
Adaptation de maillage pour la macroségrégation

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

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

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

3.1. Définitions générales concernant les maillages

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

3.1.1. Définitions d'un maillage

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

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

Définition d'un recouvrement :

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

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

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

Définition d'une triangulation :

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

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

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

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

Définition d'un maillage :

τ_h est un maillage de Ω si :

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

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

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

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

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

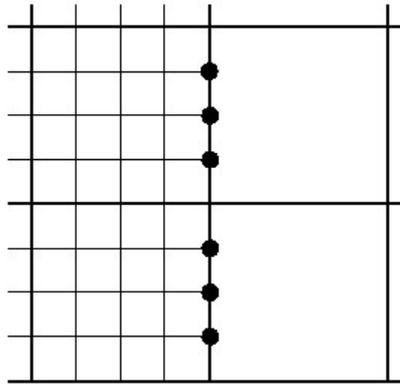


Figure 3-1 : Illustration d'un raffinement de maillage non-conforme [KAMPFER, 2002]

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

3.1.2. Définition d'une métrique

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

Définition d'une distance :

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

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

Définition d'une norme :

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

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

Définition du produit scalaire :

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

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

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

Définition d'une métrique :

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

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

Alors de manière similaire on peut définir une norme :

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

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

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

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

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

Forme matricielle de la métrique :

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

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

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

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

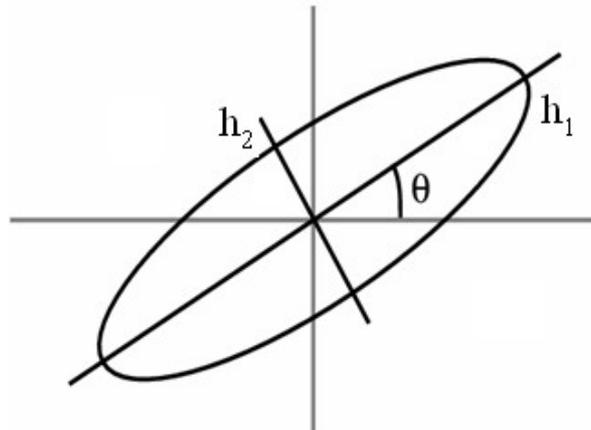


Figure 3-2 : Représentation d'une métrique 2D

3.1.3. Présentation du mailleur MTC

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

Définition d'une topologie de maillage :

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

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

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

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

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

Optimisation de la topologie :

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

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

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

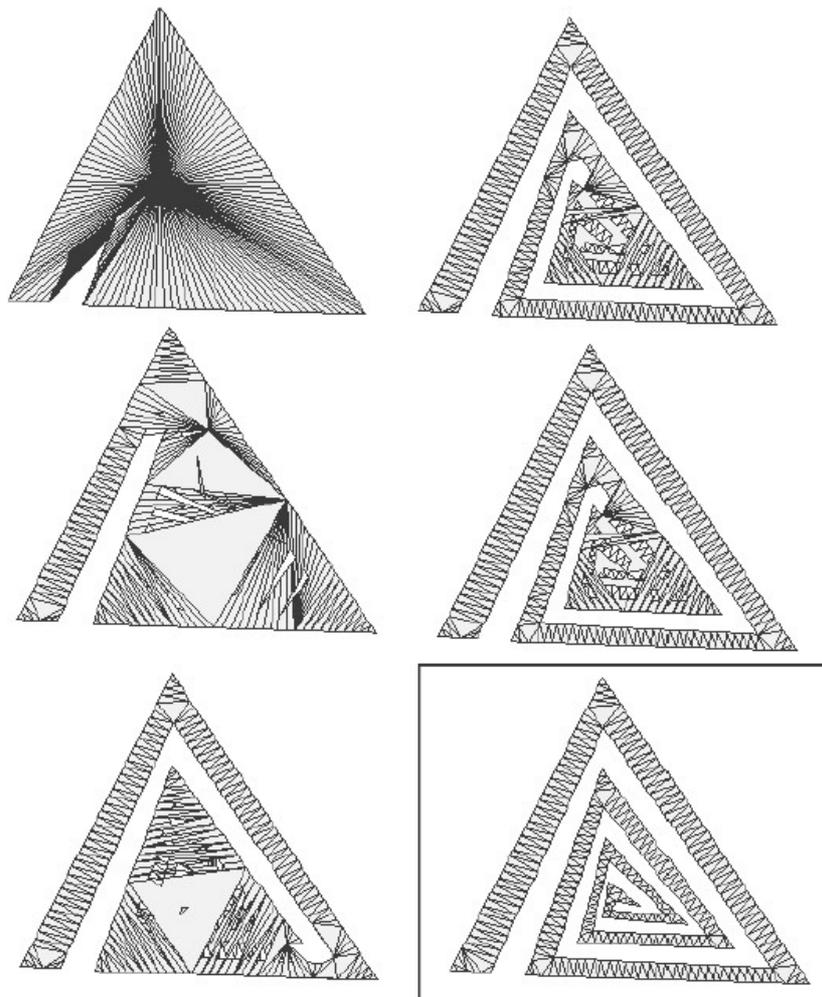


Figure 3-3 : Génération d'un maillage 2D par optimisation topologique [GRUAU, 2004]

3.1.4. Définition du remaillage adaptatif

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

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

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

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

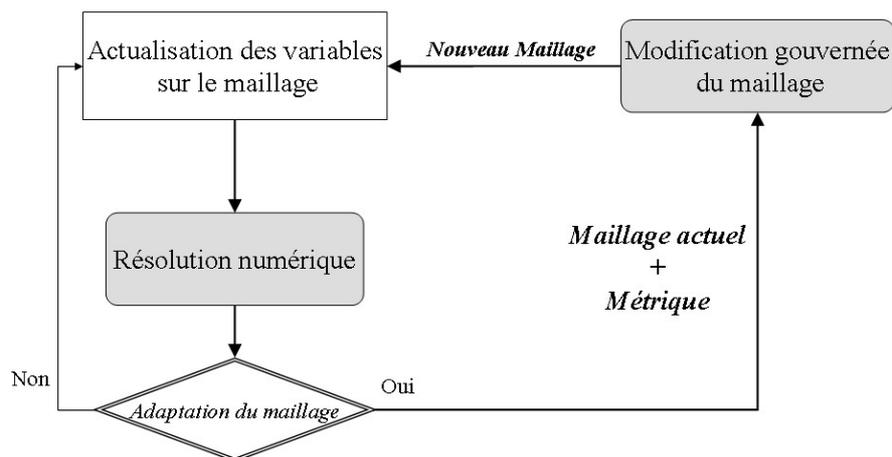


Figure 3-4 : Diagramme de remaillage adaptatif

3.2. Problématique du remaillage en solidification avec macroségrégation

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

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

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

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

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

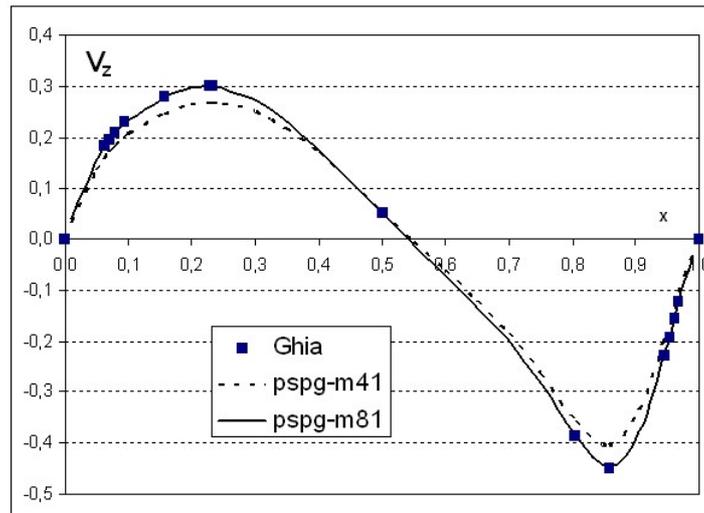


Figure 3-5 : Courbe de la vitesse verticale sur la section centrale horizontale de la cavité entraînée à $Re=400$, pour la méthode de résolution SUPG-PSPG, sur les maillages m41 et m81

