



**HAL**  
open science

# Simulation numérique de la solidification avec réduction de modèle PGD appliquée à la fonderie

Pierre Despret

► **To cite this version:**

Pierre Despret. Simulation numérique de la solidification avec réduction de modèle PGD appliquée à la fonderie. Mécanique [physics.med-ph]. Université de Technologie de Compiègne, 2015. Français. NNT : 2015COMP2226 . tel-01342569

**HAL Id: tel-01342569**

**<https://theses.hal.science/tel-01342569>**

Submitted on 6 Jul 2016

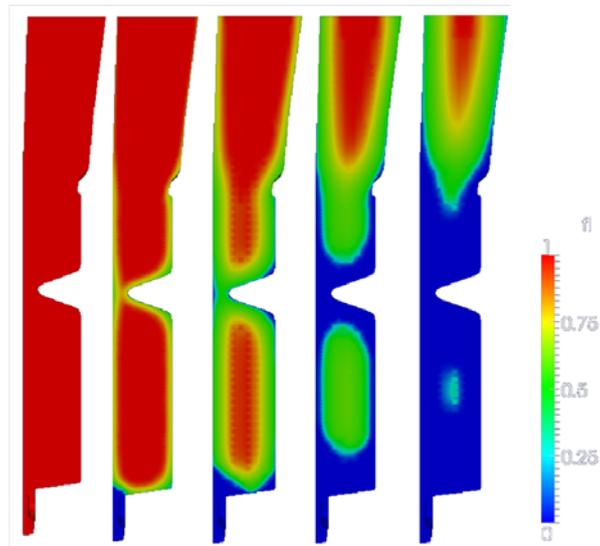
**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

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

Par Pierre DESPRET

*Simulation numérique de la solidification avec  
réduction de modèle PGD appliquée à la fonderie*

Thèse présentée  
pour l'obtention du grade  
de Docteur de l'UTC



Soutenue le 08 octobre 2015  
**Spécialité** : Mécanique Avancée

D2226



**THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE COMPIEGNE**

Présentée par

**Monsieur Pierre DESPRET**

en vue d'obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE COMPIEGNE

Domaine : Mécanique Avancée

Sujet de la thèse :

**Simulation Numérique de la Solidification avec  
Réduction de Modèle PGD appliquée à la Fonderie**

Thèse présentée et soutenue à Compiègne

Le 08 octobre 2015

devant le jury composé de :

Professeur Amine AMMAR, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers Angers (Rapporteur)

Docteur Eric FEULVARCH, Ecole Nationale d'Ingénieurs de Saint-Etienne (Rapporteur)

Professeur Diran APELIAN, Worcester Polytechnic Institute, Mass. Etats-Unis

Professeur Emmanuel LEFRANCOIS, Université de Technologie de Compiègne (Président)

Docteur Pierre JOYOT, Ecole Supérieure des Technologies Industrielles Avancées Biarritz

Docteur Denis MASSINON, MONTUPET SA

Professeur Pierre VILLON, Université de Technologie de Compiègne (Directeur de thèse)

Docteur Jean-Luc DULONG, Université de Technologie de Compiègne (Directeur de thèse)

Professeur Gérard BERANGER, Université de Technologie de Compiègne, retraité (Invité)



Laboratoire ROBERVAL  
UTC COMPIEGNE/CNRS/UMR7337  
Centre de Recherches de Royallieu  
CS 60319  
60203 Compiègne Cedex FRANCE









## Remerciements

Ce doctorat termine un cycle de près de 10 années d'études enrichissantes, questionnantes et passionnantes. Tout au long de ces années, des milliers personnes ont contribué à mon succès par le partage de leurs savoirs, leurs conseils, leurs idées et je leur en suis reconnaissant.

Je remercie ma mère et mon épouse dont l'attention constante, le soutien et les encouragements m'ont permis de progresser et d'achever ce travail ; ma grand-mère dont les pensées incessantes, tournées vers ma réussite, m'ont grandement aidé ; également ma famille et mes proches qui tout au long de ces années m'ont accompagnés de leur affection. Je remercie ensuite l'ensemble de mes professeurs et exemples qui se sont succédés avec enthousiasme pour former d'abord l'élève puis l'étudiant et le citoyen que je suis maintenant. La transmission des savoirs est un pilier fondamental de notre société, je ferai en sorte, à mon tour, de poursuivre l'élévation et le partage des connaissances. Je pense enfin aux amis avec lesquels je partage tant et dont ni la distance, ni le temps n'entame la sincérité de leurs sentiments à mon égard.

Le doctorat est une expérience très singulière et je suis absolument ravi de l'avoir vécue. Le temps de la thèse offre une approche unique de la Recherche et permet d'élargir le champ des possibles ; le temps de la réflexion est permis. Je suis reconnaissant envers l'entreprise Montupet de m'avoir confié cette mission. J'ai bénéficié d'un encadrement industriel attentif et constant de la part de Denis Massinon et Benoît Drieu qui m'a permis de progresser dans ma connaissance de la métallurgie, ceci doublé d'une écoute attentive de la part des membres du service R&D et en particulier du pôle simulation. L'encadrement académique, réalisé par mes directeurs de thèse, Pierre Villon et Jean-Luc Dulong a été d'une grande qualité, m'apportant efficacement soutien et conseil afin de me former sur les méthodes numériques et d'aboutir à la production de nouveaux savoirs. Je remercie également le laboratoire Roberval, ses dévouées secrétaires ainsi que les doctorants.

Sur proposition de Denis Massinon, j'ai eu la chance de bénéficier d'un séjour de 5 mois aux Etats-Unis, à l'Université Worcester Polytechnic Institute, dans le laboratoire Metal Processing Institute dirigé par Diran Apelian. J'ai eu l'opportunité de découvrir une organisation de la Recherche totalement différente de celle que je connaissais. J'ai bénéficié d'un accueil très chaleureux, tant de la part de l'équipe du laboratoire que des doctorants et cela a permis des échanges très fructueux. Egalement, j'ai eu l'honneur de rencontrer Hal Brody de l'Université du Connecticut. Ce séjour a été pour moi une grande source d'épanouissement et de découverte. Même en dehors de l'Université, j'ai appris à connaître la richesse des habitants du Massachusetts. J'ai tissé de nombreuses relations amicales avec les Etats-Unis dont je suis fier et dont je souhaite me montrer digne. Je remercie sincèrement l'ensemble des personnes qui ont contribué à la réalisation et à la réussite de cette mission internationale.

Le doctorat n'est pas seulement un travail scientifique, mais également l'invitation à approfondir ses connaissances dans d'autres domaines, notamment associatifs et à affirmer ses engagements citoyens. Aussi, je salue celles et ceux qui m'ont accompagnés durant ces années de thèse, qui m'ont fait confiance et avec lesquels j'ai partagé et atteint des objectifs communs.

Je remercie sincèrement les membres de mon jury de thèse de leur intérêt pour mon travail, en particulier, les rapporteurs de thèse Amine Ammar et Eric Feulvarch pour leur appréciation attentive de mes recherches.

En dernier lieu, je suis reconnaissant à la France de m'avoir permis de me former, de me cultiver et de bénéficier de moyens confortables pour mon éducation.

## Résumé

La thèse CIFRE résumée ici s'est déroulée dans un contexte de métallurgie industrielle et de simulation numérique. La modélisation de la solidification, via l'équation de la chaleur et avec des méthodes de réduction de modèle, était un objectif majeur, afin d'obtenir la localisation des défauts de fonderie plus rapidement et plus précisément.

Pour ce faire, différents acteurs ont été réunis. L'entreprise Montupet, spécialisée dans la fonderie d'aluminium, est le porteur du projet et financeur de la thèse. L'université de Technologie de Compiègne (UTC) a réalisé l'accompagnement académique, en particulier sur les méthodes numériques de résolution.

La thèse a d'abord consisté à modéliser de manière instationnaire et avec des propriétés matériaux non linéaires (issues de l'industrie) l'équation de la chaleur, sans changement de phase dans un premier temps. Une méthode éléments finis traditionnelle a été employée avec un schéma temporel implicite, une linéarisation par la méthode de Newton Raphson et une discrétisation éléments finis de l'espace. Cette méthode que nous appellerons "méthode de référence" a été validée en comparaison avec le logiciel QuikCast utilisé au quotidien par l'industriel.

Sur cette base, une recherche en direction des méthodes de réductions de modèles a été menée, dans l'optique de réaliser des plans d'expériences massivement parallélisés. La méthode PGD "Proper General Decomposition", basée sur la méthode de séparation de variables, est actuellement l'objet de nombreuses recherches. Nous avons décidé d'y apporter notre contribution. La prise en compte de non linéarités s'est avérée assez peu développée dans la littérature pour cette méthode. Dans la mesure où il s'agit là de notre premier besoin, nous avons proposé une discrétisation spatio-temporelle des matrices matériaux. Celle-ci facilite la séparation des variables espace et temps pour les propriétés matériaux et limite les approximations commises par l'usage d'autres méthodes de séparation, plus intrusives (POD "Proper Orthogonal Decomposition").

Pour la méthode PGD et dans le cas de propriétés matériaux non linéaires, nous avons observé des gains de temps de l'ordre de 17, pour une erreur de 2% par rapport à la méthode de référence. Ce gain s'explique principalement par le nombre très faible de systèmes à résoudre dans le cas PGD. Il est à noter que ces gains de temps pourraient être améliorés par le changement de langage de codage. Ceci de telle manière qu'un gain théorique de 90 serait alors envisageable.

Nous avons poursuivi la méthode développée en prenant maintenant en compte la solidification (la libération de la chaleur latente de fusion). Il s'agit là d'une augmentation forte de la non linéarité. Il s'avère que les résultats de la méthode développée chutent à un gain inférieur à 5, pour 40 modes et avec une erreur qui plafonne à plus de 6%. Ces résultats ne sont pas acceptables d'un point de vue industriel et il nous faut nous questionner sur la formulation employée.

Jusqu'à présent, nous avons utilisé une formulation de l'équation de la chaleur en température (qui est la formulation la plus connue et la plus diffusée). Nous formulons l'hypothèse que la difficulté de convergence de la méthode PGD dans le cas de la solidification repose sur une formulation en température inadaptée. Nous décidons alors d'opter pour une formulation en enthalpie et d'y appliquer la méthode PGD.

Une méthode développée par Eric Feulvarch, consiste à résoudre un système de deux équations à deux inconnues, la première est l'équation mixte de la chaleur, en fonction de l'enthalpie et de la température et la seconde est une relation de comportement reliant la température à l'enthalpie. Cette formulation permet la prise en compte de la solidification.

Sur cette base, nous avons substitué la seconde équation dans la première pour n'avoir qu'une équation à une inconnue : l'enthalpie. Nous avons montré que cette formulation produit de bons résultats

au regard de la formulation de référence. Aussi, nous avons décidé d'y appliquer la méthode de résolution PGD. Il s'agit alors non plus de rechercher un champ de température mais un champ solution en enthalpie.

Il s'avère que cette formulation converge sur un modèle 1D avec une forte discontinuité en conditions aux limites (alors que la résolution PGD en température non), de telle manière que cela offre des perspectives encourageantes pour un modèle 2D à venir.

Il faut néanmoins garder à l'esprit qu'il s'agit là d'un modèle très simplifié. Cette méthode de résolution nécessite encore des recherches, nous pouvons toutefois exprimer dès à présent que cette méthode s'annonce au moins aussi efficace que la première utilisée (en température uniquement).

En parallèle de ces développements, un séjour de 5 mois aux Etats-Unis a été réalisé afin d'obtenir une meilleure caractérisation des propriétés matériaux, et en particulier de la fraction solide. Cette dernière est très importante dans le modèle en température que nous avons développé en première partie. De plus, il a été observé industriellement des écarts entre la simulation et la modélisation selon que la partie de la pièce refroidisse lentement ou très rapidement. De telle manière que la recherche s'est portée sur l'évolution de la fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement. Sous réserve de mesures complémentaires, il a été observé une relation de comportement entre les températures de solidification (liquidus, eutectique et solidus) et la vitesse de refroidissement sur un intervalle de vitesse allant de  $0,2^{\circ}\text{C/s}$  à  $0,8^{\circ}\text{C/s}$ . En d'autres termes, la fraction solide ne serait pas seulement fonction de la température mais également de sa dérivée : la vitesse de refroidissement.

**Mots clés** Contexte métallurgique de la fonderie, simulation de la solidification, éléments finis, méthode de réduction de modèles, méthode PGD, non linéarité matériaux, enthalpie, fraction solide, vitesse de refroidissement.

## Abstract

Metallurgy and numerical simulation are the main focus of this CIFRE thesis (involving industrial partners). In particular, the phase change through the heat equation solved by reduced order model, in order to get the localisation of the main foundry defects : shrinkages. Lot of energy is involved in industry to reduce development cycles thanks to simulation. To achieve this goal, the Montupet company, leader in aluminum casting, supported this project ; the Université de Technologie de Compiègne (UTC) did the academic advising about numerical methods.

The unsteady state with non linear thermal properties (coming from the industry) of the thermal heat equation have been first modelled without phase change using usual finite element method : implicit time scheme, Newton-Raphson linearization and finite element discretization. This method is called "méthode de référence" validated regarding the daily commercial industrial casting software : QuikCast.

$$\rho c_p(T(\mathbf{x}, t)) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)) = 0$$

From there, a research toward numerical reduction models has been carried out to allow coming experimental design done by massively parallel processing. A pistonhead casting simulation lasts at least 24 hours, we are looking for a tool to ensure the time consuming simulation is worth doing it. To do so, we looked at the PGD method "Proper General Decomposition". Based on variable separation, this method is currently the object of numerous researches. The solution field is written as a sum of product of functions, each one depending only of a variable.

$$T^m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \varphi_i(\mathbf{x}) a_i(t)$$

The greedy algorithm uses a modal loop to "enrich" the previous temperature field with a new couple of solution, and so on until convergence. The modes are found by an alternative direction resolution method.

$$T^{m+1}(\mathbf{x}, t) = T^m(\mathbf{x}, t) + R(\mathbf{x})S(t)$$

Until now, the non linearities are few developed in PGD. However it is our main need since the thermal coefficients depend on temperature (data coming from industry). Moreover, we uses alloys that implies a range of temperature phase change : we proposed a spatio-temporal discretization of the material matrices in order to facilitate the variable separation in space and time. The coefficients are discretized with space and time shape functions with a huge matrix of the coefficient at all nodes at all time. This idea presents the advantage to not employ the traditional but intrusive POD method "Proper Orthogonal Decomposition" which could introduce unwanted noise.

$$\begin{aligned} k(T(\mathbf{x}, t)) &= \mathbf{N}^T(\mathbf{x})[\mathbf{K}]\mathbf{P}(t) \\ \rho c_p(T(\mathbf{x}, t)) &= \mathbf{N}^T(\mathbf{x})[\mathbf{C}]\mathbf{P}(t) \end{aligned}$$

With the PGD method, for non-linear thermal coefficients without phase change, we get a gain in time at 17 for an error at 2% regarding the reference method for a 2D model. This is due to the very restricted number of system to be solved in PGD compared with the reference method. A complexity analysis has shown that the coding could be even improved to raise the gain up to 90.

