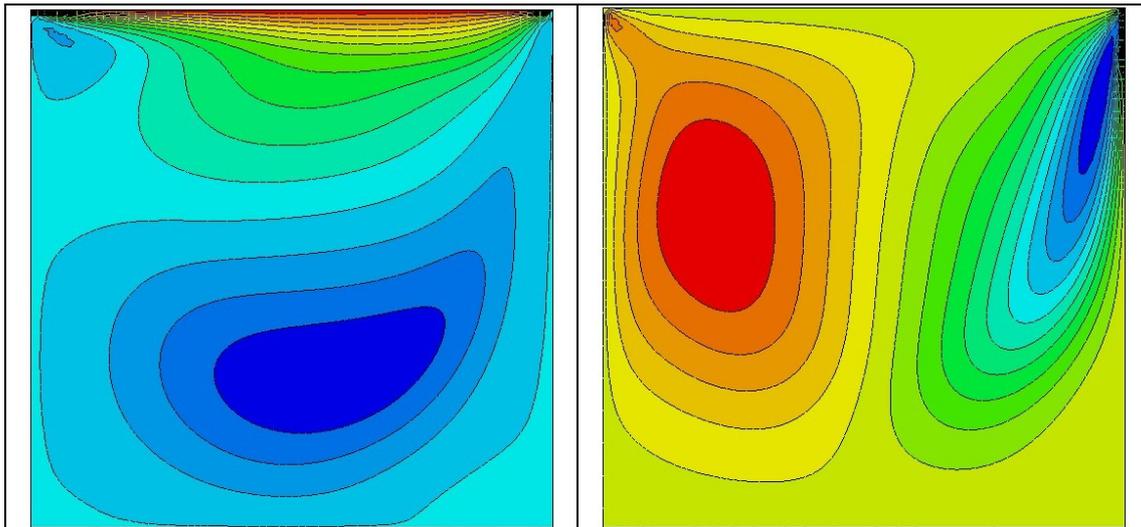
$$V_{imp} = 0.01 \text{ m s}^{-1}$$

**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.

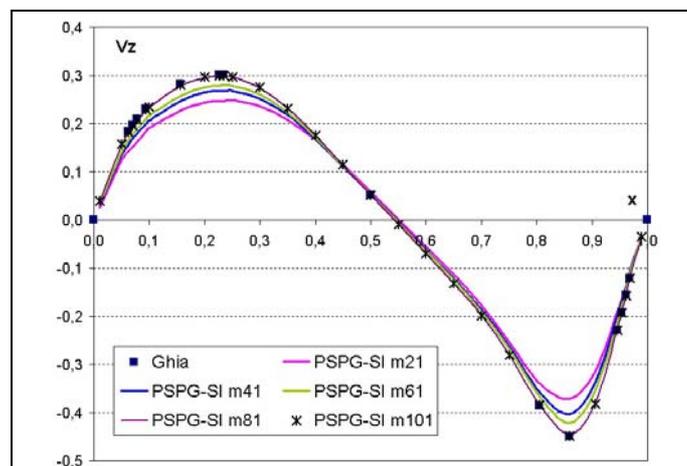


**Figure 2-4 : Isovaleurs des vitesses horizontale et vitesse verticale à  $Re=400$  avec  $dt=0.2s$  pour une résolution PSPG-SI sur le maillage m81**

### 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.

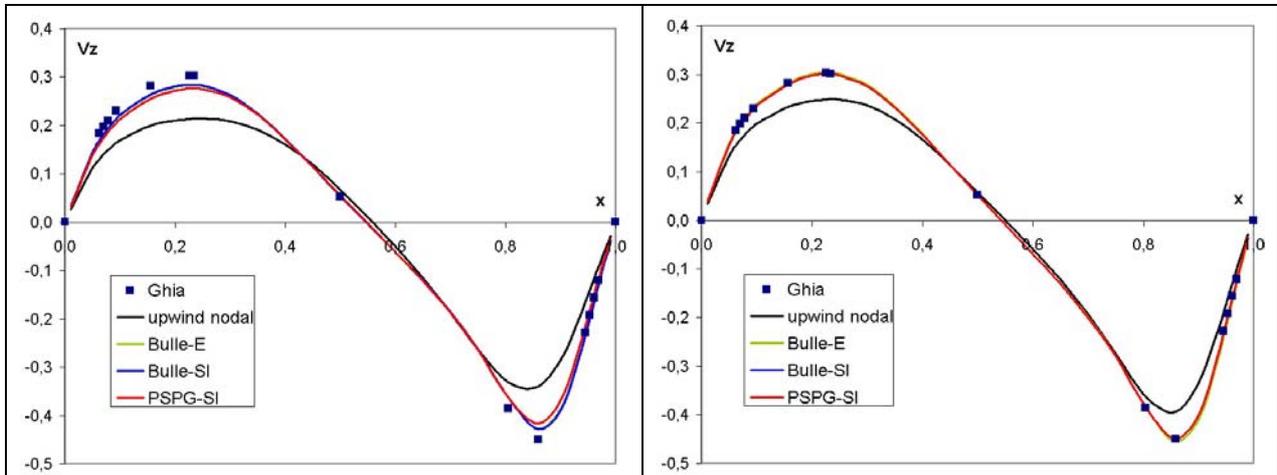


**Figure 2-5 : Test de convergence de la solution pour  $dt=0,2s$  avec le maillage pour la résolution PSPG-SI à  $Re=400$**