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

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

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

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

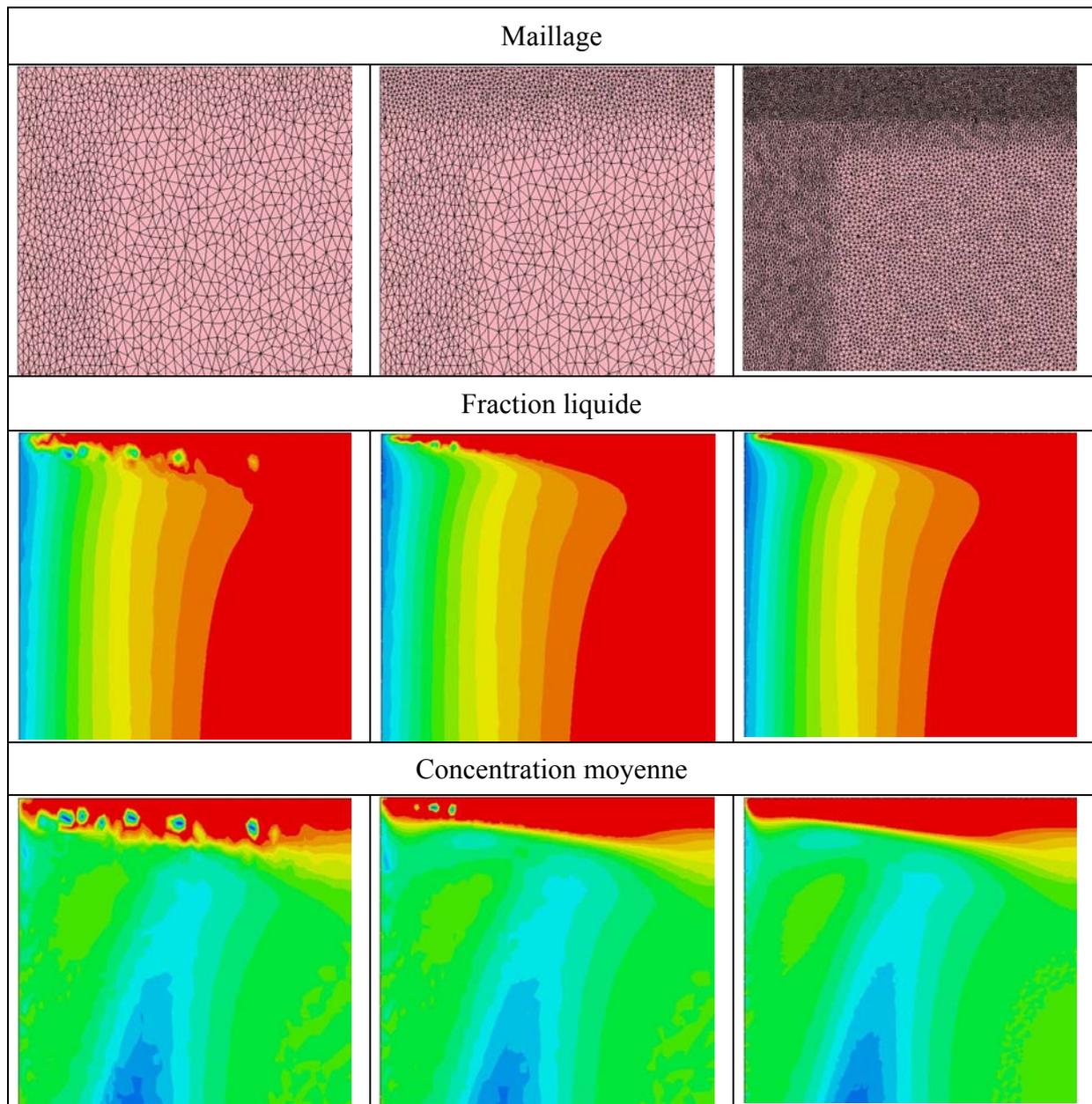


Figure 3-6 : Illustration de l'effet du maillage fixe sur le front de solidification (portion supérieure gauche d'une cavité rectangulaire refroidie par la paroi gauche)

3.2.3. Effet du maillage sur la prédiction de la macroségrégation

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

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

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

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

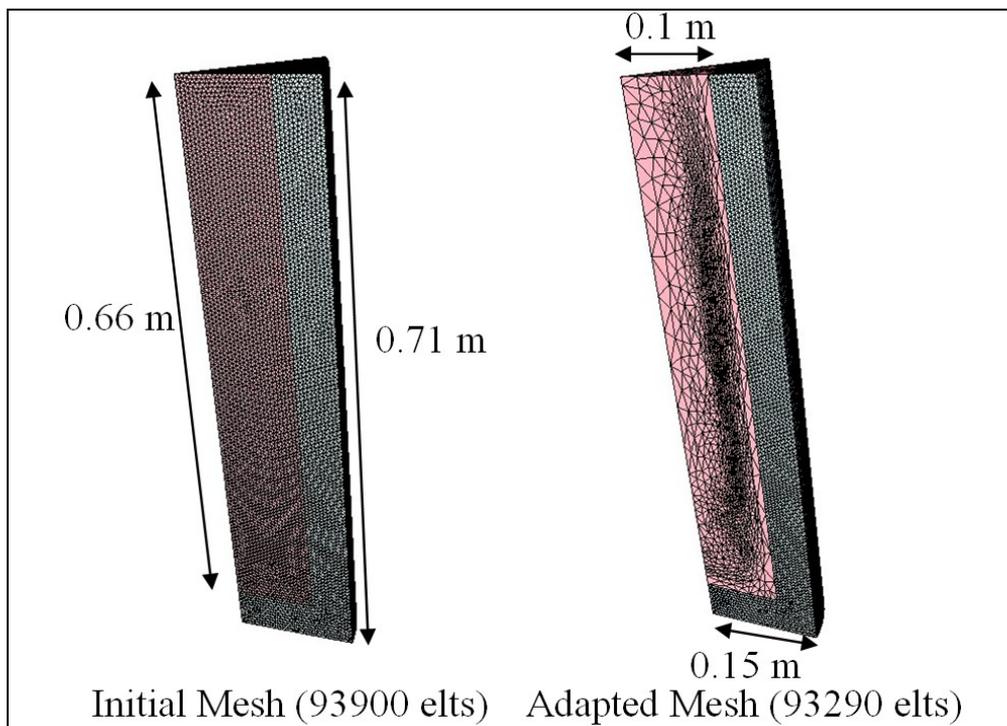


Figure 3-7 : Schéma du lingot test intermédiaire, maillage fixe et maillage adapté après 50s de refroidissement

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

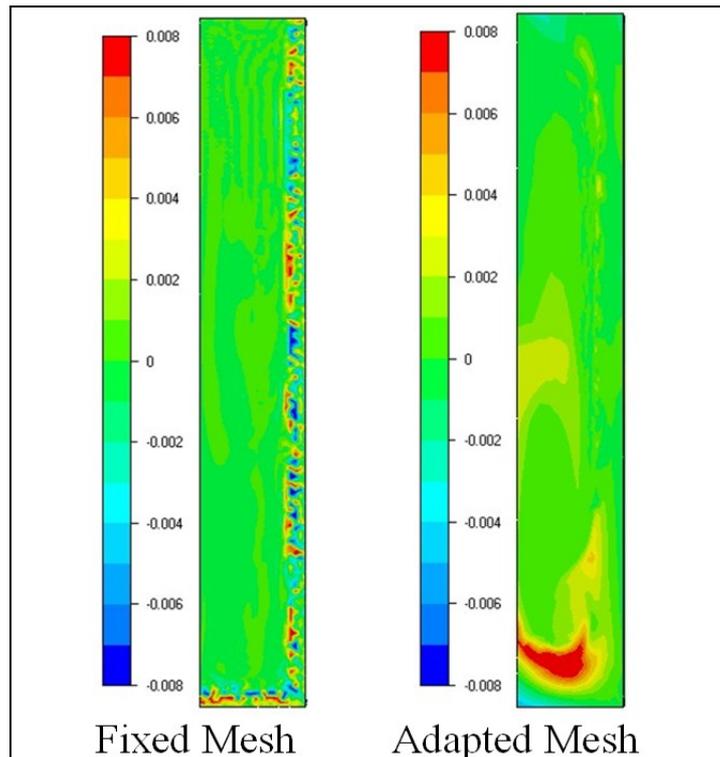


Figure 3-8 : Ecart de concentration moyenne (en wt%) sur le lingot test intermédiaire pour le maillage fixe et le maillage adapté, pour un alliage Fe-0.38%C, après 50s de refroidissement