We kept on searching for taking in account the phase change (and precisely the release of the latent heat) ; this creates a very sharp discontinuity of the non linearity. The gain falls to 5 for 40 modes and the error stays at 6% ; unacceptable for industrial. We have to think about changing the formulation of the heat equation.

Until now, we used the thermal heat equation formulation (widely spread and used) ; we formulate the hypothesis that this formulation could not be well adapted to the variable separation and we decided to solve the enthalpy equation with PGD. A method developed by Eric Feulvarch solve a system of two equations and two unknowns : the first equation is a mixed equation in enthalpy and temperature and the

second is a behaviour law between temperature and enthalpy. This formulation allows to take into account the phase change directly.

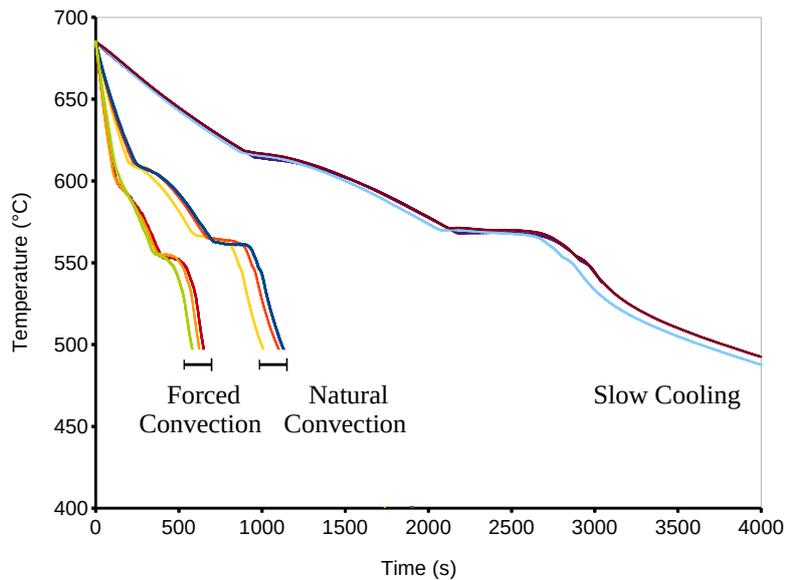
$$\begin{cases} \rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot [k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)] = 0 \\ T = \tilde{T}(h) \end{cases}$$

From there, we substituted the second equation into the first to get a one equation with one unknown : the enthalpy.

$$[\mathbf{M}]\dot{\mathbf{h}} + [\mathbf{K}(\mathbf{h})]\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{h}) = \mathbf{F}$$

Confident in this formulation solved with the reference method, we applied the PGD method and solved the following equation to find now the enthalpy field on a 1D model, with great results. More researches must be done to apply it at a 2D model.

During this thesis a metallurgical experiment have been carried out abroad during a 5-month trip at WPI, MA, USA, at the MPI Lab of Pr. Apelian. This to get a better understanding of the solid fraction evolution in function of temperature. This latter is very important to model the release of the latent heat developed in the first part. Moreover, it has been observed a gap between commercial casting software and experiments for high cooling rates. That leads us to evaluate the solid fraction as a function of the cooling rate : we observed an influence. That means, from our experiements, that solid fraction could be dependant not only with temperature but also with cooling rate.



**Mots clés** Foundry metallurgy, solidification simulation, finite element, reduction order modelling, PGD method, non linear thermal coefficients, enthalpy, solid fraction, cooling rate.

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Contexte, généralités et métallurgie</b>	<b>16</b>
<b>1</b>	<b>Métallurgie</b>	<b>20</b>
1.1	Les procédés de fonderie . . . . .	21
1.2	Thermodynamique . . . . .	26
1.3	La transformation liquide-solide . . . . .	29
1.3.1	Courbe de refroidissement . . . . .	29
1.3.2	Fraction solide . . . . .	31
1.3.3	Chaleur latente . . . . .	31
1.3.4	Capacité calorifique . . . . .	32
1.3.5	L'enthalpie . . . . .	33
1.4	Le diagramme de phase binaire . . . . .	34
1.4.1	Diagramme de phase Binaire . . . . .	34
1.5	L'état semi-solide et solide . . . . .	37
1.6	Flux de masse . . . . .	40
1.6.1	Coefficient de partition . . . . .	43
1.6.2	Modèle de diffusion à l'équilibre - Règle des segments inverses . . . . .	48
1.6.3	Modèle de diffusion Scheil-Gulliver . . . . .	51
1.6.4	Modèle de diffusion "Back Diffusion" - Modèle Brody-Flemings . . . . .	53
1.7	Conclusion du chapitre . . . . .	56
<b>II</b>	<b>Modélisation de la thermique non linéaire</b>	<b>60</b>
<b>2</b>	<b>Modélisation de la thermique non-linéaire sans chaleur latente</b>	<b>60</b>
2.1	Équation de la chaleur . . . . .	60
2.1.1	Thermodynamique et propriétés matériaux . . . . .	60
2.1.2	Equation de la chaleur mixte en température et enthalpie . . . . .	60
2.1.3	Equation de la chaleur en température . . . . .	61
2.2	Méthode de référence de résolution . . . . .	62
2.2.1	Formulation variationnelle . . . . .	62
2.2.2	Schéma temporel implicite . . . . .	63
2.2.3	Linéarisation et résolution par la méthode Newton-Raphson . . . . .	64
2.2.4	Discrétisation Éléments finis . . . . .	64
2.2.5	Discrétisation du résidu . . . . .	65
2.2.6	Discrétisation de la matrice tangente . . . . .	66
2.3	Résolution par réduction de modèles <i>a priori</i> : PGD . . . . .	66
2.3.1	Bibliographie - Algorithme . . . . .	66
2.3.2	Algorithme de résolution de $R(x)$ et $S(t)$ . . . . .	69
2.3.3	Formulation variationnelle . . . . .	70
2.3.4	Discrétisation en Éléments Finis . . . . .	71
2.3.5	Méthodologie de la gestion des champs matériaux . . . . .	71
2.3.6	Formulation du point fixe . . . . .	73
2.3.7	Critères de sortie et d'erreur . . . . .	76
2.4	Application au modèle 2D Industriel . . . . .	77
2.5	Résultats et comparaisons des méthodes PGD et de référence appliquées à un modèle 2D . . . . .	79
2.6	Analyse du code et origine des gains de la méthode PGD . . . . .	82
2.6.1	Analyse du "PROFILER" . . . . .	82
2.7	Conclusion du chapitre . . . . .	83

<b>III</b>	<b>Modélisation de la thermique non linéaire avec chaleur latente</b>	<b>88</b>
<b>3</b>	<b>Modélisation du changement de phase</b>	<b>88</b>
3.1	Méthode du terme source . . . . .	88
3.2	Formulation de référence : $c_{p\text{ app}}$ . . . . .	89
3.3	Schéma numérique de résolution PGD . . . . .	90
3.4	Résultats et comparaisons des méthodes PGD avec formulation $c_{p\text{ app}}$ et de référence appliquées à un modèle 1D . . . . .	91
3.4.1	Présentation du modèle . . . . .	91
3.4.2	Résolution du modèle analytique . . . . .	92
3.4.3	Résolution numérique . . . . .	93
3.4.4	Comparaison des résultats . . . . .	93
3.5	Résultats et comparaisons des méthodes PGD avec formulation $c_{p\text{ app}}$ et de référence appliquées à un modèle 2D . . . . .	95
3.6	Analyse du code et origine des gains de la méthode PGD . . . . .	98
3.6.1	Analyse du "PROFILER" . . . . .	98
3.7	Conclusion partielle : . . . . .	99
3.8	Méthodes enthalpiques . . . . .	99
3.8.1	Moyenne spatiale . . . . .	100
3.8.2	Moyenne temporelle . . . . .	101
3.8.3	Algorithme de la méthode enthalpique . . . . .	101
3.9	Méthode enthalpique, de Desbiolles à Feulvarch . . . . .	102
3.9.1	Méthode proposée par Desbiolles . . . . .	103
3.9.2	Méthode de Feulvarch . . . . .	104
3.10	Proposition de Méthode Feulvarch Modifiée (MFM) . . . . .	104
3.10.1	Formulation variationnelle et discrétisation . . . . .	105
3.10.2	Formulation forte . . . . .	106
3.10.3	Formulation faible . . . . .	106
3.10.4	Discrétisation spatiale . . . . .	106
3.10.5	Discrétisation temporelle . . . . .	108
3.10.6	Linéarisation par la méthode de Newton Raphson (MNR) . . . . .	108
3.11	Résultats et comparaisons des méthodes implicites formulées en MFM et $c_{p\text{ app}}$ appliquées à un modèle 2D . . . . .	108
3.12	Méthode Feulvarch Modifiée et PGD . . . . .	111
3.12.1	Discrétisation Eléments Finis . . . . .	112
3.12.2	Linéarisation par la méthode Newton-Raphson . . . . .	113
3.13	Résultats et comparaison des méthodes PGD avec formulation MFM et de référence appliquées à un modèle 1D . . . . .	114
3.14	Prise de recul sur la méthode enthalpique . . . . .	116
3.15	Conclusion du chapitre . . . . .	116
<b>IV</b>	<b>Travaux expérimentaux</b>	<b>120</b>
<b>4</b>	<b>Travaux expérimentaux</b>	<b>120</b>
4.1	Objectifs . . . . .	120
4.2	Dispositif expérimental et méthodologie . . . . .	122
4.3	Courbes de refroidissement . . . . .	132
4.3.1	Résultats bruts . . . . .	132
4.3.2	Traitement du signal . . . . .	133
4.3.3	Résultats traités . . . . .	134
4.4	Evolution des températures de liquidus, eutectique et solidus . . . . .	135

4.5	Extrapolation de la courbe de fraction solide . . . . .	140
4.5.1	Newton Heat balance (1 thermocouple) . . . . .	141
4.5.2	Méthode de Fourier (2 thermocouples) . . . . .	144
4.5.3	Méthodes de Stonebrook et Sicha . . . . .	144
4.6	Comparaison de la fraction solide . . . . .	146
4.7	”The solid fraction dilemma” . . . . .	149
4.8	Conclusions . . . . .	150
4.9	Perspectives expérimentales . . . . .	151
4.10	Conséquence d’une prise en compte de la vitesse de refroidissement sur la simulation . . . . .	151
4.10.1	Modèle 1D avec vitesse de refroidissement . . . . .	152
4.10.2	Résultat du modèle 1D avec vitesse de refroidissement . . . . .	152

**Références** **156**

**Table des figures**

0.1	Schématisation en triangle du procédé de solidification et des limites de la modélisation entreprise dans cette thèse . . . . .	19
0.2	Pièces automobiles produites dans le groupe Montupet SA (Source : montupet.fr) . . . . .	20
1.1	Courbe de Wöhler d’une même pièce réalisée pour différents procédés de fonderie (Source : [Suery, 2015]) . . . . .	22
1.2	Schématisation du procédé de moulage sable (Source : larousse.fr) . . . . .	23
1.3	Exemple de moule et de pièce du procédé de moulage par gravité (Source : fonderie-mrt.fr) . . . . .	24
1.4	Schématisation du procédé de moulage basse pression (Source : [Garat, 2015]) . . . . .	25
1.5	Schématisation du procédé semi-solide par injection (Source : [Suery, 2015]) . . . . .	25
1.6	Conductivité thermique $k$ en fonction de la température $T$ pour un alliage AlSi7Mg (Source : JMatPro) . . . . .	28
1.7	Evolution de la masse volumique en fonction de la température pour un alliage de type AlSi7Mg (Source : JMatPro) . . . . .	29
1.8	Schématisation de la courbe de refroidissement de l’eau . . . . .	30
1.9	Courbe de refroidissement d’un alliage AlSi7Mg (Source : P. Despret) . . . . .	30
1.10	Evolution de la fraction solide en fonction de la température pour un alliage de type AlSi7Mg (Source : JMatPro) . . . . .	31
1.11	Capacité calorifique en fonction de la température pour un alliage AlSi7Mg (Source : JMatPro) . . . . .	33
1.12	Présentation de l’enthalpie pour un corps pur (à gauche) et d’un alliage (à droite) en fonction de la température (Source : [Glicksman, 2010]) . . . . .	34
1.13	Diagramme de phase Al-Si (Source : [S. M. H. Mirbagheri and Firoozi, 2011]) . . . . .	35
1.14	Schématisation du diagramme de phase binaire Al-Si . . . . .	36
1.15	Agrandissement du diagramme de phases binaires Al-Si . . . . .	36
1.16	Dimension de la zone pâteuse en fonction de la racine de la vitesse de progression du front de solidification (à gauche) Schématisation de dendrites dans la zone pâteuse (à droite) (Source : DR) . . . . .	38
1.17	Schématisation de la mesure du DAS et du SDAS entre les bras primaires et secondaires (Source : D. Apelian ) (au dessus) et mesure concrète sur une micrographie (Source : [B. Zhang, 2003]) (au dessous) . . . . .	39
1.18	Corrélation entre DAS et temps local de solidification . . . . .	41
1.19	Mise en corrélation du SDAS avec le temps de solidification pour différentes concentrations en Si pour des alliages Al-Si (Source : [Spear, 1963])(à gauche)et Evolution du DAS en fonction de la quantité d’éléments de soluté présent dans un alliage Al-Si (Source : [Bamberger et al., 1986])(à droite) . . . . .	42