### 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**

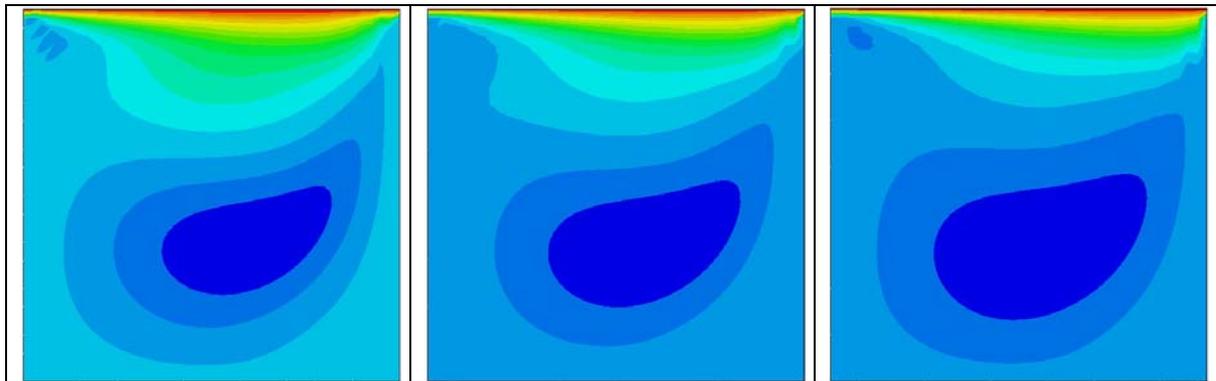
Cet écart diminue avec le raffinement du maillage mais reste important. Pourtant dans cette première comparaison, nous avons utilisé un pas de temps relativement faible de 0.2s qui devrait permettre d'obtenir une bonne solution ( $\Delta t=0.2s$  et  $\Delta x=0.0025m$  pour  $V_{max}=0.01$  m/s). Nous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

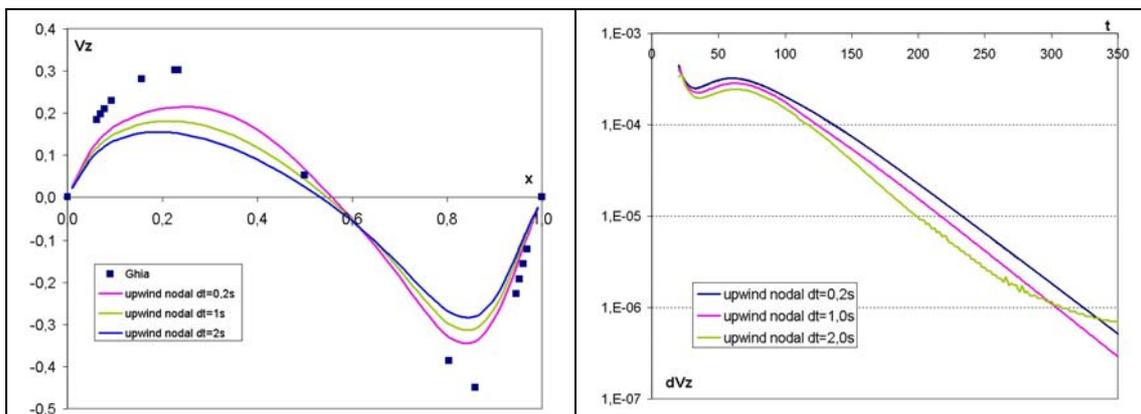
En effet sur cette image nous avons tracé l'évolution de la variation de vitesse en un point du domaine. Ce point, de coordonnées (0.01563, 0.05), n'a pas été choisi au hasard mais correspond à la vitesse verticale maximale sur la section horizontale à mi-hauteur pour un  $Re=1000$  d'après la solution 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)**

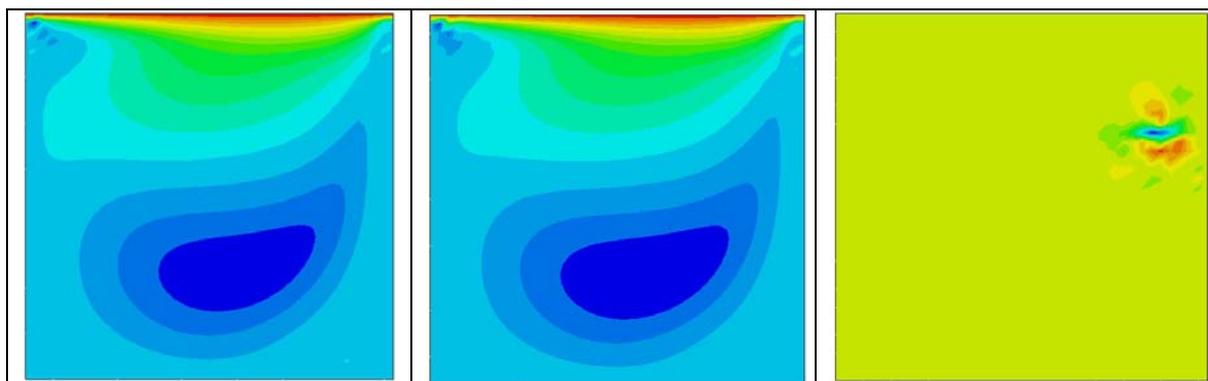
Ainsi lorsque l'on analyse cette donnée supplémentaire, nous notons sur la Figure 2-8 que la convergence vers la solution stationnaire se fait de manière régulière pour les différents pas de temps. On peut donc considérer que nous avons sur la Figure 2-7 les champs de vitesse convergés vers l'état stationnaire 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**