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

3.3. Génération d'une métrique adaptée

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

3.3.1. Estimation d'erreur et remaillage adaptatif

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

Définition de l'erreur :

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

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

Où l'indice h indique la solution éléments finis.

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

Voyons maintenant quelques exemples de normes :

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

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

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

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

L'erreur est alors mesurée en appliquant ces normes :

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

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

Méthodes d'estimation de l'erreur

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

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

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

Estimateur d'erreur basé sur les résidus :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Estimateur d'erreur par recouvrement :

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

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

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

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

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

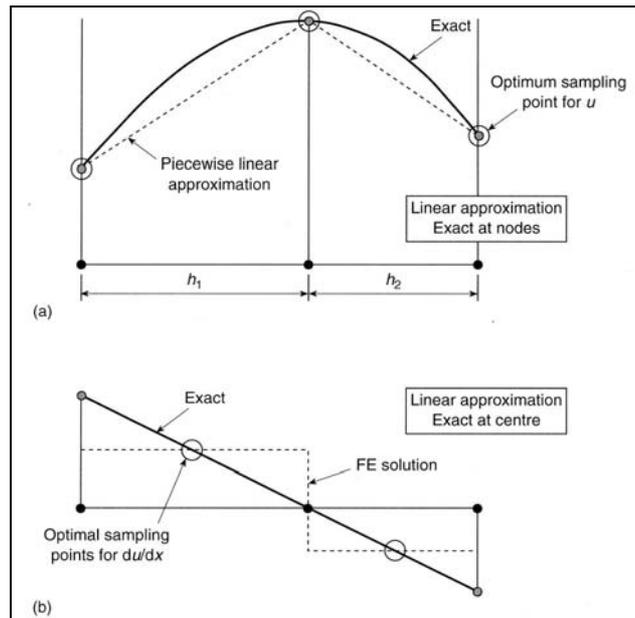


Figure 3-9 : Points optimum de recouvrement (a) fonction (b) gradient pour un élément linéaire 1D [ZIENKIEWICZ, 2000]

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Où T est un élément du maillage.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Application des estimateurs d'erreur à un calcul de solidification

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

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

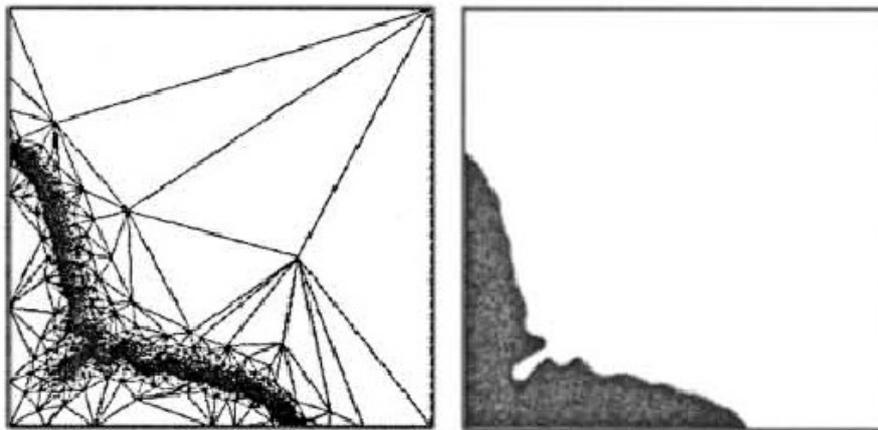


Figure 3-10 : Adaptation de maillage pour un calcul de dendrites avec une méthode de champ de phase (maillage, fraction solide) [KRUGER, 2003]

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

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

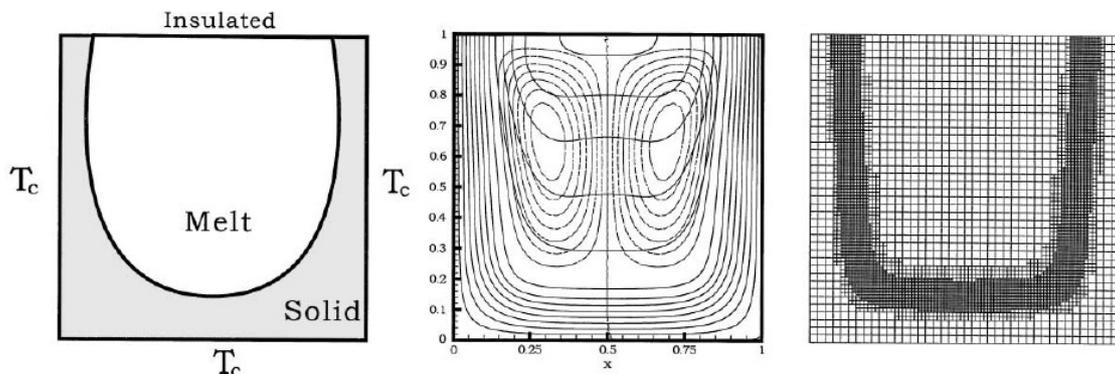


Figure 3-11 : Adaptation de maillage en solidification en creuset (schéma, isothermes et lignes de courant, maillage) [LAN, 2002]

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

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

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

Difficultés et complexité pour l'application à la macroségrégation

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

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

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

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

3.3.2. Génération d'une taille de maille locale

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

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

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

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

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

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

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

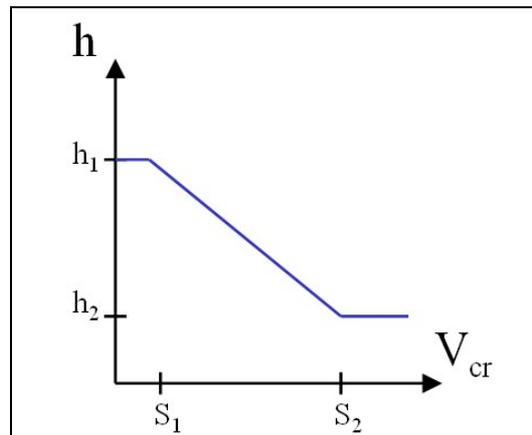


Figure 3-12 : Evolution de la taille de maille en fonction du critère et paliers de saturation

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

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

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

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

Critère RGC (Raffinement avec le Gradient de Concentration) :