1.20	Evolution de la diffusivité de certains éléments chimiques en fonction de la température (Source : [Campbell, 2003]) . . . . .	43
1.21	Schématisation du coefficient de partition déterminé à partir d'un diagramme de phase quelconque . . . . .	44
1.22	Coefficients de partition positifs ou négatifs selon l'orientation des liquidus et solidus du diagramme de phase . . . . .	45
1.23	Dendrites et isoconcentrations internes [Gardon and Kurz, 1981] . . . . .	45
1.24	Croissance eutectique compétitive (à gauche) et photographie de la phase eutectique d'un AlSiCu10 (à droite) (Source : CTIF) . . . . .	47
1.25	Schématisation de la migration du soluté en excès dans le solvant . . . . .	48
1.26	Schématisation de la croissance dendritique au cours du temps et volumes élémentaires associés . . . . .	48
1.27	Evolution de la solidification pour un refroidissement à l'équilibre dans un volume élémentaire (Source : [Stefanescu, 2008]) . . . . .	50
1.28	Evolution de la solidification pour un refroidissement suivant un modèle de Scheil-Gulliver à l'équilibre dans un volume élémentaire (Source : [Stefanescu, 2008]) . . . . .	51
1.29	Schématisation de la distribution de concentration du soluté pour la loi de Scheil-Gulliver	52
1.30	Schématisation de la distribution de concentration du soluté pour la loi de Back Diffusion	54
1.31	Approximation des pentes de liquidus et solidus par une série de segments (Source : [Brody, 1965]) . . . . .	55
1.32	Tracé de différents modèles analytiques de fraction solide pour un alliage eutectique (Source : [Brody, 1965]) . . . . .	56
2.1	Champ de température (gauche) et champ de conductivité associé (droite) . . . . .	73
2.2	Comparaison des champs de conductivité thermique original (à gauche) et reconstruit avec 4 modes (à droite) . . . . .	73
2.3	Modélisation CAO d'une éprouvette à retassures avec descente de coulée, pièce et masetlotte (Source : Montupet SA) . . . . .	77
2.4	Modèle 2D : Profil d'une éprouvette à retassures issue de la CAO industrielle (à gauche) (Source : Montupet SA) et sa modélisation pour résolution sous Matlab, la croix rouge indique la localisation du point sonde dont nous allons tracer l'évolution de la température (à droite) . . . . .	78
2.5	Détail du maillage à 803 mailles complet (à droite) et agrandissement de la zone échancre (à gauche) . . . . .	79
2.6	Tracé de la température du point sonde en fonction du temps, tracé pour la méthode de référence et la méthode PGD pour 3 et 8 modes . . . . .	80
2.7	Tracé de l'erreur et du gain en fonction du nombre de modes de la PGD par rapport à la méthode de référence pour un maillage de 803ddl . . . . .	81
3.1	Tracé de la capacité calorifique sans chaleur latente (à gauche) et avec chaleur latente (à droite), tous deux pour un alliage AlSi7Mg (Source : [JMatPro, 2014]) . . . . .	90
3.2	Schématisation du Modèle 1D à l'instant initial . . . . .	91
3.3	Schématisation des différents domaines de la simulation à $t > 0s$ , laissant apparaître les phases solide, pâteuse et liquide, ainsi que leurs interfaces fonction du temps . . . . .	91
3.4	Localisation du point sonde, rouge, en $x=0,04m$ . . . . .	93
3.6	Capacité calorifique par morceaux et régularisée . . . . .	94
3.5	Evolution temporelle de la température avec capacité calorifique constante par morceaux et croissance progressive de la non linéarité . . . . .	94
3.7	Evolution temporelle de la température avec capacité calorifique régularisée et croissance progressive de la non linéarité . . . . .	95
3.8	Agrandissement des tracés de l'erreur et du gain en fonction du nombre de modes pour la méthode PGD par rapport à la méthode de référence pour le modèle 2D à 803ddl . . . . .	96

3.9	Annotations et comparaison des tracés de l'évolution de la température au cours du temps au point sonde, pour la méthode PGD et la méthode de référence afin de faire apparaître les écarts de température sur l'intervalle de solidification et en dehors . . . . .	97
3.10	Tracé schématique de l'enthalpie en fonction de la température pour un alliage à propriétés matériaux constantes par morceaux (Source : [Dantzig and Rappaz, 2009]) . . . . .	100
3.11	Tracé de l'enthalpie en fonction de la température pour un alliage AlSi7Mg (Source : [JMatPro, 2014]) . . . . .	100
3.12	Tracés de l'enthalpie en fonction de la température, régularisés par la méthode MLS [Breitkopf et al., 2005] (à gauche) et de sa bijection (à droite), pour un alliage AlSi7Mg .	103
3.13	Illustration de l'influence de la bijection de l'enthalpie sur le calcul de la matrice tangente à la température de changement de phase, dans le cas habituel (à gauche) la tangente tend vers l'infini alors que dans le cas de sa bijection (à droite), celle-ci tend vers 0 . . . . .	105
3.14	Tracés de l'évolution de la température en fonction du temps pour les méthodes MFM et $c_{p\ app}$ , pour un MTSA=1s . . . . .	109
3.15	Tracés des pas de temps cumulés au cours du temps de simulation pour les méthodes MFM et $c_{p\ app}$ . . . . .	109
3.16	Tracés des évolutions de la température avec un MTSA=50s pour la méthode MFM et celle avec $c_{p\ app}$ , ceci en comparaison de la méthode avec $c_{p\ app}$ et MTSA=0,1s . . . . .	111
3.17	Enthalpie et enthalpie régularisée . . . . .	115
3.18	Evolution temporelle de la température . . . . .	115
3.19	Evolution de la température et de l'enthalpie pour 803ddl avec libération de chaleur latente	117
4.1	Analyse thermique sur une culasse pour un alliage à base Al-Cu (Source : Montupet SA projet Tomopic) . . . . .	121
4.2	Schéma du dispositif expérimental mis en place afin de mesurer la température au cours du refroidissement et de permettre une trempe de l'échantillon si cela est souhaité . . . . .	122
4.3	Tests de mise en place du dispositif et premières mesures . . . . .	123
4.4	Photographie du dispositif expérimental effectivement utilisé en cours de chauffe . . . . .	124
4.5	Photographie du dispositif expérimental effectivement utilisé avec dispositif d'acquisition	125
4.6	Photographie noir et blanc d'un échantillon trempé. Observation des dendrites formées avant la trempe (grandes dendrites blanches) et de celles formées pendant (très petites dendrites regroupées entre les grandes). . . . .	128
4.7	Contourage des dendrites formées avant la trempe . . . . .	129
4.8	Coloration du contourage afin de faciliter le calcul des surfaces (seules les dendrites formées pendant la trempe sont encore visibles) . . . . .	130
4.9	Illustration du choix de la taille de la surface de mesure pour une identification automatique des dendrites . . . . .	131
4.10	Courbes de refroidissement expérimentales pour différentes vitesses de refroidissement .	132
4.11	Dérivée temporelle première d'une courbe de refroidissement . . . . .	133
4.12	Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en refroidissement lent du four . . . . .	134
4.13	Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en convection naturelle . . . . .	135
4.14	Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en convection forcée . . . . .	135
4.15	Evolution des températures de changement de phases en fonction de la vitesse de refroidissement (les traits horizontaux représentent les températures données par JMatPro) . . . . .	137
4.16	Détermination d'une incertitude de lecture des températures de Liquidus et d'Eutectique d'après la dérivée thermique première, selon que l'on considère la base ou le sommet du saut. . . . .	138
4.17	Agrandissement pour la température liquidus de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement . . . . .	138
4.18	Agrandissement pour la température eutectique de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement . . . . .	139

4.19	Agrandissement pour la température solidus de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement (les barres d'incertitudes sont petites) . . . . .	139
4.20	Illustration de la méthode méthode Newton Heat Balance sur une dérivée première thermique . . . . .	142
4.21	Fraction solide à partir de la méthode Newton Heat Balance . . . . .	143
4.22	Illustration de la méthode de Stonebrook et Sicha . . . . .	144
4.23	Fraction solide à partir de la méthode de Stonebrook et Sicha . . . . .	145
4.24	Comparaison des modèles de fraction solide en refroidissement lent . . . . .	147
4.25	Comparaison des modèles de fraction solide en convection naturelle . . . . .	148
4.26	Comparaison des modèles de fraction solide en convection forcée . . . . .	148
4.27	Ecart entre la fraction solide calculée par analyse thermique et mesurée par trempé [Nafisi et al., 2009] . . . . .	149
4.28	Courbes de fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement obtenues par la méthode de Fourier pour des alliages AlSi7 (a) et AlSi6 (b)[Nafisi et al., 2009] . . . . .	149
4.29	Effet de la vitesse de refroidissement sur la nucléation de la phase alpha . . . . .	150
4.30	Evolution de la température au cours du temps avec et sans prise en compte de l'influence de la vitesse de refroidissement sur l'intervalle de solidification. . . . .	152

## Liste des tableaux

1	Comparaison des courbes de fraction solide obtenues par le logiciel JMatPro et les modèles analytiques . . . . .	57
2	Détail des cotations de l'éprouvette à retassures modélisée sous matlab (modèle 2D) . . . . .	78
3	Tableau algorithmique comparatif afin d'établir le nombre des systèmes à résoudre pour chacune des méthodes . . . . .	83
4	Tableau des propriétés matériaux appliquées au modèle 1D pour chacune des phases . . . . .	92
5	Récapitulatif des écarts observés entre la courbe PGD avec 40 modes et la méthode de référence . . . . .	98
6	Tableau algorithmique comparatif afin d'établir le nombre des systèmes à résoudre pour chacune des méthodes . . . . .	98
7	Tableau des gains et disparité pour différents MTSA . . . . .	110
8	Récapitulatif des types de refroidissement, des températures de trempé ainsi que des masses des échantillons . . . . .	126
9	Températures de changement de phase et vitesses de refroidissement pour différents types de refroidissements . . . . .	136
10	Tableau des vitesses moyennes de refroidissement et du nombre de mesures effectuées . . . . .	136
11	Synthèse des valeurs des droites de régression linéaire . . . . .	140
12	Analyse chimique d'un échantillon trempé, alliage AlSi7Mg . . . . .	140

## Liste des algorithmes

1	Algorithme de la méthode PGD - enrichissement . . . . .	68
2	Algorithme complet de la méthode PGD avec résolution du couple (R,S) par la méthode du Point Fixe . . . . .	70
3	Algorithme complet de la méthode PGD avec résolution du couple (R,S) par la méthode du Point Fixe . . . . .	76
4	Algorithme de la méthode enthalpie . . . . .	102
5	Algorithme de la méthode "Temperature Recovery Method" . . . . .	102

## Introduction Générale de la thèse

Cette thèse, réalisée dans le cadre d'une Convention Industrielle de Formation par la REcherche (CIFRE), a pour objet la modélisation de la solidification de métaux, dans le contexte industriel de la fonderie. L'entreprise Montupet, fondeur d'aluminium, est le partenaire industriel, l'Université de technologie de Compiègne (UTC) est le partenaire académique. La thématique proposée s'articule autour de la simulation. De ce fait, la majeure partie de cette thèse sera dédiée à la recherche de nouveaux algorithmes numériques permettant de modéliser aussi finement le phénomène physique de changement de phase que les méthodes "traditionnelles" mais surtout de gagner du temps de calcul. Pour ce faire, l'équation de la chaleur instationnaire et non linéaire en température sera utilisée. Nous aborderons différentes formulations de cette équation, avec des schémas numériques également différents. En particulier, nous nous tournerons vers les méthodes de réduction de modèles pour accomplir notre objectif de gain de temps. La méthode "Proper General Decomposition PGD" sera adaptée afin de prendre en compte des propriétés matériaux non linéaires en fonction de la température fournies par l'industriel. Cette méthode, nous le verrons offre des gains intéressants sur un cas en deux dimensions.

Le raisonnement mené au cours de cette thèse et qui a conduit ces trois dernières années repose d'une part sur un apprentissage des méthodes numériques de résolution d'équations différentielles. En effet, le doctorant, ingénieur UTC 2011 issu de la filière génie mécanique était plutôt orienté vers les matériaux. Ainsi, il a d'abord été codé l'équation de la chaleur stationnaire puis instationnaire pour ensuite inclure des propriétés matériaux non linéaires. Une recherche bibliographique a été menée afin d'identifier les différentes manières de modéliser le changement de phase. En effet, il est possible d'avoir des propriétés matériaux non linéaires sans pour autant prendre en compte la libération de la chaleur latente de fusion. La formulation dite de la capacité calorifique apparente s'est rapidement imposée de par sa facilité de mise en œuvre.

Sur cette base, la méthode PGD a été implémentée d'abord sans changement de phase, des résultats très satisfaisants ont été observés. Dans un second temps, la prise en compte du changement de phase a été effectué. Cela réduit les gains, tout en conservant un net avantage face à la méthode de référence. Dans le but d'obtenir des gains meilleurs, il a été envisagé de changer de formulation de l'équation de la chaleur. Ceci de telle manière que la formulation mixte en enthalpie et température a été modifiée pour être implémentée avec la méthode de résolution numérique PGD. Pour ce faire, une étape intermédiaire a consisté à modifier la méthode proposée par Eric Feulvarch en 2009 dans le but d'obtenir une équation de la chaleur en enthalpie seule. Cette dernière a été implémentée avec une méthode de résolution de type PGD.

Après avoir appréhendé le codage sous Matlab de méthodes de résolution numériques, il a été permis au doctorant de réaliser un séjour de 5 mois dans un laboratoire partenaire aux Etats-Unis : le laboratoire Metal Processing Institute de l'université Worcester Polytechnic Institute, située près de Boston, afin d'approfondir ses connaissances des phénomènes de solidification des alliages. A cette occasion, en plus de suivre des cours avancés sur les sujets métallurgiques, il a pu se former aux pratiques expérimentales et réaliser des analyses thermiques. Une recherche a été menée pour connaître l'effet de la vitesse de refroidissement sur l'évolution de la courbe de fraction solide en fonction de la température. Nous le verrons, la fraction solide occupe une place cruciale dans la modélisation de la libération de la chaleur latente de fusion, dans le cas d'une formulation de l'équation de la chaleur en température seule. Ceci sera développé en partie 4 de ce manuscrit.