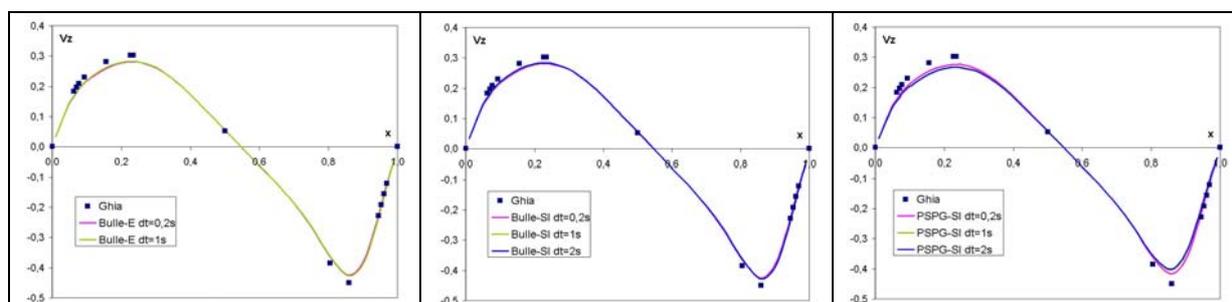
Il semblerait donc que la formulation upwind nodal ne soit pas très précise et comporte en plus une sensibilité très forte au pas de temps.

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)**

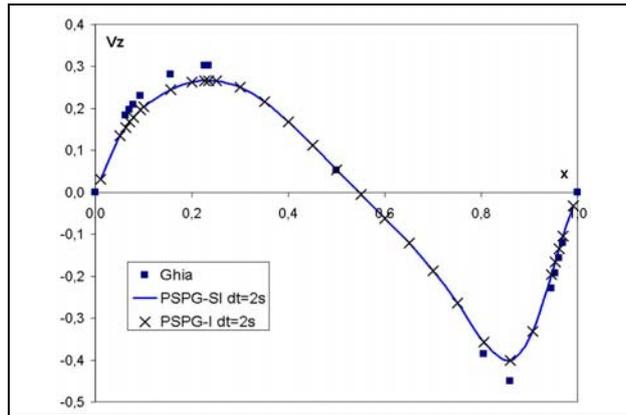
Enfin la sensibilité au pas de temps des formulations Bulle-SI et PSPG-SI sont illustrées sur la Figure 2-10. Les variations avec le pas de temps sont tout à fait minimales, seulement une petite amélioration apparaît sur la simulation PSPG-SI lorsque l'on diminue le pas de temps. Plus généralement ces 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

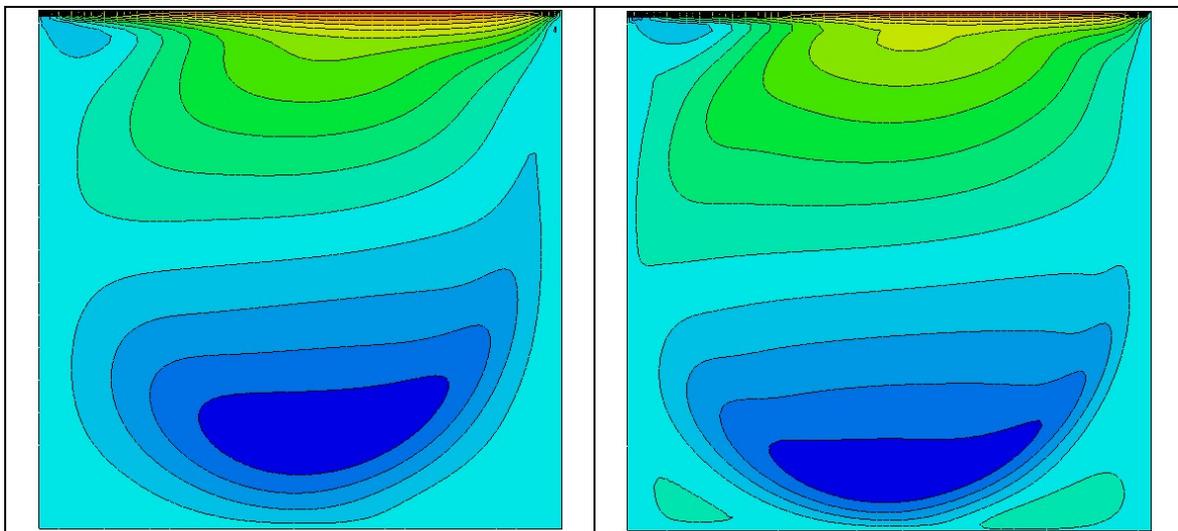
Précédemment la formulation PSPG-I n'apparaissait pas sur les courbes. En effet sur les différents tests menés sur la cavité entraînée nous n'avons pas mis en évidence d'amélioration des résultats avec la méthode PSPG-I. D'ailleurs la comparaison pour un pas de temps de 2s sur le maillage m41 à  $Re=400$  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**

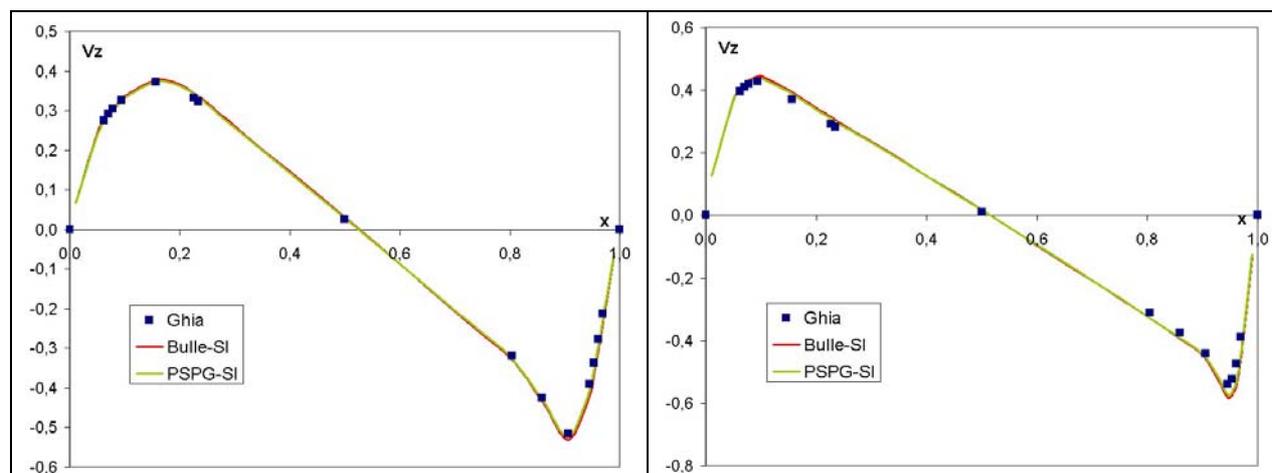
Après avoir validé nos différentes formulations à  $Re=400$ , nous allons maintenant tester les résolutions Bulle-SI et PSPG-SI à des nombres de Reynolds plus élevés, soit  $Re=1000$  et  $Re=3200$ . Dans un premier temps nous pouvons voir un aperçu des changements dans l'écoulement sur la Figure 2-12. 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