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

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

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

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

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

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

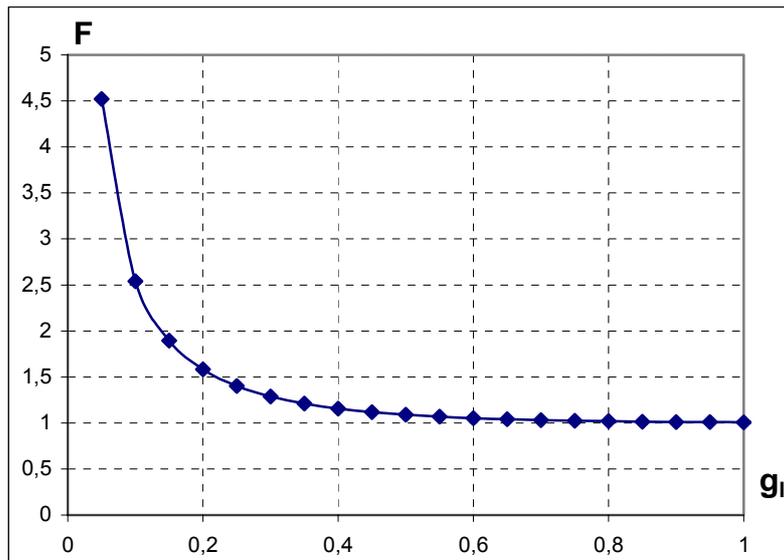


Figure 3-13 : Coefficient correctif des valeurs de taille de maille dans la zone pâteuse

Critère RGV (Raffinement avec le Gradient de Vitesse) :

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

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

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

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

Lissage des tailles de maille objectives

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

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

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

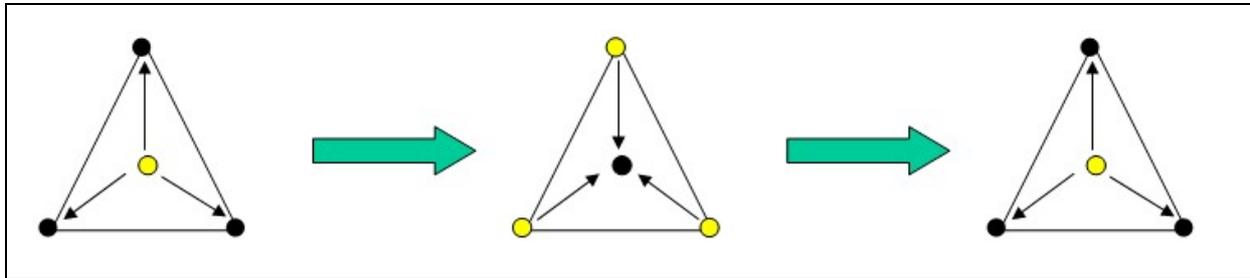


Figure 3-14 : Transports successifs des valeurs des tailles de maille pour le lissage

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

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

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

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

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

Application au cas test Sn-5%Pb :

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

Tableau 3-2 : Paramètres du remaillage

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

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

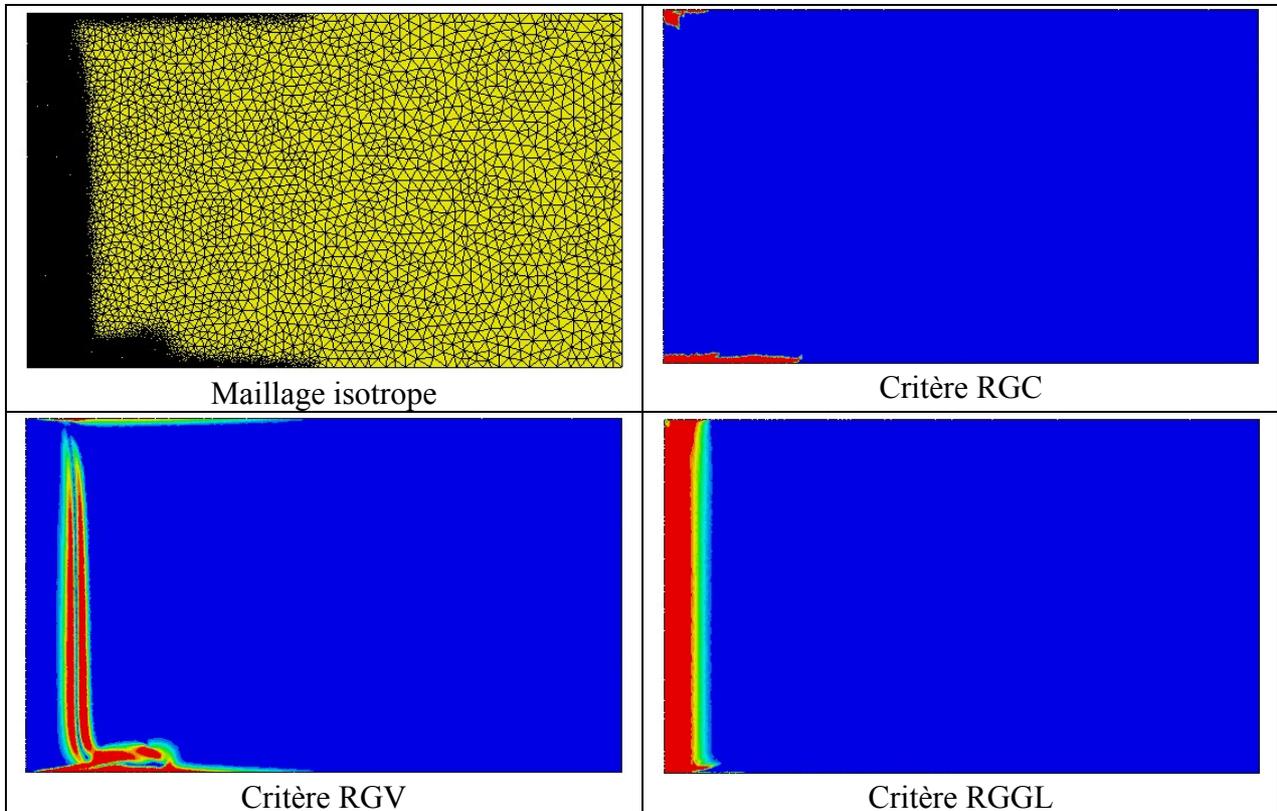


Figure 3-15 : Maillage adaptatif et zones d'application du maillage fin en fonction des critères RGC, RGV et RGGL