Enfin, il faut préciser que ce manuscrit ne révèle pas la totalité des travaux menés durant les années de doctorat dans la mesure où une partie des recherches, menées à des fins industrielles, a porté sur l'identification et la mise en œuvre de logiciels libres de calculs de solidification non linéaire. Ceci en vue d'une application à la mécanique des fluides et au calcul intensif. Ceci dans le cadre du projet PROFOND en partie financée par la région Picardie.

## Première partie

# Contexte, généralités et métallurgie

## Contexte

En fonderie, la course à la performance industrielle passe nécessairement par la modélisation des phénomènes physiques mis en jeu lors des différentes étapes du processus. Plus les modélisations seront proches de la réalité et plus il sera possible de comprendre et d'anticiper les comportements de des produits et ainsi fournir un service de qualité. L'objectif in fine de l'industriel de la fonderie est de pouvoir modéliser le processus complet de coulée, depuis le four de fusion et les lingots d'aluminium jusqu'au démoulage de la pièce et son traitement thermique, en passant par la solidification au niveau macroscopique tout en prenant en compte les interactions dues aux phénomènes atomiques et moléculaires qui permettent de prédire l'apparition de défauts éventuels. Ce lien micro-macro est d'ailleurs la clé des simulations de demain. L'augmentation des capacités de calculs semble suivre jusqu'à présent la loi empirique de Moore<sup>1</sup> qui prévoit un doublement de la puissance de calcul des processeurs tous les 18 mois [Delahaye, 2001]. Les projections actuelles s'orientent plutôt vers une loi exponentielle. Nos besoins en puissance de calcul augmentent également très rapidement et la simulation est de plus en plus sollicitée. Ce rêve de simuler complètement un processus, à la fois au niveau macroscopique et microscopique se réalisera assurément.

Pour résoudre les équations qui décrivent les phénomènes physiques, la simulation numérique actuelle emploie des méthodes de résolution incrémentales où le temps est fractionné finement (pour assurer la convergence de la résolution) et où l'espace est discrétisé (pour capter correctement les variations spatiales). Toutefois, dès l'instant où nous raffinons le temps et l'espace, le temps de calcul, bien réel lui, s'égraine. Les cycles de vie des produits et donc leur durée de conception se réduisent et les coûts de développement sont de plus en plus élevés. Aussi, et ce sera un axe majeur de ce mémoire, la recherche de méthodes de calculs plus rapides est un enjeu industriel majeur.

**Le projet ProFond** Cette thèse s'inscrit dans le projet ProFond visant une optimisation des PROCédés de FONDerie. Ceci dans un cadre plus large du développement de la plateforme Industrilab<sup>2</sup> qui vise à mettre à disposition des industriels picards une structure technique de qualité. Aussi, notre projet reçoit des financements du Conseil Régional pour réaliser un réseau de calculs intensifs à distance. Il regroupe quatre partenaires picards. Tout d'abord Montupet SA, qui est le porteur de projet et spécialiste de la fonderie d'aluminium, réalise des culasses de moteurs automobiles. La culasse est la pièce stratégique qui apporte les éléments du mélange carburant et air juste avant leur introduction dans la chambre et l'explosion. La culasse conduit également les gaz de combustion vers les échappements. C'est une pièce fondamentale dans l'amélioration des performances des moteurs thermiques<sup>3</sup>. Un second industriel, EJ<sup>4</sup>, est quant à lui spécialisé dans les alliages de fonte et réalise des systèmes de collecte d'eaux pluviales pour la voirie. Deux universités sont également engagées dans ce projet, l'Université de Technologie de Compiègne (UTC) via deux numériciens du laboratoire Roberval qui dirigent cette thèse. Leurs domaines de compétence traitent des algorithmes de résolution d'équations et de réduction de modèles. L'Université Jules Verne de Picardie (UPJV), par le biais de l'INSSET de Saint-Quentin, réalise l'interfaçage Homme-Machine. Le projet vise au lancement des calculs parallélisés sur de puissants serveurs à distance.

---

1. Données recueillies entre 1965 et 2000.

2. <http://www.industrilab.fr>

3. Comme imposée par les différentes normes européennes (Euro 5 à partir du 01/01/2011 et Euro 6 à partir du 01/09/2015). [[europa.eu/legislation\\_summaries/environment/air\\_pollution/128186\\_fr.html](http://europa.eu/legislation_summaries/environment/air_pollution/128186_fr.html)]

4. ex-Norfond

**Objectifs de la thèse** Les objectifs industriels de cette thèse sont : de sélectionner et d'utiliser une suite de logiciels libres pour simuler la solidification ; d'implémenter la solidification et le changement de phase pour prendre en compte les propriétés matériaux non linéaires issues de l'industrie ; de réaliser les premières applications sur des cas tests industriels et de prédire l'apparition de défauts de fonderie via les courbes isothermes.

Ainsi, parmi les résultats attendus, les industriels pourront disposer d'un logiciel libre permettant de réaliser des simulations du refroidissement, de la solidification. Le logiciel libre prend toute sa dimension en ce que nous pouvons accéder aux codes exécutés et les adapter à notre besoin. Les codes commerciaux sont des boîtes noires où nous ne connaissons pas la nature des calculs effectués et surtout où nous n'avons aucune possibilité de personnalisation du code. Un autre avantage du logiciel libre est qu'il n'y a pas de licence d'exploitation. Il peut être facilement installé sur différents serveurs de calculs, sans restriction du nombre de processeurs qu'induit l'utilisation de logiciels commerciaux. Il nous a alors fallu sélectionner une suite de logiciels libres qui puisse répondre à nos besoins depuis la gestion de la CAO, jusqu'à l'exploitation du résultat. Une attention particulière a été portée au choix du solveur.

D'un point de vue scientifique, les objectifs sont : de coder la méthode de réduction de modèles Proper General Decomposition (PGD) ; d'appliquer cette méthode à l'équation de la chaleur avec propriétés matériaux non linéaires ; de prendre en compte la solidification par la libération d'énergie de chaleur latente de fusion, également de poursuivre le développement de méthodes numériques. Les développements scientifiques de cette thèse visent à modéliser le phénomène de solidification par le biais de modèles réduits. Dès que la discrétisation temporelle et spatiale du modèle devient grand (10 millions de degrés de liberté spatiaux par exemple), les temps de calculs sont prohibitifs (plusieurs jours de calcul). Aussi, la méthode PGD (Proper General Decomposition) qui sera un pilier de cette thèse consiste en une méthode dite "non incrémentale". C'est à dire que nous résolvons tous les degrés de liberté et tous les pas de temps de l'équation en même temps, par séparation de variables et enrichissements modaux. Cela sera détaillé dans un chapitre dédié. Il s'agit avec cette méthode de créer de l'information en recherchant les meilleurs couples (mode spatial, amplitude temporelle) qui répondent à l'équation de la chaleur et aux conditions initiales et limites imposées.

L'industriel nous fournit une base de données matériaux dont les propriétés sont non linéaires en fonction de la température. Nous prendrons en compte cette richesse dans la méthode PGD. La solidification apporte une difficulté supplémentaire : la chaleur latente de fusion. De manière générale, le passage de l'état liquide à l'état solide est un phénomène exothermique. Ce déversement d'énergie dans le système pose des problèmes d'instabilité de la résolution et ajoute un degré de complexité.

En complément du travail présenté ici, des recherches ont été menées pour identifier une suite logiciel qui permet aujourd'hui à l'industriel de pré-traiter, calculer et post-traiter des simulations de remplissage-solidification. Une contribution a été apportée à la modélisation de la non linéarité matériaux sur l'équation de la chaleur dans le logiciel solveur. Ces éléments stratégiques pour l'entreprise ne seront pas détaillés ici.

**Limites** Comme nous le verrons dans la première partie, la théorie de la solidification a été particulièrement investiguée mais présente toujours des zones dont la compréhension reste à améliorer. Elle peut être schématisée sous la forme d'un triangle (Figure 0.1). Nous observons que le processus de solidification est à l'interface de trois grands phénomènes physiques. Il y a tout d'abord un transfert de chaleur qui prend en compte le flux de chaleur, le gradient spatial thermique et le changement de phase. Il est ensuite question du transfert de masse. En considérant un alliage binaire, lors de la solidification, une partie du soluté ne pourra pas se dissoudre complètement dans le solvant déjà solidifié. Ce qui conduira à un phénomène de rejet du soluté en excès dans la phase liquide. Sa concentration augmente alors dans cette phase. Ce transfert de masse est étroitement lié au transfert de chaleur et en particulier à la progression du front de solidification. Ceci nous amène au troisième sommet du triangle : le transfert de fluide, il en résulte un mouvement. Lorsqu'il y a une différence de concentration dans un milieu, il y a en conséquence un mouvement. L'aspect mécanique des fluides va au delà de l'échelle microscopique (mouvements de soluté entre les cristaux déjà solidifiés) et prend en compte le remplissage du moule, la

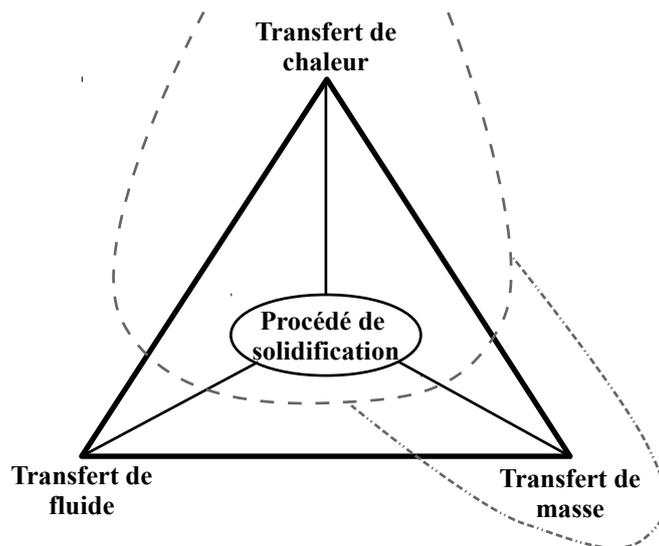


FIGURE 0.1 – Schématisation en triangle du procédé de solidification et des limites de la modélisation entreprise dans cette thèse

manière dont l’alliage liquide comble tous les volumes ainsi que l’effet de la viscosité/écoulement sur la présence de défauts de fonderie.

Dans le cadre de cette thèse, les trois aspects ne pourront pas être abordés. Le sujet est limité à la thermique seule, à l’équation de la chaleur. Néanmoins, des recherches limitrophes au transfert de masse seront abordés à la fin de la première partie et dans la dernière partie, dédiée à une expérimentation. La mécanique des fluides ne sera pas abordée. Ainsi, nous considérerons toujours que le moule est plein et que l’alliage est uniformément à l’état liquide à l’instant initial.

**Le cœur de métier de l’entreprise MONTUPET** Montupet SA est une entreprise fondée en 1894 par Pierre Montupet à Nogent sur Oise en Picardie, France. A l’origine orientée vers les alliages de cuivre, l’entreprise se tourne rapidement vers l’aluminium, qui reste encore aujourd’hui la base des alliages utilisés. Par suite de fusions et d’acquisitions successives, le groupe compte aujourd’hui 2 sites français, ainsi qu’un site espagnol, irlandais du nord, bulgare et mexicain. Le siège social est basé à Clichy.

Le groupe co-conçoit, développe et produit tout un ensemble de pièces moteur pour les plus grands constructeurs automobiles. Ces pièces, comme les culasses sont particulièrement sollicitées thermomécaniquement et sont même considérées comme stratégiques.

La culasse compose la partie supérieure du moteur, placée au dessus des pistons, elle chapeaute le lieu de compression et d’explosion des gaz. En particulier, pour améliorer l’efficacité du moteur, l’arrivée du mélange air et carburant doit être optimisé, ainsi que l’évacuation des gaz brûlés vers l’échappement ou le turbo. Le développement de nouvelles culasses fait donc appel d’une part à l’amélioration de la géométrie des arrivées et échappements, mais aussi à la finesse de leur surface, enfin à la qualité des alliages métallurgiques qui devront subir de fortes contraintes, surtout à haute température.

Une vue éclatée (Figure 0.2) d’un moteur présente les différentes pièces produites chez Montupet. De haut en bas, la culasse est colorée en vert, le bloc moteur en jaune, le collecteur d’échappement en bleu, le carter d’huile en bas en vert, les étriers de frein en jaune et les bras de suspension en bleu clair.