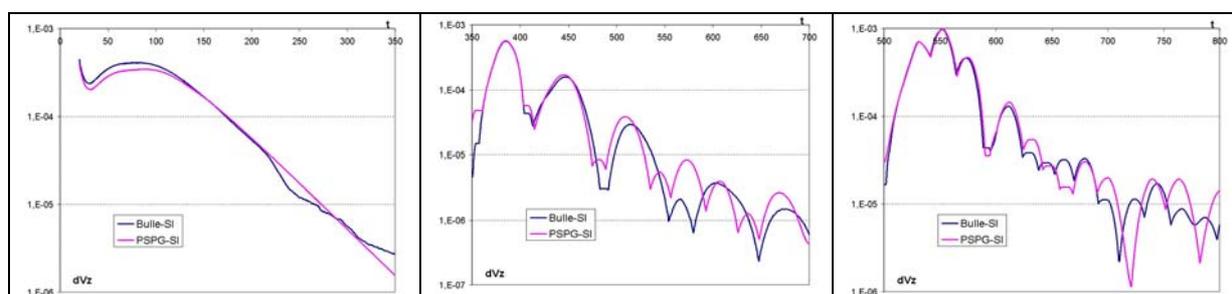
formulation Bulle-SI surestime très légèrement la vitesse par rapport à la résolution PSPG-SI et à la solution de référence.



**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.



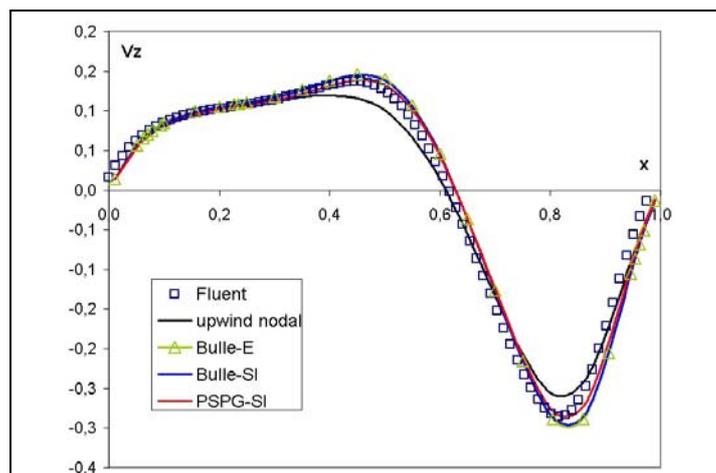
**Figure 2-14 : Evolution de  $dVz$  au cours du temps à  $Re=400$  (à gauche), à  $Re=1000$  (au centre) et à  $Re=3200$  (à droite), sur le maillage m81 pour les résolutions Bulle-SI et PSPG-SI avec  $dt=0.2s$**

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  $81 \times 81$ . 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 implication 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 implication 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  $\Delta h_{ls}$  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.

$\varphi$  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  $\Delta x$ , le pas de temps minimum  $\Delta t_{ts}$  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  $\Delta t_{ts}$  en utilisant la formule (2.4.10) est compliqué par une incertitude sur la définition de la taille de maille  $\Delta x$ . [JAOUEN, 1998] a parcouru toutes les surfaces externes non adiabatiques pour déterminer le minimum, le maximum, et la moyenne de  $\Delta x$ . 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  $\kappa^*$  peut être définie de la manière suivante pour respecter le critère de longueur de pénétration pour le pas de temps nominal  $\Delta t$  :

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

Cependant plutôt que la capacité calorifique  $\rho c_p$  dans l'évaluation de  $\Delta t_{ts}$ , il faut prendre la capacité calorifique effective  $\rho c_{eff}$  qui tient compte de la chaleur latente. Dans les

éléments subissant un changement de phase,  $\rho c_{eff}$  est beaucoup plus grand que  $\rho c_p$  et varie beaucoup en fonction du temps, l'estimation a priori de  $\Delta t_{ts}$  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,  $\Delta t_{ts}$  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.