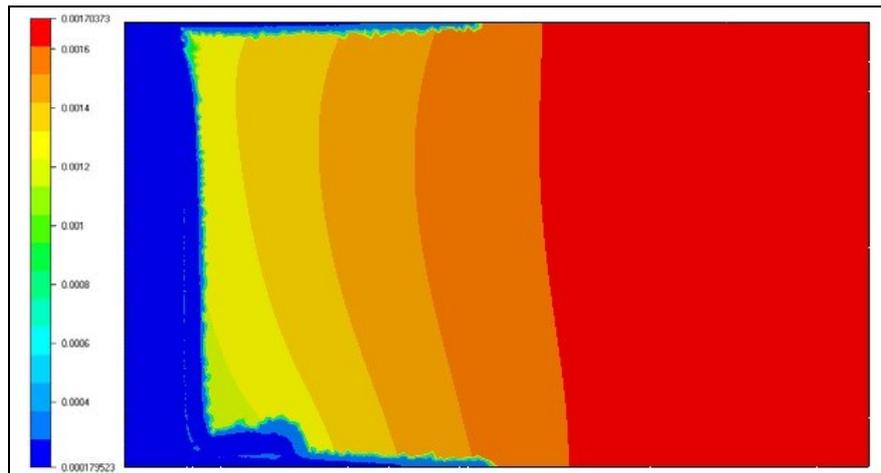


Figure 3-16 : Tailles de maille objectif

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

Maillage adaptatif : 110477 éléments, 37533 nœuds

Maillage très raffiné : 336078 éléments, 112699 nœuds

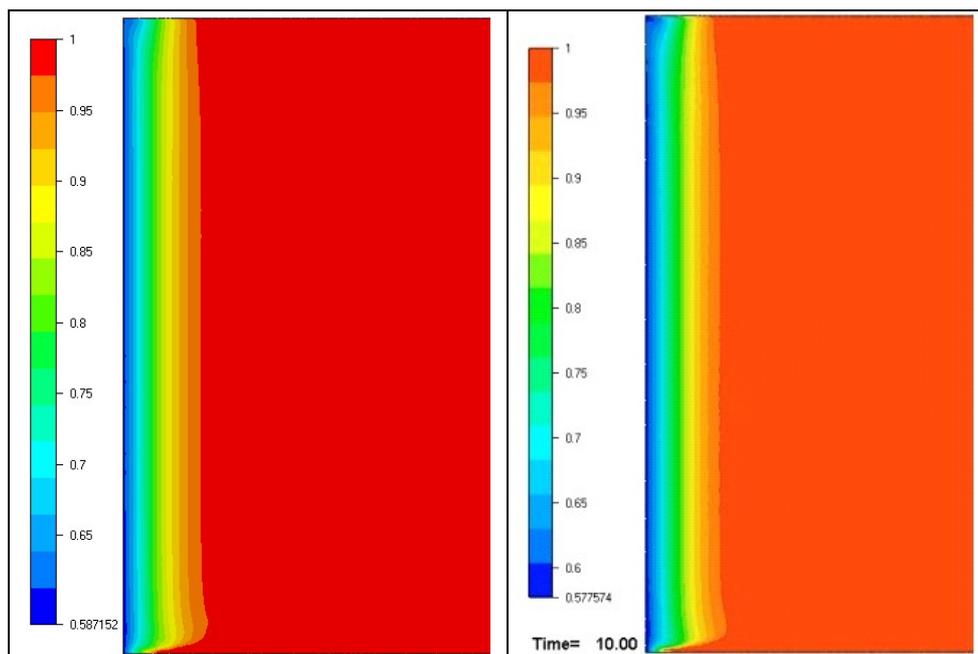


Figure 3-17 : Fraction liquide à 10s (Maillage adaptatif à gauche et très raffiné à droite)

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

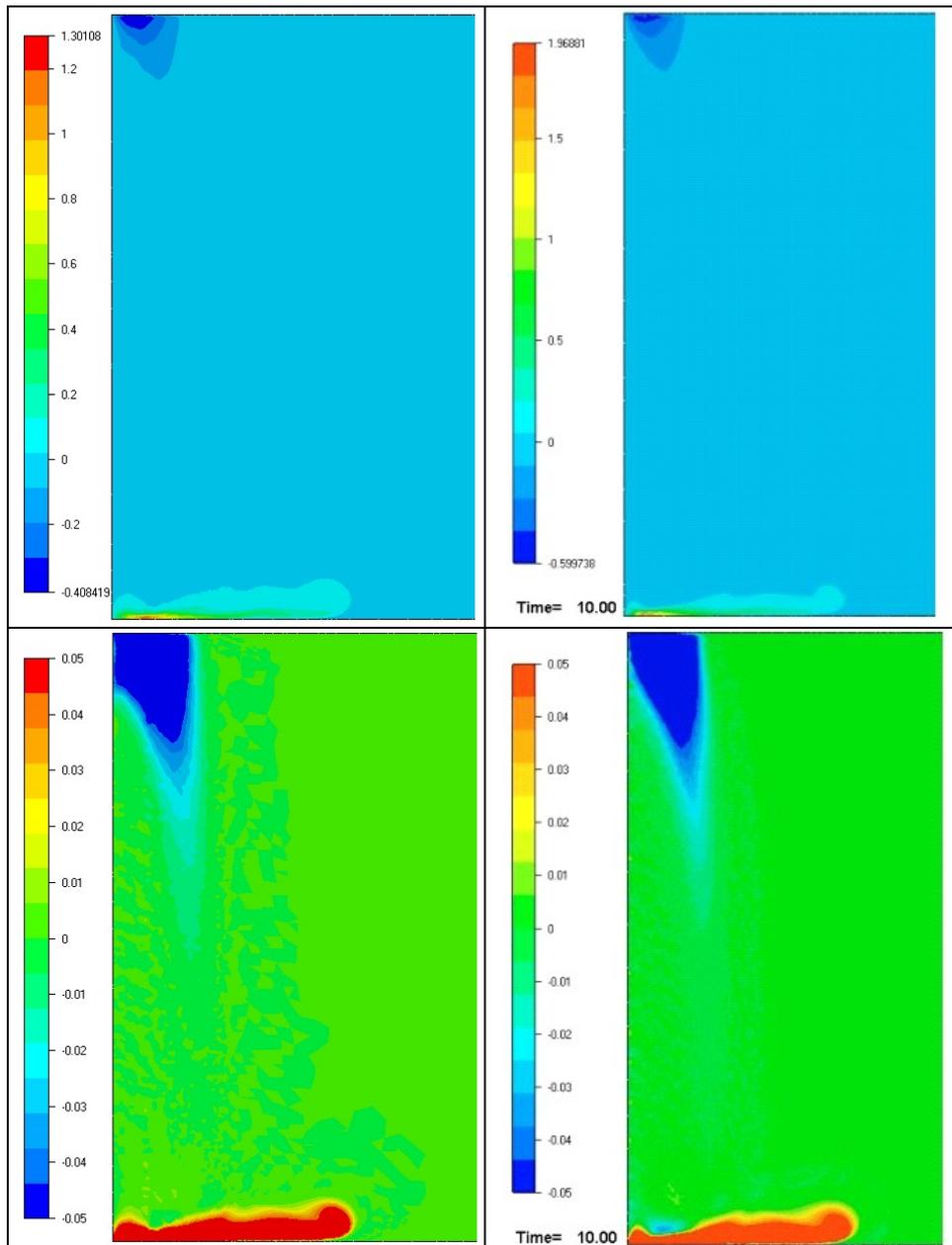


Figure 3-18 : Ecart de concentration moyenne à 10s (Maillage adaptatif à gauche et très raffiné à droite, échelle naturelle en haut et échelle modifiée en bas)

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

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

3.3.3. Génération des coefficients d'anisotropie

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

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

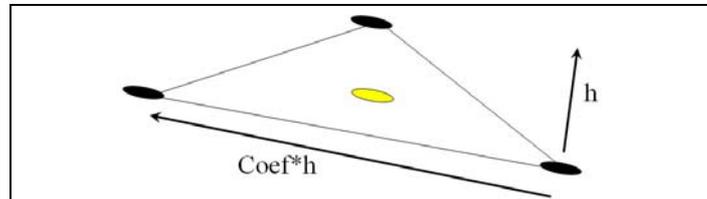


Figure 3-19 : Illustration de l'étirement d'un élément

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

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

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

Anisotropie dans la zone liquide

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

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

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

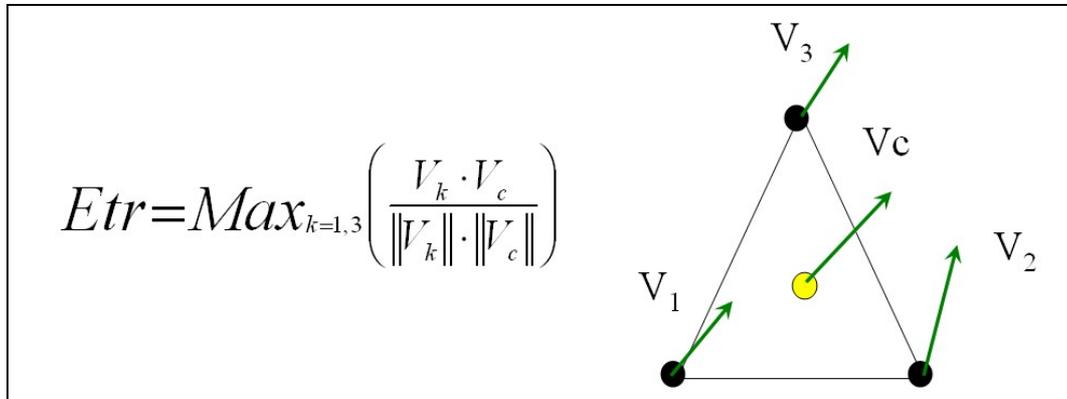


Figure 3-20 : Calcul du coefficient d'étirement dans la zone liquide

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

Anisotropie dans la zone pâteuse

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

Anisotropie dans la zone solide

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

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

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

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

$$M_{base} = \begin{pmatrix} \vec{V}_{dir} & \vec{V}_{dir}^{\perp_1} & \vec{V}_{dir}^{\perp_2} \end{pmatrix} \quad (3.3.22)$$