**Organisation du manuscrit** Ce manuscrit s’organise en 4 parties. La première consiste à apporter les bases de la solidification métallurgique. Il s’agit d’un domaine très vaste dont nous esquisserons seulement les contours afin que le lecteur en ait une compréhension générale. La deuxième partie traitera des méthodes numériques, il sera rappelé les méthodes incrémentales, comme la très classique Méthode Eléments Finis (MEF). Il sera également question de réduction de modèles avec la méthode PGD et

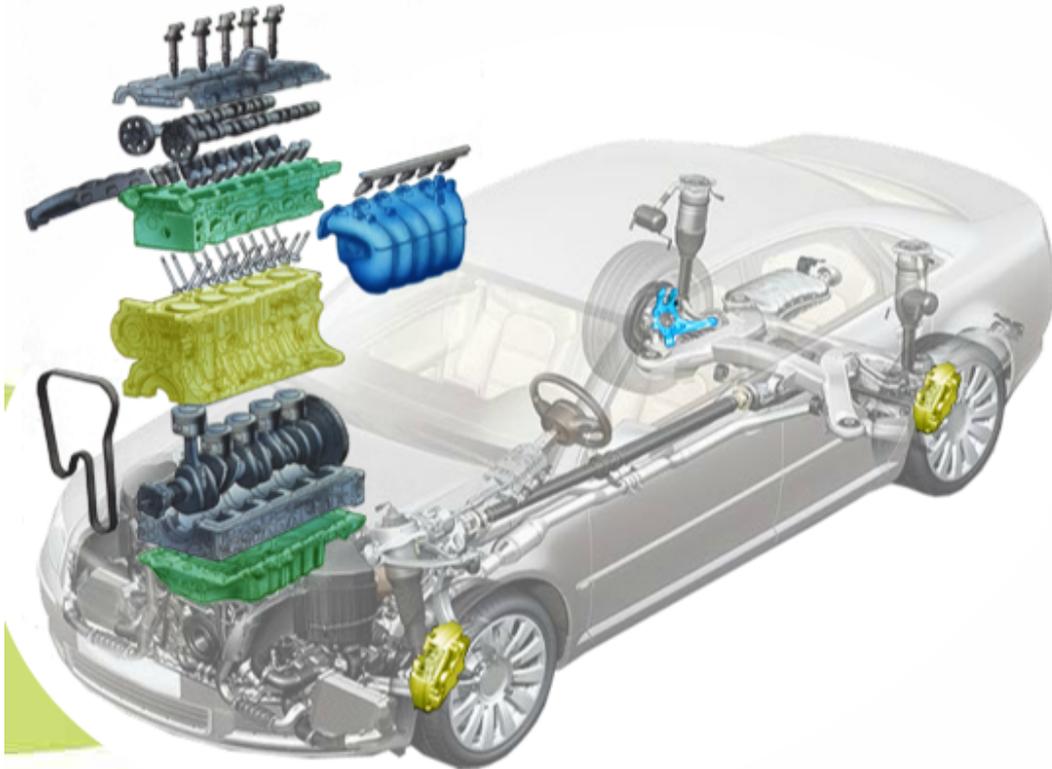


FIGURE 0.2 – Pièces automobiles produites dans le groupe Montupet SA (Source : montupet.fr)

son application aux propriétés matériaux non-linéaires pour la fonderie. La troisième partie s'appuiera également sur les méthodes numériques, de réduction de modèle ou non, et abordera en complément la libération de chaleur latente. Nous serons alors dans le cas du changement de phase qui nous intéresse le plus. Nous appliquerons à chaque fois nos algorithmes numériques sur un modèle 1D avec solution analytique et sur un modèle 2D, issu de l'industrie. Enfin, la dernière partie mettra en lumière une démarche expérimentale entreprise lors d'un séjour aux Etats-Unis à l'université Worcester Polytechnic Institute (WPI), Massachusetts. Il s'agit là de proposer une mesure de la fraction solide en fonction de la température<sup>5</sup> et de mieux comprendre sa sensibilité à la vitesse de refroidissement.

## 1 Métallurgie

Dans le cadre de cette thèse CIFRE, il est important de considérer l'aspect métallurgique et d'avoir une vue globale de ses fondements. Sa bonne compréhension permettra au lecteur de saisir toute la complexité du sujet et surtout de constater l'ensemble des phénomènes sous-jacents à la modélisation macroscopique que nous réalisons dans cette thèse. Il sera tout d'abord abordé les principaux procédés de fonderie actuellement employés dans l'industrie et en particulier le moulage par gravité qui est celui modélisé (partie solidification). Un point thermodynamique sera nécessaire au vu des grandeurs qui seront manipulées par la suite ce qui permettra d'introduire les diverses formulations de l'équation de la chaleur. Nous traiterons du changement de phase liquide-solide qui est précisément le cœur de cette thèse. A cette occasion, nous présenterons les diagrammes de phases binaires ; largement employés en fonderie afin de prévoir la microstructures des alliages mais aussi les températures de changement d'état, ils sont un outil indispensable à la compréhension de la solidification et de la métallurgie. Nous ferons

5. Nous mettrons en avant l'importance de ce paramètre dans la modélisation de la libération de la chaleur latente et donc, du besoin de fiabilité.

ensuite un point sur l'alliage à l'état liquide, à l'état semi-solide (pâteux) et solide. Enfin, nous étudierons les différents modèles de transfert de masse. Ceux-ci sont particulièrement intéressants car ils offrent un modèle analytique de fraction solide. Cette dernière est particulièrement importante et sera abordée en parties 1, 2 et 4 de ce manuscrit car sa dérivée entre dans la modélisation de la libération de la chaleur latente de fusion.

## 1.1 Les procédés de fonderie

Le procédé de fonderie peut se résumer à faire fondre un métal, puis à le verser dans un moule dont la forme permettra l'obtention de la pièce souhaitée. La réalité est infiniment plus complexe et ce manuscrit de thèse mettra certains aspects plus en avant. Il existe de très nombreuses étapes entre la définition client de la pièce souhaitée et sa production effective à des coûts acceptables. Il existe plusieurs manières d'obtenir la forme souhaitée pour une pièce de fonderie. Elles font appel à un spectre de procédés différents variant du remplissage d'un moule depuis un alliage liquide à sa solidification et à la mise en forme sous presse d'un alliage semi-solide... En plus de ceci, un traitement thermique est possible afin d'affiner la structure métallurgique finale.

Le choix du procédé de fonderie dépend de nombreux critères qui permettront au métallurgiste de choisir parmi la variété des procédés. Ces critères sont, entre autres, la facilité de mise en œuvre, la durée de vie du moule souhaitée au regard du coût du procédé, la capacité de stockage du moule, sa tenue à la chaleur, les exigences de cotations, la facilité avec laquelle le moule peut se séparer de la pièce (décochage), la perméabilité pour évacuer les gaz durant la solidification... [Cuenin, 2015].

Quelque soit le procédé retenu au regard des précédents critères, le procédé démarre toujours d'un alliage fondu, maintenu liquide dans un four dit de maintien, avant d'être versé dans le moule. D'un point de vue microscopique, les atomes sont alors libres de se déplacer et en particulier de décanter ou remonter vers la surface dans le four de maintien, ceci en plus de la convection naturelle. Par conséquent, le four de maintien doit subir un brassage régulier permettant de rendre homogène le mélange et de s'assurer de la bonne dissolution des éléments additifs. Un dégazage peut également être effectué à cet instant pour réduire les gaz tels que l'hydrogène dissout dans le métal en fusion [CUENIN, 2015].

Les méthodes décrites ci-après sont particulièrement employées dans l'industrie et présentent un intérêt fort. Il s'agit pour toutes de contenir l'alliage à l'état liquide alors qu'il refroidit et solidifie en lui donnant une forme précise. Dans notre cadre, les culasses sont des pièces hautement stratégiques pour améliorer le rendement du moteur, ceci de part les arrivées d'air et de carburant et les sorties des fumées post-combustion. Ces pièces, très sollicitées thermo-mécaniquement, doivent donc faire l'objet d'une attention particulière lors de leur conception. Le choix du procédé sera important. La courbe de Wöhler (Figure 1.1) présente l'évolution de la contrainte de fatigue en fonction du nombre de cycles pour une même pièce, d'un même matériau, mais conçu avec différents procédés. Nous observons par exemple que le moulage par injection semi-solide fournira une meilleure tenue que le procédé de moulage en sable. [Kirkwood, 1994, Suery, 2015]

La coulée est la manière la plus simple et la plus répandue de créer une pièce de fonderie. Elle était déjà utilisée en Chine il y a plus de cinq millénaires. Elle consiste à remplir un moule d'un alliage en fusion, puis à le laisser solidifier. Il existe plusieurs types de moules qui entraînent différents procédés. Commençons par les procédés dits à moule perdu.

**Moulage sable (à moule perdu)** Le moule en sable (sand casting) est à usage unique. Le sable doit présenter des caractéristiques particulières comme être capable d'épouser parfaitement la forme mère que l'on souhaite reproduire et surtout conserver cette forme en présence de l'alliage liquide. Pour ce faire, il faut prendre garde à la température de fusion du sable lui-même, composé en majorité de Silicium (température de fusion = 1414°C) ce qui limite les alliages ferreux (température de fusion pur = 1538°C), mais pas les alliages à base d'aluminium (température de fusion pur = 660°C). Le moule doit pouvoir se séparer de la pièce facilement et permettre l'échappement des gaz de combustion (propriété de perméabilité). Le sable à base de silice SiO<sub>2</sub> est largement répandu de par ses bonnes propriétés et par son faible coût. Il est sous forme cristalline quartz alpha. Les grains ont une taille comprise entre

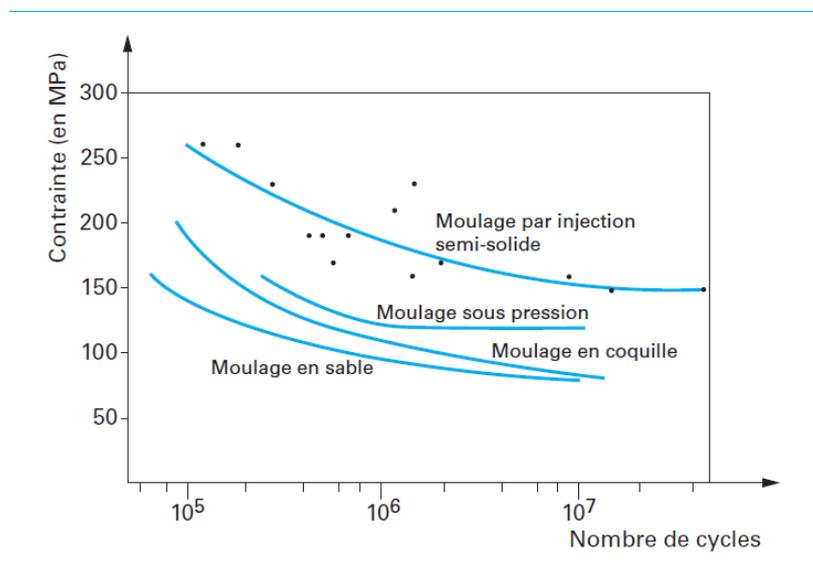


FIGURE 1.1 – Courbe de Wöhler d’une même pièce réalisée pour différents procédés de fonderie (Source : [Suery, 2015])

0.05 et 0.85mm, de forme sphéroïdale, souvent irrégulière de part le procédé de fabrication. La surface spécifique du grain est importante car celle-ci sera en contact avec l’environnement [Jasson, 2015].

Pour obtenir la pièce finale, le moule sera brisé (procédé à moule perdu, décochage). Ce procédé présente l’avantage d’être peu coûteux, même s’il faut autant de moules que de pièces. En outre, le moulage sable ne permet pas d’obtenir des vitesses de refroidissement très élevés, ce qui constitue un inconvénient pour des pièces très sollicitées comme les culasses qui requièrent des microstructures très fines.

La conception du moule sable est une étape à part entière (Figure 1.2). A partir d’une demi-pièce finale, du sable et de la résine sont compactés autour, un catalyseur gazeux est employé pour faire solidifier ce sable. La pièce et le moule sont ensuite séparés, une demi empreinte de moule est créée. Le même processus est employé pour la seconde moitié. Les évidements présents dans la pièce finale sont réalisés à l’aide de noyaux en sable placés dans le moule <sup>6</sup>.

En regard des procédés à moules perdus, il y a les procédés à moules permanents dit ”coquille”. Ces derniers présentent plusieurs avantages par rapport aux coulées à moules perdus : meilleur contrôle de la qualité métallurgique (meilleure vitesse de refroidissement), meilleure propriété mécanique de la pièce, respect rigoureux de la dimension des pièces, avec un état de surface de qualité.

**Moulage par coquille (à moule permanent)** Le moule est réalisé en acier (négatif de la pièce), en plusieurs éléments pour permettre son ouverture et l’extraction de la pièce. Le moule peut être réemployé pour quelque centaines de milliers de pièces. Ce qui compense le coût du moule. Pour atteindre une telle durée, le moule doit être protégé de l’aluminium en fusion par un potéyage (couche de peinture minérale qui peut soit être isolante thermique à base de silicium, soit conductrice de chaleur à base de carbone, cela permet d’orienter en partie les gradients thermiques). Egalement, le moule permanent permet de mettre en place des systèmes de refroidissement avancés qui permettent de guider le flux de chaleur lors du refroidissement et ainsi d’éviter certains défauts. Cela autorise un rythme de production élevé. Lors du

6. [http://www.larousse.fr/encyclopedie/images/Moulage\\_au\\_sable/1001618](http://www.larousse.fr/encyclopedie/images/Moulage_au_sable/1001618), Dessin Alain Vial - Archives Larousse

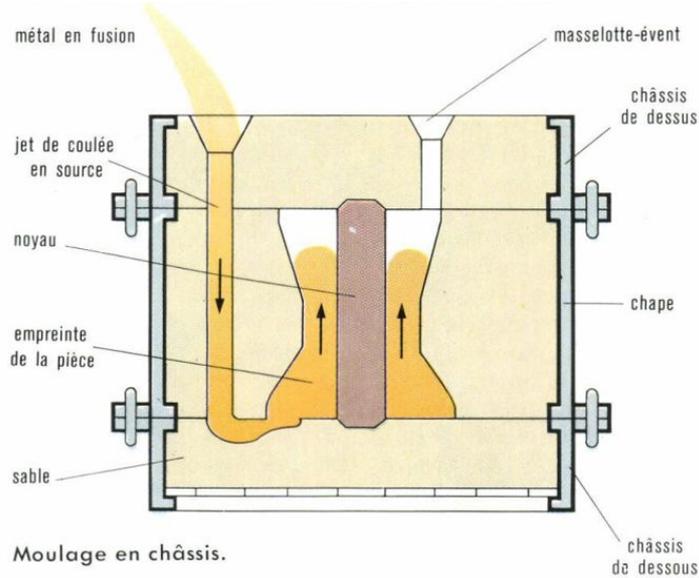
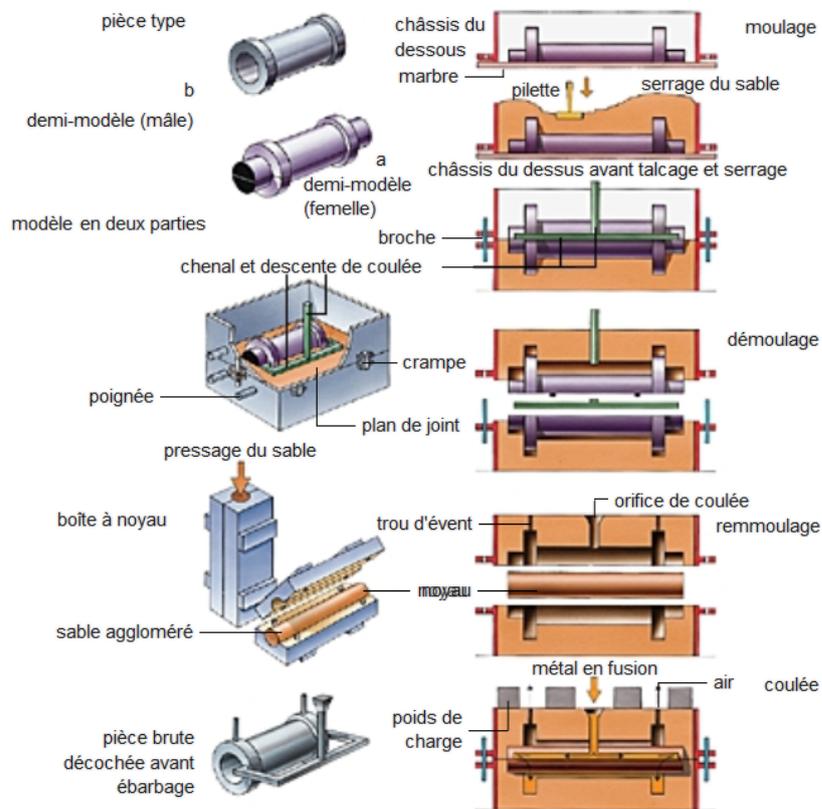