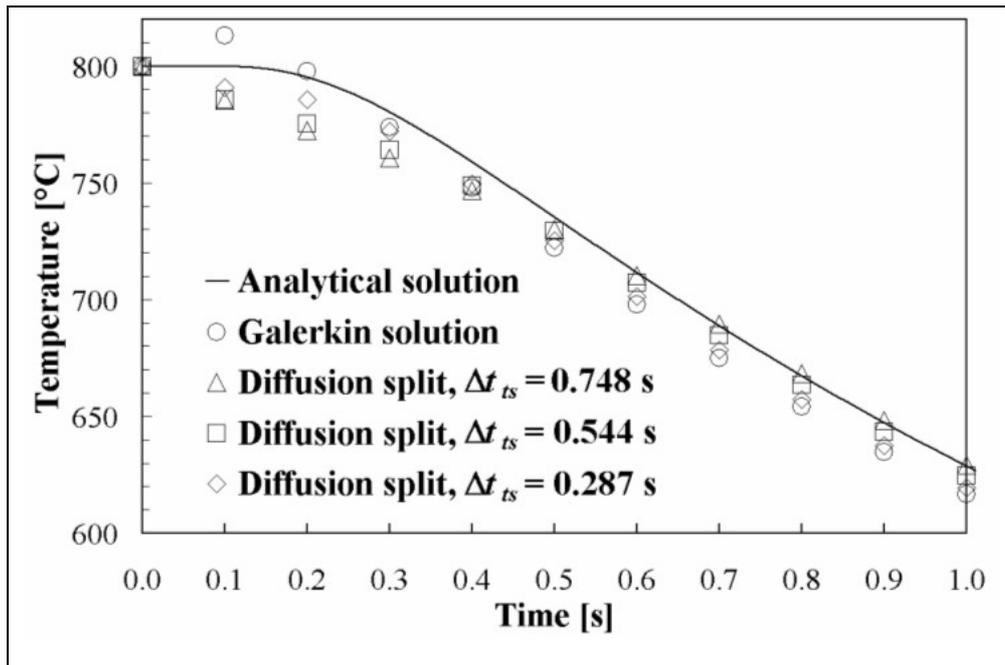
### **Validation sur un cas unidimensionnel**

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  $13.2^\circ\text{C}$  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  $0.1^\circ\text{C}$ , cette valeur peut être réduite à  $0.287 \text{ s}$ . La conductivité augmentée  $\kappa^*$  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  $\Delta t$  et  $\Delta t_{ts}$  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  $\kappa^*$ , 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 $\rho$	7800 kg/m <sup>3</sup>
Capacité calorifique $c_p$	360 J/(kg°C)
Conductivité thermique $\kappa$	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  $\varphi$  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.

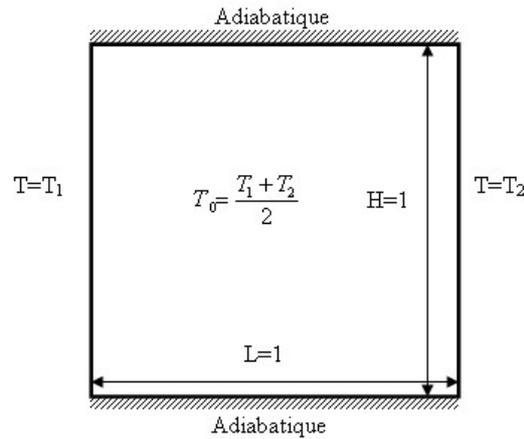


Figure 2-17 : Schéma de la cavité de Rayleigh

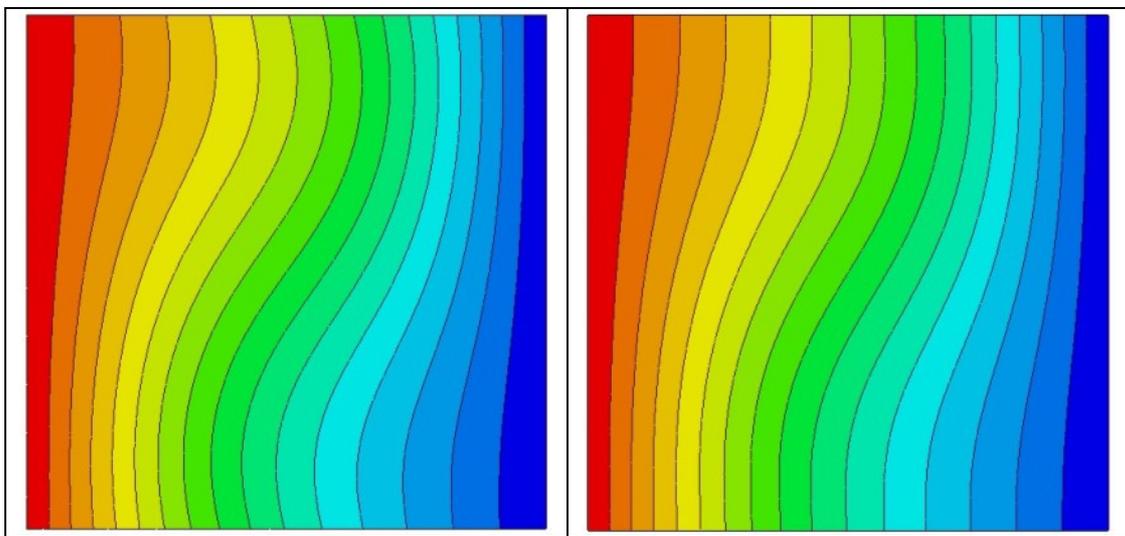
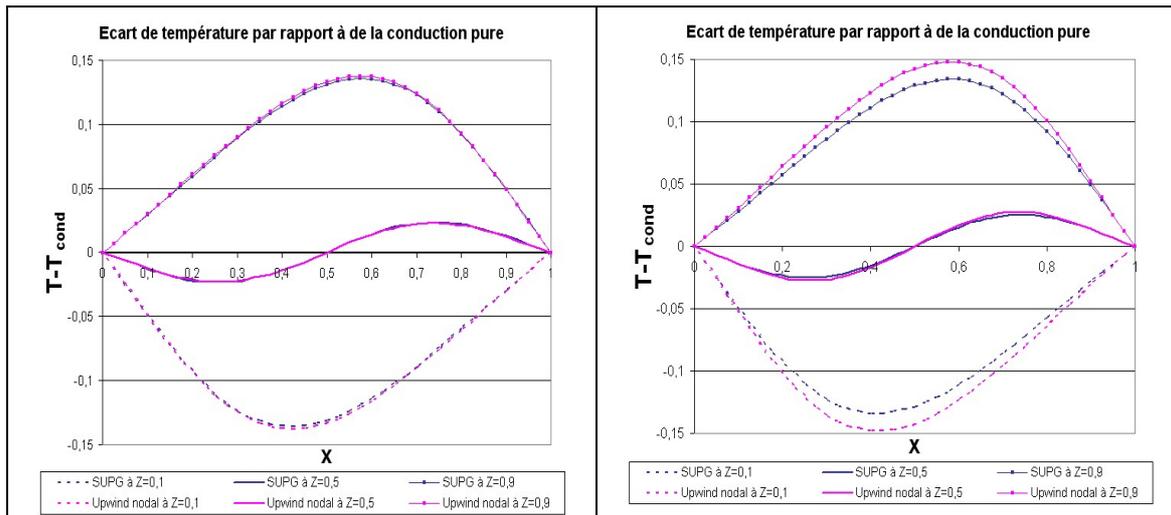