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

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

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

3.4. Stratégie de remaillage

3.4.1. Détermination de la période de remaillage

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

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

3.4.2. Détermination de la métrique

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

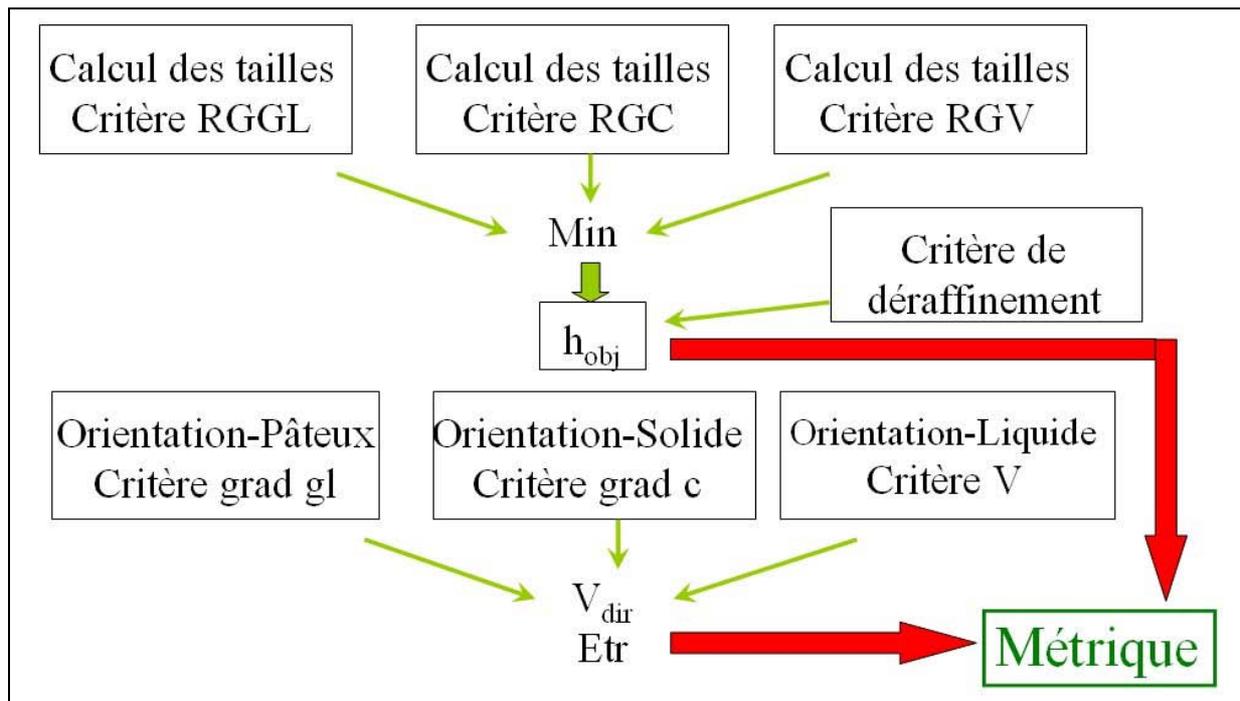


Figure 3-21 : Schéma de la génération de la métrique locale

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

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

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

3.4.3. Avantages et inconvénients

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

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

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

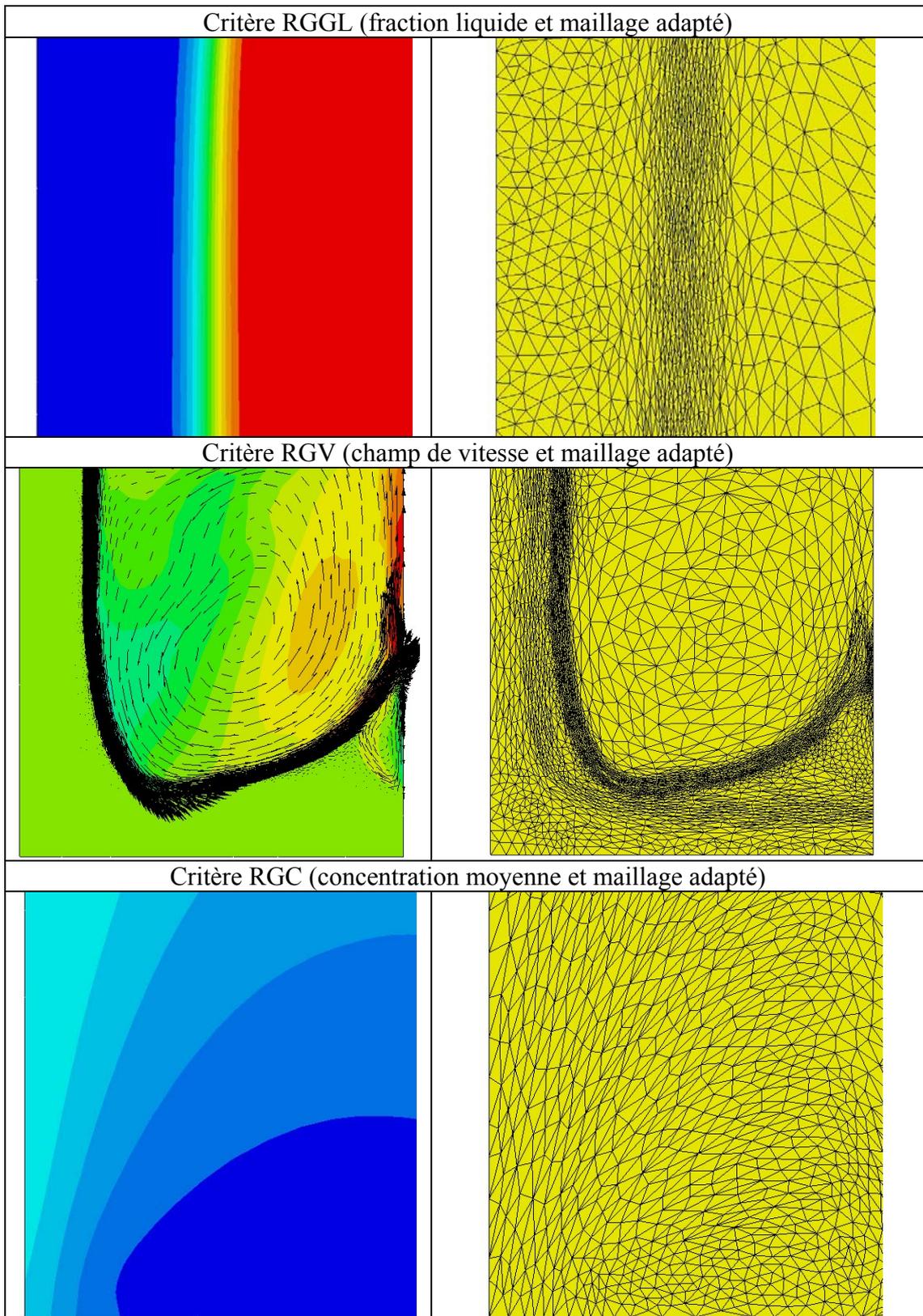


Figure 3-22 : Illustration de l'effet des trois critères sur le maillage

3.5. Amélioration de la stratégie de remaillage

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

3.5.1. Principe de l'extraction de maillage

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

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

Variation des paramètres déclenchant un remaillage local :