FIGURE 1.2 – Schématisation du procédé de moulage sable (Source : larousse.fr)



FIGURE 1.3 – Exemple de moule et de pièce du procédé de moulage par gravité (Source : fonderie-mrt.fr)

remplissage, il est possible d'utiliser des filtres afin de retirer du liquide les particules en suspension, les oxydes qui se seraient formés en surface mais également pour rendre laminaire l'écoulement d'alliage qui pourrait être turbulent. La surface de la pièce obtenue est de bonne qualité et les fines épaisseurs de l'ordre de quelques millimètres sont réalisables. Le moule est préchauffé afin d'éviter tout choc thermique mais aussi pour faciliter l'écoulement de l'alliage.

Le résultat d'un moulage coquille est présenté (Figure 1.3) et nous pouvons observer l'entonnoir de coulée de forme conique, la descente et la pièce, surmontée de la masselotte<sup>7</sup> [Garat, 2015].

**Coulée gravité et basculée** Le moulage par gravité (gravity casting) est un des procédés les plus répandus dans l'industrie (~40% du volume mondial). Il consiste à verser dans l'entonnoir d'un moule l'alliage liquide. Le moule est rempli jusqu'à la masselotte (de telle manière que l'alliage affleure la face supérieure du moule). Ensuite, l'ensemble refroidit. La pièce est ensuite libérée du moule.

A la différence de ce procédé, la coulée basculée consiste à remplir une empreinte de moule avec pour objectif de faire le moins de turbulences possibles. Pour ce faire, le bassin de remplissage est attenant au moule et l'ensemble pivote progressivement. L'écoulement se fera alors très progressivement, assurant que le fond du moule se solidifie en premier et que le gradient thermique soit bien orienté vers le haut de la pièce. Il est également possible de paramétrer la rotation au cours du temps, afin de tenir compte du volume de certaines parties de la pièce qui nécessiteraient plus d'alliage [Garat, 2015].

**Moulage basse pression** Le moulage basse pression est une autre technique communément utilisée. Un four de maintien est placé sous le moule, un tube relie le moule au four de manière étanche (Figure 1.4). De l'air comprimé est injecté dans le four de maintien au dessus de l'alliage en fusion exerçant une poussée sur le liquide, le faisant monter le long du tube pour rejoindre le moule. La pression permet de paramétrer la vitesse d'arrivée de l'alliage dans le moule. Le liquide arrivant par ce moyen présente l'avantage d'être sans turbulence. La partie inférieure du moule sera la dernière refroidie. La solidification sera alors orientée du haut vers le bas de la pièce. Ce procédé est très automatisé ce qui permet un bon contrôle, il est possible d'avoir plusieurs moules sur un même bâti. Il y a néanmoins quelques désavantages, comme le fait que le tube plongeur, en acier potéyé, tend à se dégrader avec le temps et à enrichir l'alliage en fer (des tubes céramiques existent mais ils sont chers et fragiles). Des pièces complexes peuvent être réalisées par cette méthode. Il faut cependant retenir le coût important de l'investissement

7. <http://www.fonderie-mrt.fr>

de ce procédé [Garat, 2015].

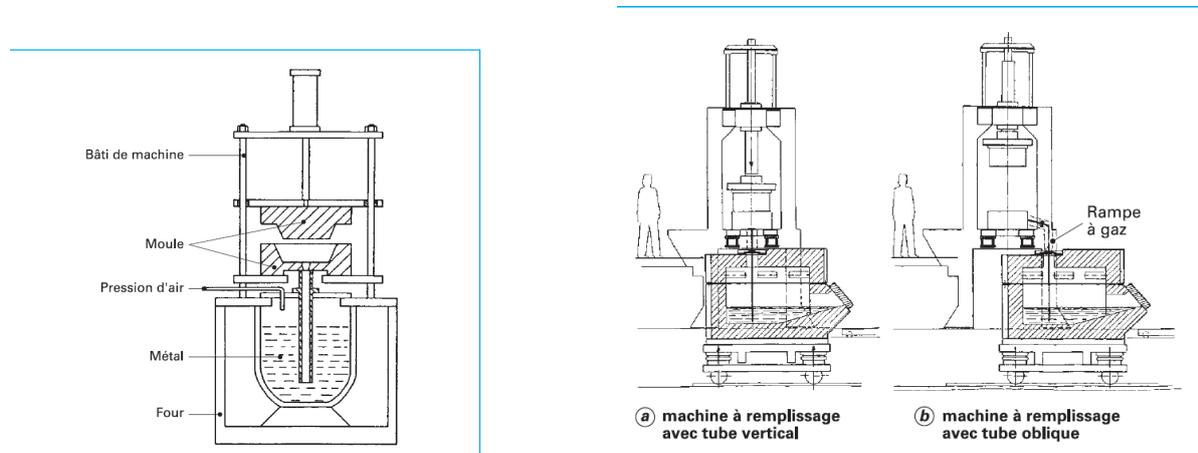


FIGURE 1.4 – Schématisation du procédé de moulage basse pression (Source : [Garat, 2015])

**Moulage à l'état semi-solide** Le "rhéofrage"(obtenu au cours de la solidification) ou thixoformage (refusion partielle) sont deux procédés de moulage à l'état semi-solide qui consistent à brasser un alliage en cours de solidification, de telle sorte à casser les cristaux (dendrites) en cours de formation. Ceci confère à l'alliage, maintenu à une certaine température, une propriété thixotropique<sup>8</sup>. Dans cet état, l'alliage peut alors être soit solidifié en attendant d'être réchauffé (thixoformage) et utilisé comme suit (Figure 1.5) ou alors être directement injecté dans un moule (Voir la partie traitant de l'état semi-solide) [Suery, 2015].

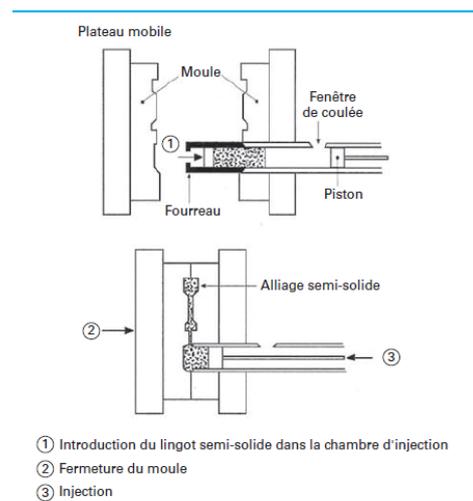


FIGURE 1.5 – Schématisation du procédé semi-solide par injection (Source : [Suery, 2015])

8. La matériau n'a aucune résistance au cisaillement. Ce qui a pour conséquence d'être solide au repos, mais dès qu'une force lui ait appliquée, il devient presque liquide. Cette propriété existe pour le béton (que l'on vibre), ou pour le yaourt nature.

Une alternative consiste à placer cette "gelée" dans un moule de presse. Sous la pression de la fermeture, l'alliage épouse la forme du moule.

On peut noter que ce type de procédé permet d'avoir une structure métallurgique très fine dans la mesure où il y a des amorfes de cristaux très nombreux. La solidification se déroule alors très rapidement.

Une autre alternative consiste à couler l'alliage (comme en moulage par gravité) à une température telle que 20 à 30 % du métal soit solide. Au delà de ce pourcentage, la coulée est presque impossible sans créer de fissures.

Nous venons de brosser rapidement les différents procédés de mise en forme couramment utilisés dans l'industrie et de montrer toute la diversité dont ils font preuve. Dans la suite de cette partie, il sera question du changement de phase et des caractéristiques métallurgiques de l'alliage. Nous verrons que dans le moule, l'alliage liquide subit de nombreuses transformations, son refroidissement peut être enregistré via l'évolution de la température au cours du temps.

Avant cela, il est besoin d'introduire les différentes grandeurs thermodynamiques utiles pour la suite de cette thèse.

## 1.2 Thermodynamique

Les rappels de thermodynamiques évoqués dans ce chapitre introductif permettront une meilleure compréhension des applications évoquées ici dans le cadre de la solidification et de sa modélisation.

L'énergie d'un système fermé, notée  $E$  (Equation 1.1), est la somme d'une énergie mécanique  $E_m$  et d'une énergie interne  $U$ . L'énergie mécanique, elle-même, se décompose en énergie cinétique  $E_c$  et en énergie potentielle  $E_p$ . Ceci de telle manière qu'il est possible d'écrire :

$$E = E_c + E_p + U \quad (1.1)$$

Le premier principe de la thermodynamique postule que cette énergie est conservative, c'est à dire que sa variation  $dE$  est due aux échanges avec l'extérieur sous forme de travail  $\delta W$  et/ou de chaleur  $\delta Q$ .

Dans le cadre de cette thèse, strictement limitée au cas de la thermique de la solidification, nous sommes en mesure de réaliser plusieurs hypothèses simplificatrices. La première consiste en ce qu'il n'y a aucun mouvement, aucun écoulement du système. Seule la modélisation thermique est réalisée (il n'y a pas de mécanique des fluides). Cela implique d'une part que l'énergie cinétique est nulle,  $E_c = 0$  mais également que la variation d'énergie potentielle est nulle :  $dE_p = 0$ . La seconde hypothèse est de considérer la pression constante  $dp = 0$ . En effet, dans le cas du moulage par gravité, le moule est ouvert à l'air extérieur et les conditions atmosphériques sont considérées constantes durant le temps de la solidification (de l'ordre de quelques minutes). La fonderie que nous allons simuler se déroule à l'air libre avec une pression hydrostatique de l'air considérée comme constante. Ainsi, nous pouvons définir une variation d'énergie  $dU$  (Equation 1.2) comme égale à :

$$dU = \delta W + \delta Q \quad (1.2)$$

Par ailleurs, le travail des forces de pression s'exprime comme :  $\delta W = -pdV$ , soit  $dU = -pdV + \delta Q$ .

**Enthalpie** La définition de l'enthalpie  $H$  (exprimée en joules) fait appel aux variables de pression  $p$  et de volume  $V$  (Equation 1.3). Sa différentiation (Equation 1.4), permet de faire apparaître l'influence des variations de pression et de volume dans l'évaluation de l'enthalpie [Dincer and Zamfirescu, 2014, Pelton, 2014, Sonntag et al., 1998].

$$H = U + pV \quad (1.3)$$

$$dH = dU + Vdp + pdV \quad (1.4)$$

Nous avons énoncé comme hypothèse l'absence de variation de pression tel que  $dp = 0$ . Cela implique que le premier principe se résume dans ce cas à :

$$dH = -pdV + \delta Q + pdV = \delta Q \quad (1.5)$$

Si nous exprimons la dérivée temporelle de l'énergie interne, cela fait apparaître le flux de chaleur  $\dot{Q}_e$  (Equation 1.6). Le premier principe se résume alors à :

$$\frac{dH}{dt} = \dot{Q}_e \quad (1.6)$$

**Echanges de chaleur et loi de Fourier** Le terme  $\dot{Q}_e$  de l'équation représente les phénomènes de transfert de chaleur (Equation 1.7). Ceux-ci peuvent être sous forme surfacique sur le bord  $\Gamma$  du domaine  $\Omega$ , (convection) ou encore par rayonnement ou volumique (conduction). Les échanges surfaciques s'expriment comme une intégrale surfacique du flux thermique  $\boldsymbol{\varphi}$  projeté sur la normale  $\mathbf{n}$  du bord étudié.  $\Gamma$  est la surface du domaine  $\Omega$ .

$$\dot{Q}_e \stackrel{\text{hyp}}{=} \int_{\Gamma} \boldsymbol{\varphi} \mathbf{n} dS \quad (1.7)$$

Concernant les échanges volumiques internes, nous pouvons exprimer  $\boldsymbol{\varphi}$ , le vecteur de densité de flux [Germain, 1986], comme proposé par Jean Baptiste Joseph Fourier (1768-1830)<sup>9</sup>. Il considérait que l'on pouvait rendre compte du phénomène de conduction<sup>10</sup> dans un solide isotrope par la formulation (Equation 1.8)<sup>11</sup> [Fourier, 1822, Saint-Blanquet, 2001] :

$$\boldsymbol{\varphi} = -k\nabla(T) \quad (1.8)$$

Le signe négatif peut être interprété comme le fait que pour atteindre un état d'équilibre, le gradient thermique spatial est orienté du chaud vers le froid, en d'autres termes, l'énergie migre des zones chaudes vers les zones froides. Le matériau est alors caractérisé par sa conductivité thermique  $k$ , exprimée en  $Wm^{-1}K^{-1}$ .