Figure 2-18 : Comparaison des isothermes entre une simulation utilisation une résolution Upwind nodal (à gauche) et une résolution SUPG (à droite) à  $Ra=10^3$  et avec  $dt=0.5s$

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.

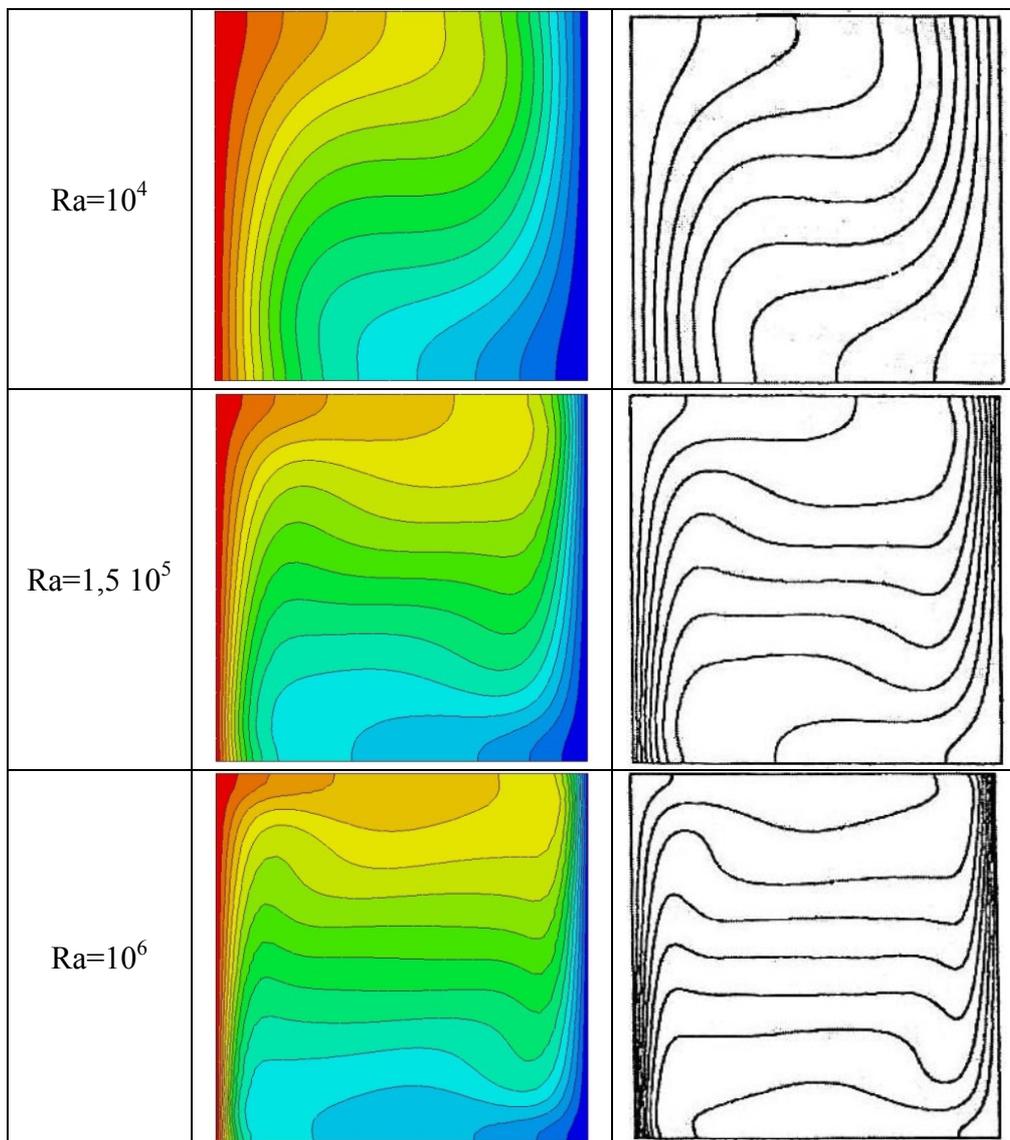


Figure 2-20 : Comparaison des isothermes sur la cavité de Rayleigh entre la simulation SUPG et les résultats de l'article de référence pour  $Ra=10^4$ ,  $Ra=1,5 \cdot 10^5$  et  $Ra=10^6$