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

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

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

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

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

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

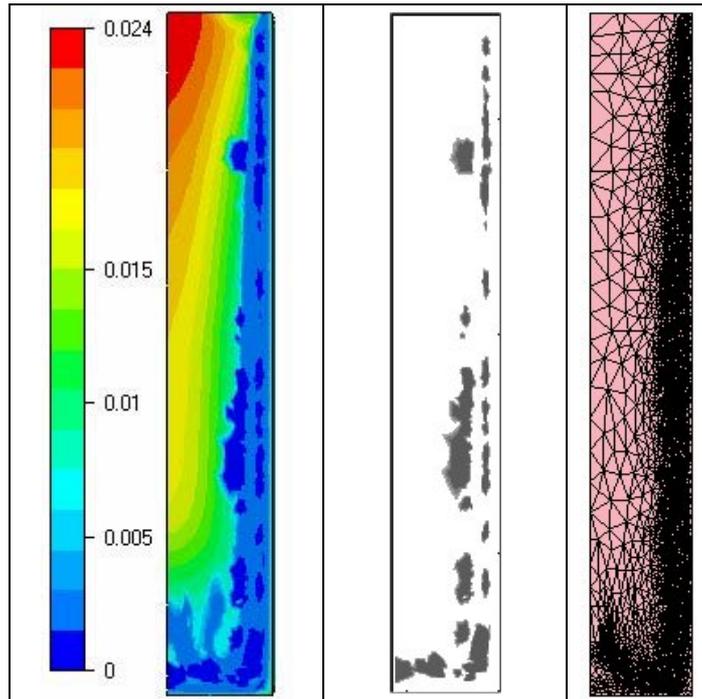


Figure 3-23 : Affichage de la taille de maille, des zones extraites et maillage

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

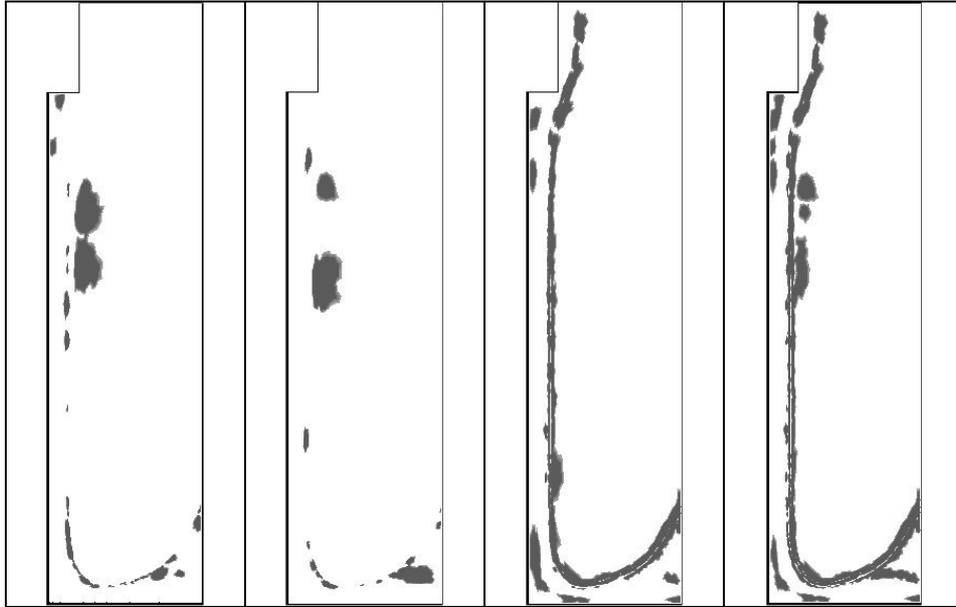


Figure 3-24 : Affichage des zones extraites en appliquant l'extraction avec seulement le critère de direction, d'étiement, de taille et enfin en combinant tous les critères (simulation sur lingot simplifié)

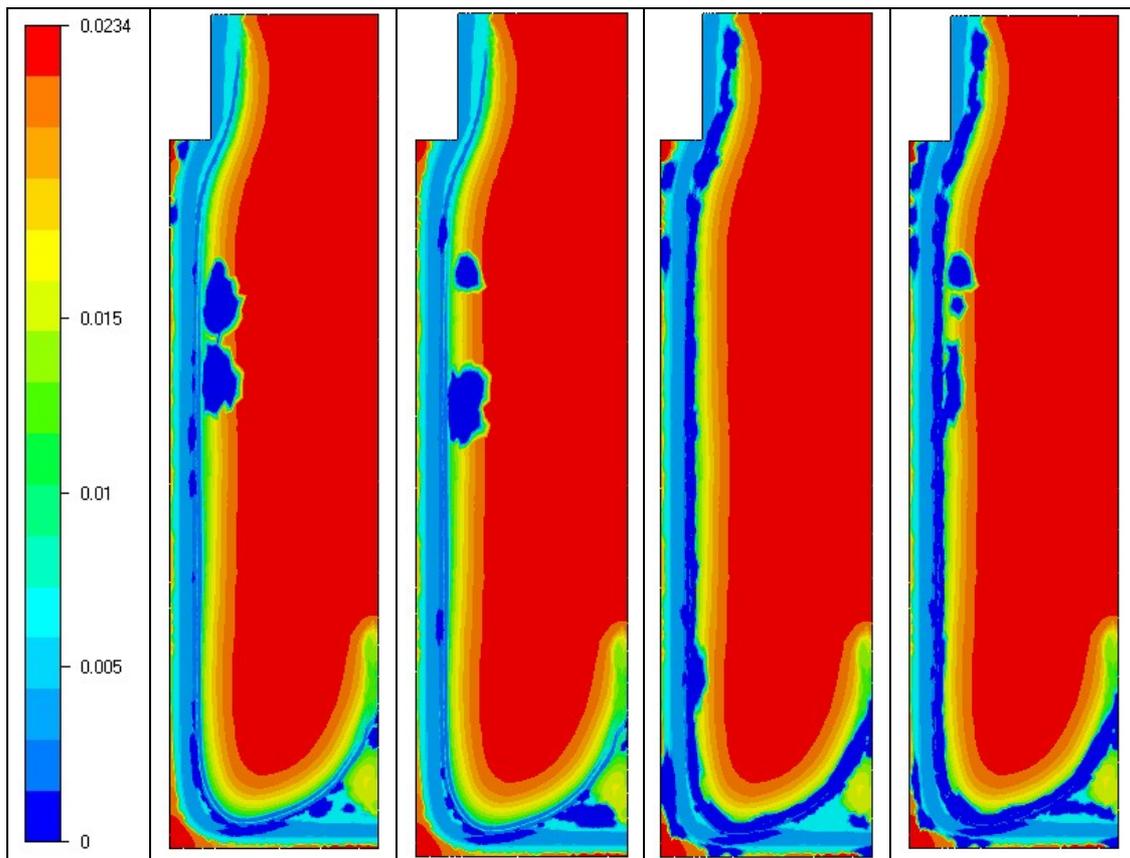


Figure 3-25 : Affichage de la taille de maille en appliquant l'extraction avec seulement le critère de direction, d'étiement, de taille et enfin en combinant tous les critères (simulation sur lingot simplifié)

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

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

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

3.5.2. Contrôle automatique du nombre d'éléments

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

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

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

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

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

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

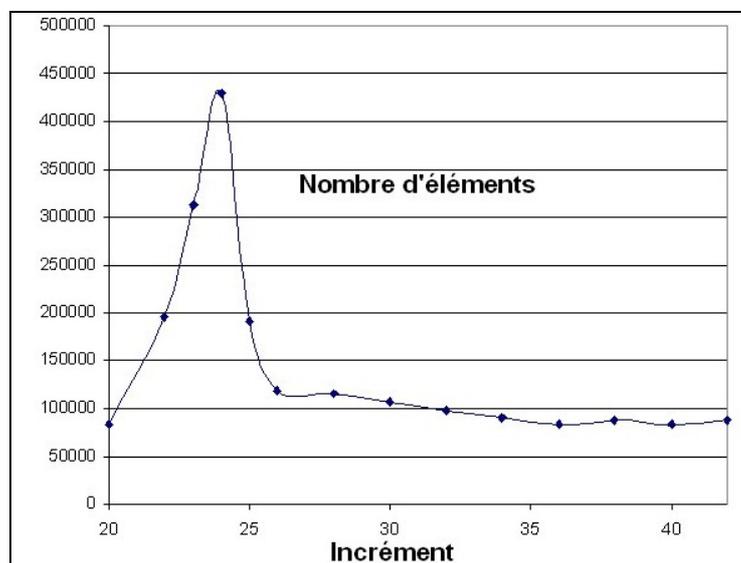


Figure 3-26 : Evolution du nombre d'éléments en début de calcul

3.5.3. Evolution des valeurs seuil du critère RGV

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

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

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

3.5.4. Evolution de la période de remaillage

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

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

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

3.6. Paramétrisation automatique du remaillage

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

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

3.6.1. Approximations pour la zone pâteuse

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

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

Cas d'un lingot pseudo-2D :

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

Solidification de la première peau pâteuse :

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

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

où R est la résistance de contact.