A partir des équations précédentes (Equations 1.7 et 1.8) nous pouvons écrire :

$$\dot{Q}_e = \int_{\Gamma} \boldsymbol{\varphi} \mathbf{n} dS = \int_{\Gamma} -k\nabla(T) \mathbf{n} dS \quad (1.9)$$

L'enthalpie volumique  $H$  est définie comme l'intégrale sur le domaine  $\Omega$  de l'enthalpie massique  $h$  ( $J.kg^{-1}$ ) multipliée par la masse volumique ( $kg.m^{-3}$ ) (Equation 1.10).

$$H \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\Omega} \rho h dV \quad (1.10)$$

Or d'après l'équation de la chaleur (Equation 1.6) , le théorème des flux-divergence de Green-Ostrogradsky, le principe de conservation de la masse évoqué plus loin (Equation 1.12), ainsi que le

9. Il est également à l'origine de la célèbre transformée qui porte son nom. Attention à ne pas confondre avec Charles Fourier (1772-1837) qui fut un de ses contemporains, philosophe français. Le terme fourrier avec deux "r" fait référence à un soldat du Premier Empire dédié "aux écritures de la compagnie" [Rolland, 2000]. Il est amusant de constater que même Raoul Dufy (1877-1953), artiste peintre ait fait l'erreur dans son œuvre "La fée électricité". Cette œuvre fut commandée par la compagnie parisienne de distribution d'électricité à l'occasion de l'exposition universelle de 1937, et Joseph Fourier se trouve représenté parmi plus de cent scientifiques ayant contribué aux recherches sur l'électricité.[Dufy, 1937]

10. Une analogie peut être réalisée entre la loi de Fourier et la loi de Fick dédiée à la diffusion de la matière, de même qu'avec la loi de Ohm relative au déplacement et à la vitesse électronique en courant continu.

11. Notons que d'un point de vue microscopie, ce flux dépend du gradient de la température modulé par un coefficient qui est fonction de la vitesse d'agitation ainsi que du parcours des atomes .

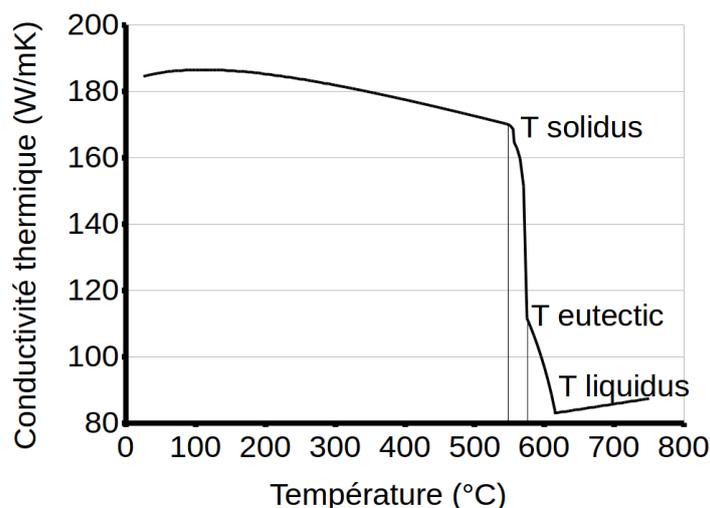


FIGURE 1.6 – Conductivité thermique  $k$  en fonction de la température  $T$  pour un alliage AlSi7Mg (Source : JMatPro)

lien entre l'enthalpie et l'enthalpie massique (Equation 1.10) nous pouvons transformer l'intégrale surfacique (flux) en intégrale volumique (divergence). Cela permet d'exprimer la relation connue, appelée équation mixte de la chaleur, de conservation de l'énergie locale (Equation 1.11) :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot (-k \nabla(T)) \quad (1.11)$$

Cette expression sera le point de départ de la partie suivante.

La conductivité thermique représente la capacité d'un matériau à conduire la chaleur. Il s'agit du transport d'énergie via la vibration/oscillation des atomes/réseau cristallin<sup>12</sup> présents dans l'alliage. La conductivité thermique dépend de l'élément chimique en présence ( $k_{Cu} > k_{Al} > k_{Fe}$ )<sup>13</sup>, de sa phase ( $k_{solide} > k_{liquide} > k_{gaz}$ ), mais également de sa structure cristalline elle-même ( $k_{cristal} > k_{amorphe}$ ).

Dans cette thèse, nous emploierons un alliage comme application. Il s'agit de l'alliage d'aluminium Silicium AlSi7Mg qui présente 7% de Si, 1% de Mg, entre autres éléments et plus de 91% d'Al.

Sa conductivité thermique est présentée ci-après en fonction de la température (Figure 1.6). Les propriétés matériaux présentés dans ce manuscrit proviennent du logiciel de thermodynamique JMatPro ([JMatPro, 2014]).

Nous pouvons noter immédiatement la forte non linéarité de cette propriété, en particulier dans la zone de changement de phase (entre les températures de liquidus et de solidus, voir ci après les courbes de refroidissement). La conductivité thermique décroît globalement avec l'augmentation de la température.

**Masse volumique et principe de conservation de la masse** A propos de la densité, nous pouvons de même tracer son évolution pour un alliage AlSi7Mg [JMatPro, 2014] (Figure 1.7).

La masse volumique  $\rho$  exprimée en  $kg.m^{-3}$  représente la masse par unité de volume. Pour les métaux, la masse volumique augmente (Figure 1.7) lorsque la température baisse. Ce qui se traduit par une contraction volumique du matériau lors du refroidissement ou au contraire une dilatation lorsqu'il est chauffé. Il existe trois exceptions connues : l'eau, le Polonium-Gallium et le Silicium [Greenwood, 1963, Yaws, 2014]. Ceci produira des défauts dans les pièces appelées retassures.

12. Appelé phonon. [Vuillermoz, 1993]

13. Les métaux sont de bons conducteurs thermiques car en plus d'être en réseau à l'état solide (et donc de vibrer), ils ont un nuage électronique de valence riche, qui permet aux électrons d'être libérées et de conduire ainsi la chaleur. Le même phénomène est à l'origine de la conductivité électrique. [Aksoz et al., 2010]

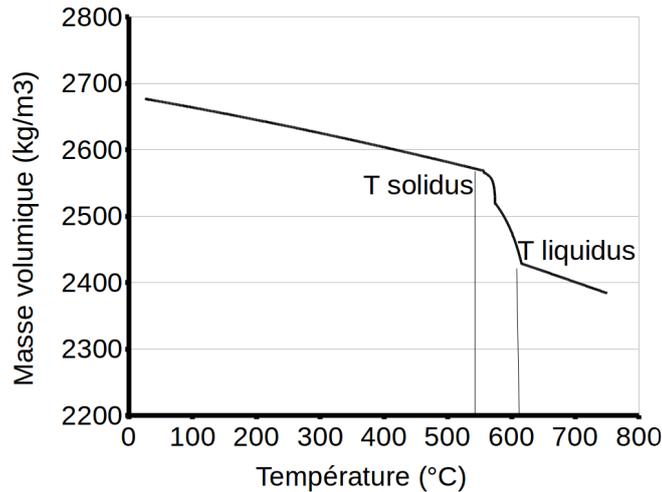


FIGURE 1.7 – Evolution de la masse volumique en fonction de la température pour un alliage de type AlSi7Mg (Source : JMatPro)

Il faut toutefois justifier ici une limite forte que nous avons introduite précédemment : dans cette thèse, nous considérerons la masse volumique comme constante. Nous y sommes contraints par le principe de conservation de la masse (Equation 1.12) avec l'hypothèse de mouvement nul,  $\mathbf{U} = 0$ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{U} \quad (1.12)$$

Pour aller plus loin, il nous faudrait mettre en place les équations de la mécanique des fluides et en particulier celles de Navier-Stokes.

En terme de valeur de la masse volumique constante, nous avons choisi  $\rho = 2675 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  pour un alliage AlSi7Mg (Figure 1.7). Il s'agit là de sa valeur à température ambiante d'après le logiciel<sup>14</sup>.

### 1.3 La transformation liquide-solide

Le changement de phase est le principe de base de la métallurgie : passage de l'alliage à l'état liquide pour être coulé puis solidification. Nous allons ici développer les aspects de chaleur latente, de changement de phase, les courbes de refroidissement, la germination de la phase solide et la manière dont elle croit.

#### 1.3.1 Courbe de refroidissement

Un exemple très simple de courbe de refroidissement est celle de l'eau, considérée comme un corps pur. Si l'on trace l'évolution de la température (Figure 1.8), au delà de 100°C jusqu'à des températures négatives, nous pouvons observer deux paliers horizontaux. Le premier matérialise la libération de la chaleur latente de condensation, le second, la libération de la chaleur latente de fusion. Lorsque la température atteint l'un de ces paliers, il y a coexistence de deux phases. Dans le premier cas, phase gazeuse et liquide, dans le second cas phase liquide et solide. En A se forme la première goutte liquide, en B tout est liquide, en C se forme le premier cristal et en D tout est solide.

Dans le cas de la métallurgie, des thermocouples sont placés dans le moule et/ou dans la pièce, afin d'enregistrer la température locale. A titre d'exemple, le diagramme (Figure 1.9) présente le refroidissement d'un échantillon d'alliage d'aluminium AlSi7Mg. Depuis une température élevée, l'alliage est à l'état liquide, jusqu'à une température faible où l'alliage est à l'état solide.

14. Pour information, sa valeur couramment utilisée est de  $2698 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  [#Haynes2012], il s'agit de la valeur maximum de la masse volumique, communément associée à l'aluminium.

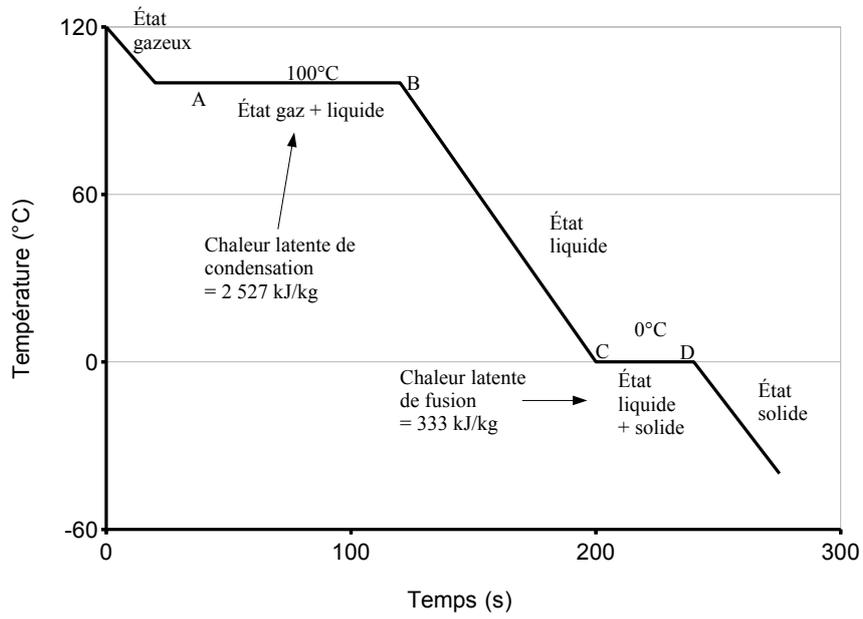


FIGURE 1.8 – Schématisation de la courbe de refroidissement de l'eau

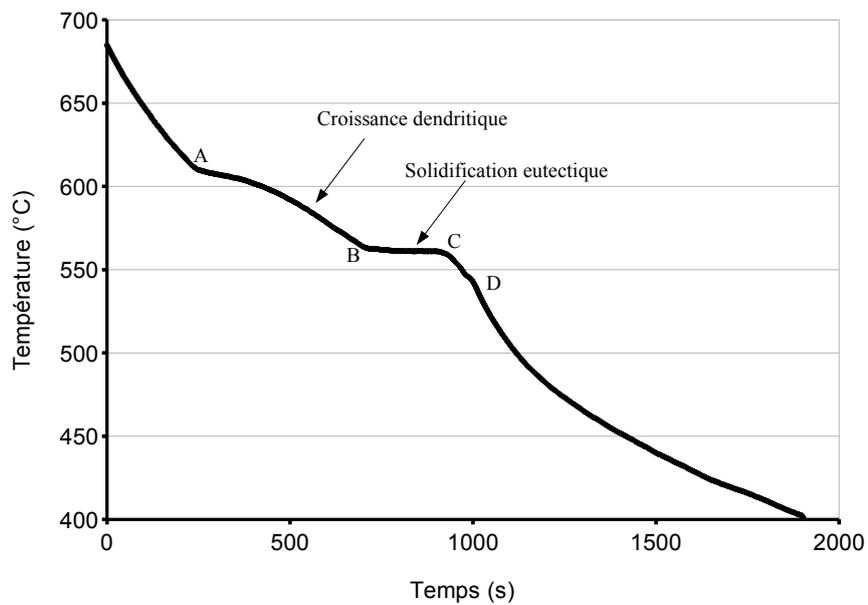


FIGURE 1.9 – Courbe de refroidissement d'un alliage AlSi7Mg (Source : P. Despret)

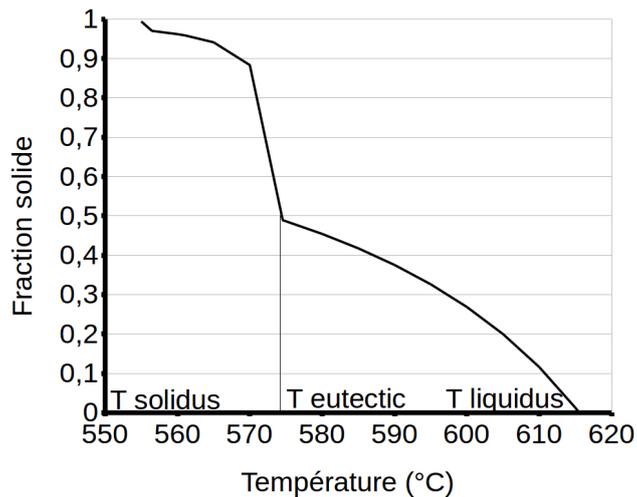


FIGURE 1.10 – Evolution de la fraction solide en fonction de la température pour un alliage de type AlSi7Mg (Source : JMatPro)

Nous pouvons constater qu’il y a plusieurs points d’inflexion et un palier horizontal. Ceux-ci correspondent à des événements particuliers lors de la solidification de l’alliage. Lorsque l’alliage atteint 615°C (point A) (température appelée ”liquidus”), les premiers cristaux d’aluminium, appelés dendrites, se forment. Ceci jusqu’à la température 570°C (point B). A partir de ce point, la majorité des cristaux sont formés et il se produit une réaction de solidification eutectique qui est isotherme (à la température dite ”eutectique”). Nous simplifierons ici, en définissant la phase eutectique comme ce qui reste encore liquide à la température B, tout le reste ayant déjà solidifié. Le plateau B-C consiste en une réaction isotherme de solidification de la phase eutectique. Entre 570°C et 545°C (points C et D), l’alliage termine de se solidifier. La température du point D est appelée température de solidus (tout est solide). Au delà de cette température, le solide refroidit jusqu’à température ambiante. Les phénomènes de surfusion (descente de la température puis remontée rapide au changement de phase) ne semblent pas visibles sur cette courbe. Il se peut qu’ils ne se soient pas produits (extraction de chaleur suffisamment rapide par exemple), il faudrait étudier la dérivée de cette courbe pour les voir apparaître.