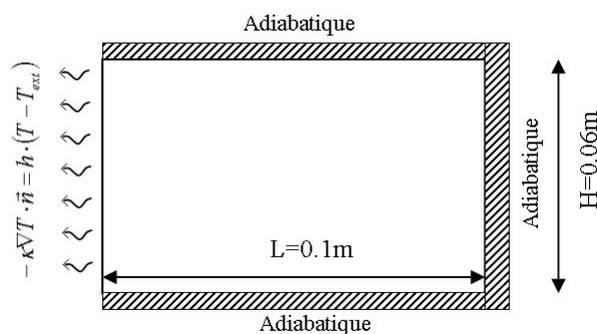


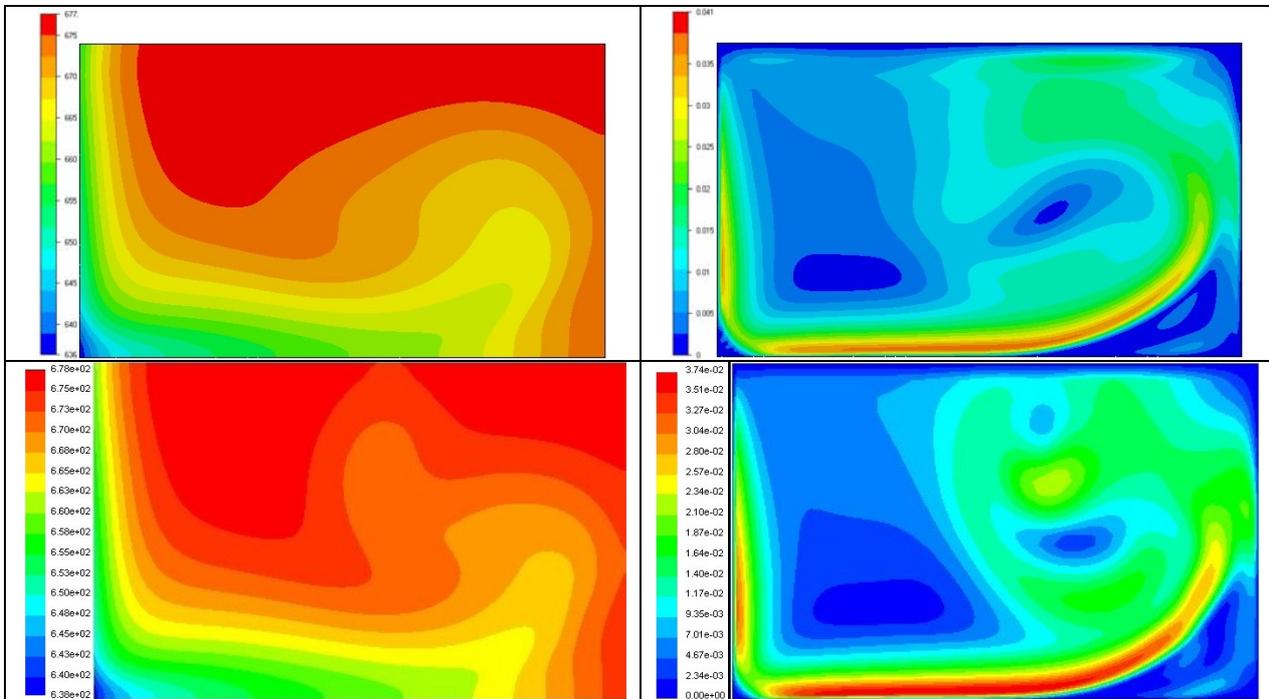
Figure 2-21 : Schéma de la cavité de validation de la convection naturelle d'un métal

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 $\rho_0$	9000 kg m <sup>-3</sup>
Conductivité thermique $\kappa$	50 W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Chaleur massique $c_p$	200 J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>
Viscosité dynamique $\mu$	10 <sup>-3</sup> Pa s
Coefficient de dilatation thermique $\beta_T$	10 <sup>-4</sup> K <sup>-1</sup>
Température initiale $T_0$	405 °C
Coefficient de transfert thermique $h$	400 W m <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
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.