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

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

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

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

Solidification de la dernière portion pâteuse :

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

On prend maintenant l'hypothèse que la température est linéaire dans l'ensemble de la pièce et du moule. La température varie donc entre la température de liquidus et la température extérieure. On prend comme hypothèse supplémentaire que la conductivité est

identique dans le moule et dans le métal. Cette hypothèse peut être relaxé en calculant la température au contact du moule.

$$\phi = \kappa \frac{T_{metal}^{liq} - T_{ext}}{d_{metal} + d_{moule}} \quad (3.6.4)$$

où d_{metal} et d_{moule} représentent les épaisseurs de ces éléments dans la direction du gradient thermique.

Alors l'épaisseur de la zone pâteuse est égale à :

$$d_{mush}^{max} = (d_{metal} + d_{moule}) \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{T_{metal}^{liq} - T_{ext}} \quad (3.6.5)$$

Cas d'un lingot cylindrique :

Pour un lingot cylindrique, on ne peut plus prendre l'hypothèse d'une température linéaire. Il devient nécessaire de prendre une température de la forme [CARSLAW, 1990] :

$$T(r) = \frac{T_2 \ln(r_2 / r) + T_1 \ln(r / r_1)}{\ln(r_2 / r_1)} \quad (3.6.6)$$

Le flux angulaire est alors égal à :

$$\phi^{ang} = \frac{\kappa}{r} \frac{T_1 - T_2}{\ln(r_2 / r_1)} \quad (3.6.7)$$

Solidification de la première peau pâteuse :

Le flux angulaire extrait maximal est :

$$\phi_{max} = \frac{T_{metal}^{ini} - T_{moule}^{ini}}{R} \quad (3.6.8)$$

où R est la résistance de contact.

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

$$\phi_{max} = \frac{\kappa}{r_{metal}} \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{\ln(r_{metal} / r_{liq})} \quad (3.6.9)$$

où r_{metal} est le rayon du cylindre de métal liquide

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

$$dr_{mush}^{min} = r_{metal} \left(1 - \exp \left[\frac{\kappa R}{r_{metal}} \cdot \frac{T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}}{T_{metal}^{ini} - T_{moule}^{ini}} \right] \right) \quad (3.6.10)$$

Solidification de la dernière portion pâteuse :

On conserve l'hypothèse que la conductivité est identique dans le moule et dans le métal.

Par contre le flux présente une singularité pour $r=0$. Il est donc nécessaire de faire une hypothèse différente du calcul précédent. Nous prendrons donc pour ce calcul une position du liquidus à $0.01 * r_{metal}$.

$$T_{metal}^{sol} = \frac{T_{ext} \ln\left(\frac{r_{metal} + r_{moule}}{r_{metal}^{sol}}\right) + T_{metal}^{liq} \ln\left(\frac{r_{metal}^{sol}}{0.01 * r_{metal}}\right)}{\ln\left(\frac{r_{metal} + r_{mould}}{0.01 * r_{metal}}\right)} \quad (3.6.11)$$

où r_{mould} représente l'épaisseur du moule.
Alors l'épaisseur de la zone pâteuse est égale à :

$$r_{metal}^{sol} = \exp\left[\frac{1}{T_{metal}^{liq} - T_{ext}} \cdot \left((T_{metal}^{sol} - T_{ext}) \cdot \ln(r_{metal} + r_{moule}) + (T_{metal}^{liq} - T_{metal}^{sol}) \ln(0.01 * r_{metal}) \right)\right] \quad (3.6.12)$$

$$dr_{mush}^{max} = r_{metal}^{sol} - 0.01 * r_{metal} \quad (3.6.13)$$

3.6.2. Définition du critère de vitesse à partir d'une corrélation de couche limite

Pour obtenir une approximation du champ de vitesse en début de solidification, on peut utiliser la théorie de formation de couche limite en convection naturelle le long d'une paroi verticale. Le régime dans notre cas est fortement transitoire mais le régime établi constitue une limite supérieure pour la vitesse d'écoulement puisqu'elle ne prend pas en compte le frottement induit par la zone pâteuse. D'autre part en début de solidification la force motrice due à la macroségrégation est négligeable comparativement à la partie thermique. Cette théorie nous fournit alors deux résultats importants provenant de [MARTY, 2001] :

Calcul de l'épaisseur de la couche limite cinétique et de la couche limite thermique en régime établi :

$$\frac{\delta_1}{L} = Gr^{-1/4} = \left(\frac{\nu}{\sqrt{g\beta_T \Delta T L^3}} \right)^{1/2} \quad (3.6.14)$$

$$\frac{\delta_1}{\delta_t} = Pr^{1/2}$$

où L est la hauteur de la plaque

La signification de ces épaisseurs est indiquée sur la Figure 3-27, sur laquelle est aussi représentée l'évolution de la vitesse et de la température, perpendiculairement à la paroi.

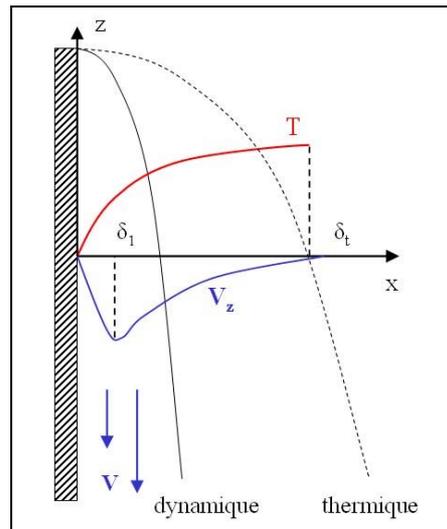


Figure 3-27 : Convection naturelle le long d'une plaque verticale, formation de la couche limite pour un métal liquide ($Pr \ll 1$)

Vitesse maximale en régime établi

$$U = \sqrt{g\beta_T\Delta TL} \quad (3.6.15)$$

Cette vitesse maximale deviendra une limite supérieure pour notre vitesse lors des calculs de paramètres. Ainsi lorsque l'on réactualise le seuil du critère RGV en fonction de la vitesse, la valeur que l'on utilise ne pourra pas dépasser cette valeur seuil.

Il reste maintenant à identifier l'aspect transitoire de la formation de la couche limite dynamique et ses conséquences sur les vitesses et donc sur les critères de maillage. Pour effectuer cette analyse, un nouveau cas test a été généré : un lingot plan en refroidissement latéral par un moule.

Description du lingot plan

Les simulations suivantes ont été réalisées sur un lingot plan de 2m de haut avec un rapport de forme de 5 accompagné d'un moule. Le schéma de la Figure 3-28 présente la géométrie et les conditions aux limites de ce cas ainsi que le maillage du domaine. Le maillage structuré a été généré en utilisant une progression géométrique des tailles de maille avec un facteur 1.1 pour un maillage 51x51 en pseudo-2D. Ce maillage nous permettra donc d'avoir un grand nombre d'éléments dans la zone de contact avec le moule et de garantir ainsi la qualité de la solution tant en thermique qu'en mécanique dans les premiers instants de refroidissement. Les propriétés du matériau sont précisées dans le Tableau 3-4 et le Tableau 3-5.