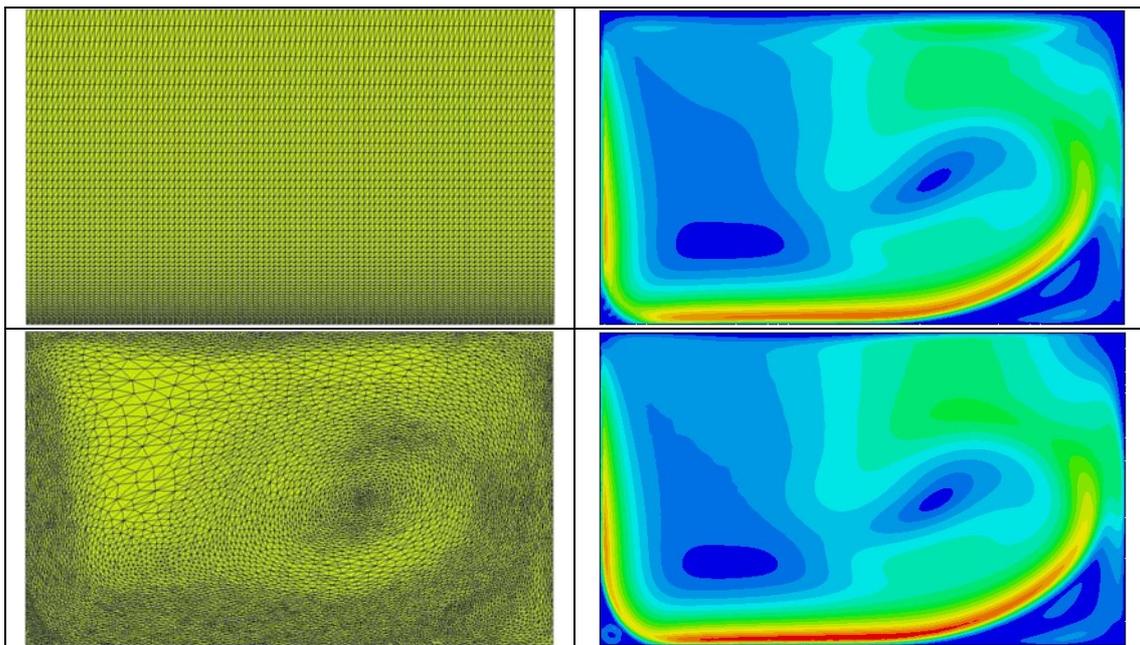


**Figure 2-22 : Champ de température (en °C) et de norme de la vitesse (en m/s) à t=10s pour une simulation avec THERCAST sur maillage structuré (en haut) et avec FLUENT sur un maillage similaire (en bas)**

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

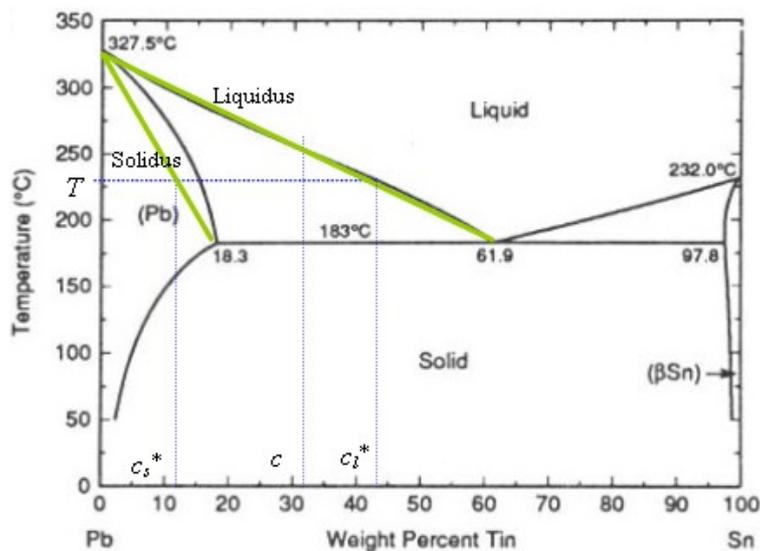


Figure 2-24 : Diagramme de phase de l'alliage plomb - étain (linéarisation en vert)

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 :

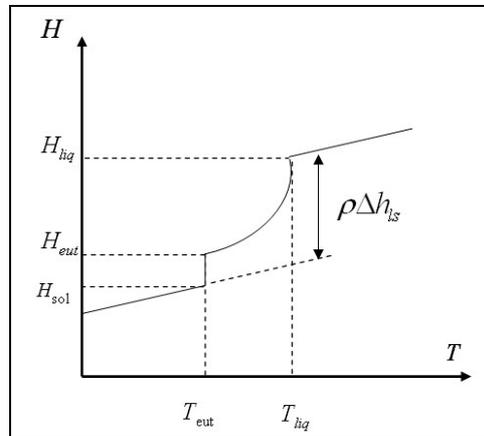
$$c = g_s c_s + g_l c_l = k_p c_l + (1 - k_p) g_l c_l \quad (2.5.2)$$

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.

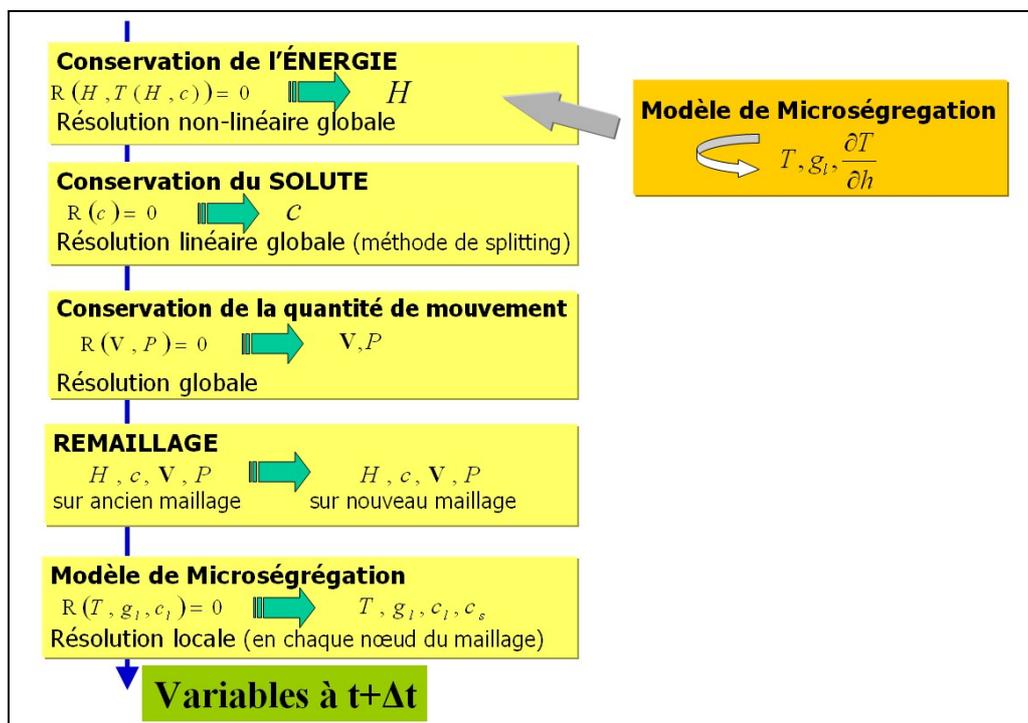


Figure 2-26 : Diagramme de résolution d'un incrément

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.