Nous allons voir que la transformation se caractérise par l’enthalpie. Celle-ci est fonction de plusieurs propriétés matériaux qui sont la fraction solide, la chaleur latente, le capacité calorifique. Nous allons les détailler immédiatement.

### 1.3.2 Fraction solide

La fraction solide  $f_s$  (Figure 1.10) est une propriété matériau comprise entre 0 et 1 et qui traduit pour un volume élémentaire donné le ratio de phase solide  $f_s$  par rapport à la somme des phases liquide  $f_l$  et solide. Par définition :  $f_s + f_l = 1$ . La fraction solide est une sorte de potentiomètre qui ”pilote” la libération de la chaleur latente. Lors du refroidissement, lorsque  $f_s = 0$  la chaleur latente n’est pas encore libérée, lorsque  $f_s = 1$  toute la chaleur latente est libérée.

L’observation rapide de cette figure montre un saut de fraction solide à la température eutectique, à la suite de quoi la fraction solide rejoint la valeur de 1.

### 1.3.3 Chaleur latente

Le changement de phase consiste en un réarrangement atomique entre deux états de la matière. Il existe différents états (solide, liquide, gazeux et plasma)<sup>15</sup>. Ils sont caractérisés par des propriétés matériaux différentes mais également par la nécessité de gagner ou perdre une certaine quantité d’énergie

15. Il ne sera pas traité ici ni la phase gazeux, ni plasma.

pour passer d'un état à un autre. Cette énergie est appelée chaleur latente. Dans notre cas, nous détaillerons beaucoup plus la chaleur latente de fusion (notée  $L_f$ , exprimée en  $J.kg^{-1}$ ) qui est gagnée ou perdue selon qu'il y ait solidification ou fusion. Lorsque cette énergie est diffusée dans le milieu (en cas de solidification),  $L_f$  est compté négativement, lors de la fusion  $L_f$  est positif car le milieu a besoin de gagner de l'énergie<sup>16</sup>.

Si nous exprimons ce changement via les considérations thermodynamiques appliquées à un corps pur (Figure 1.12), alors à la température de fusion  $T_f$ , nous pouvons exprimer la variation d'énergie interne et donc d'enthalpie comme :  $\Delta H = H_l(T_f) - H_s(T_f)$ . Où  $H_l$  et  $H_s$  sont les enthalpies du corps purs aux états liquide et solide.

Par ailleurs, même si nous n'avons pas considéré une variation de volume nulle au cours de la transformation, il aurait pu être démontré que l'énergie due à cette variation est négligeable face à la variation d'énergie interne (5 ordres de grandeur de différence) [Glicksman, 2010].

### 1.3.4 Capacité calorifique

A pression constante, l'état de la matière est totalement défini par la température. Ainsi l'enthalpie dépend uniquement de la température. On définit alors l'enthalpie massique  $\tilde{h}$ , fonction de la température, comme :

$$\tilde{h}(T(x, t)) = h(x, t)$$

avec 
$$\begin{matrix} \tilde{h} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ T \rightarrow \tilde{h}(T) \end{matrix} .$$

La température étant la seule variable d'état, la différentielle totale exacte de  $\tilde{h}$  s'écrit :

$$d\tilde{h} = \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial T} \right)_p dT \quad (1.13)$$

Par conséquent la fonction enthalpie peut s'exprimer comme :

$$\tilde{h}(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p(\theta) d\theta$$

avec la capacité calorifique définie comme :

$$c_p = \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial T} \right)_p \quad (1.14)$$

La capacité calorifique  $c_p$ , exprimée en  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ , illustre la capacité de stockage d'énergie sous forme de chaleur dans la matière. Elle peut se concevoir comme l'énergie qu'il est nécessaire de fournir au système pour faire monter de 1 degré Kelvin une masse de 1 kilogramme, à pression constante<sup>17</sup>.

La dépendance de la capacité calorifique  $c_p$  à la température de l'alliage que nous allons employer AlSi7Mg est présentée ci-dessous (Figure 1.11). Nous pouvons observer une quasi stabilité au dessus du liquidus et une croissance assez linéaire au dessous de cette température.

Il est important ici de noter que nous avons tronqué les valeurs de la capacité calorifique sur l'intervalle de solidification. En effet, le logiciel JMatPro fournit une capacité calorifique qui inclus le changement de phase, appelée capacité calorifique apparente et présentée plus loin en partie 3.

A ce point, nous pouvons introduire la relation de comportement entre la température et l'enthalpie.

16. Autrement dit, on compte positivement l'énergie reçue par le système et négativement celle fournie au système. Il s'agit d'une convention de signe appelée : règle du porte-monnaie.

17. Le fait que la pression soit constante est une approximation très acceptable dans la mesure où nos simulations et expériences sont considérées se dérouler à l'air libre (moulage par gravité). Ceci d'autant plus que les travaux suivants [Chapman, 1984, Eyring, 1941, Hirschfelder et al., 1954] montrent que la dépendance à la pression n'intervient, qu'à des pressions extrêmes pour les liquides et les solides.

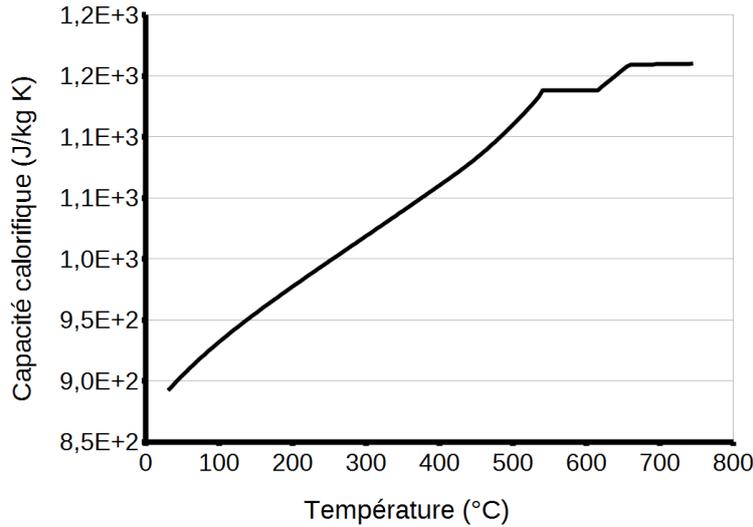


FIGURE 1.11 – Capacité calorifique en fonction de la température pour un alliage AlSi7Mg (Source : JMatPro)

### 1.3.5 L'enthalpie

La définition de l'enthalpie peut être décomposée en trois morceaux : avant la solidification, pendant le changement de phase et après la solidification. Aussi, pour chaque intervalle nous pouvons écrire :

$$\tilde{h}(T) = \begin{cases} \text{Pour } T < T_{sol} & \int_{T_{ref}}^T c_p(\theta) d\theta \\ \text{Pour } T_{sol} < T < T_{liq} & \int_{T_{ref}}^T c_p(\theta) d\theta + L_f(1 - f_s(T)) \\ \text{Pour } T > T_{sol} & \int_{T_{ref}}^T c_p(\theta) d\theta + L_f \end{cases} \quad (1.15)$$

La troisième équation (Equation 1.15) définit la chaleur latente comme le saut d'enthalpie sur l'intervalle de solidification. La différentielle des équations 1 ou 3 (Equation 1.15) permet de retrouver la définition de la chaleur spécifique déjà énoncée (Equation 1.14). Enfin, la seconde équation définit l'évolution de la libération d'énergie (chaleur latente) au cours de l'intervalle de solidification au moyen de  $f_s$  (ce qui est la spécificité des alliages par rapport aux corps purs).

Si nous différencions la fonction enthalpie par rapport à la température sur cet intervalle de solidification, nous obtenons alors :

$$d\tilde{h} = c_p dT - L_f df_s \quad (1.16)$$

Après intégration entre un état de référence à la température  $T_{ref}$  et une température  $T$ , une formulation généralisée de l'équation précédente (Equation 1.15) peut être exprimée comme :

$$\tilde{h}(T) = \int_{T_{ref}}^T c_p(\tau) d\tau + L_f(1 - f_s(T)) \quad (1.17)$$

A titre d'exemple, les figures ci dessous présentent à gauche l'enthalpie pour un corps pur et à droite l'enthalpie de l'alliage AlSiMg. La valeur de la chaleur latente pour l'AlSi7Mg est de  $431000 \text{ J.kg}^{-1}$ . Connaissant  $f_s(T)$  (Figure 1.10), on peut constater que la libération de la chaleur latente est fortement non linéaire en l'intervalle de solidification.

A présent, si nous substituons dans l'équation mixte de la chaleur (Equation 1.11) l'expression de l'enthalpie en fonction de la température et de la fraction solide (Equation 1.16) nous pouvons exprimer

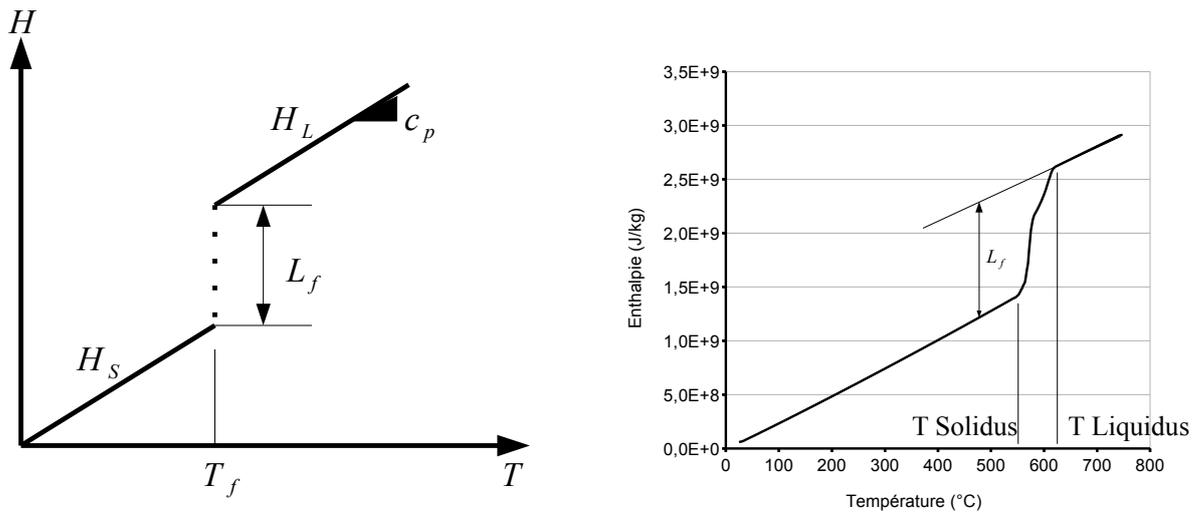


FIGURE 1.12 – Présentation de l’enthalpie pour un corps pur (à gauche) et d’un alliage (à droite) en fonction de la température (Source : [Glicksman, 2010])

l’équation de la chaleur en température uniquement comme suit :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (-k \nabla(T)) + \rho L_f \frac{df_s}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.18)$$

Le terme  $\rho L_f \frac{df_s}{dT} \frac{\partial T}{\partial t}$  peut être interprété comme la source de chaleur issue de la chaleur latente. Nous pouvons noter que ce sera la dérivée de la fraction solide qui réglera la libération de la chaleur latente de fusion. L’équation sans terme source sera détaillée en partie 2 de ce manuscrit alors que la même équation avec terme source sera afférente à la partie 3.

## 1.4 Le diagramme de phase binaire

Dans la métallurgie, les corps purs sont assez peu utilisés. En effet, ils présentent souvent de mauvaises propriétés de fonderie (coulabilité, présence d’impuretés non maîtrisées, absorption de gaz), mais également des propriétés mécaniques faibles (résistance à la traction, dureté)<sup>18</sup>.

Un alliage résulte d’un choix précis d’éléments et de leurs proportions. Ainsi, le fondeur peut obtenir des propriétés mécaniques précises, la température de fusion souhaitée et anticiper les résultats des traitements thermiques [Balanche, 1980].

Le diagramme de phase est utile pour connaître à une température donnée la composition de la phase solide et celle de la phase liquide. Egalement, le diagramme permet d’anticiper des changements de volume lors de la diminution en température. Certains métaux ont un haut point de fusion séparément, mais placés ensemble, ce point de fusion diminue fortement. Enfin, il sera possible de savoir quels types de réactions ont lieu dans l’alliage (croissance de telle phase, rejet de soluté).

### 1.4.1 Diagramme de phase Binaire

Un diagramme de phase est une représentation - température en fonction de la composition - pour un ensemble d’alliages utilisant les mêmes métaux mais dans des quantités différentes. Il est établi sur la base des courbes de refroidissement. La manière de procéder est simple. Il suffit d’enregistrer la courbe de refroidissement, depuis un état liquide vers un état solide, pour plusieurs alliages et de placer les températures de liquidus et solidus. A chaque composition correspond une courbe température en fonction du temps [Mercier et al., 1999].

18. Ils sont néanmoins utilisés dans l’industrie lorsqu’une propriété est particulièrement recherchée.

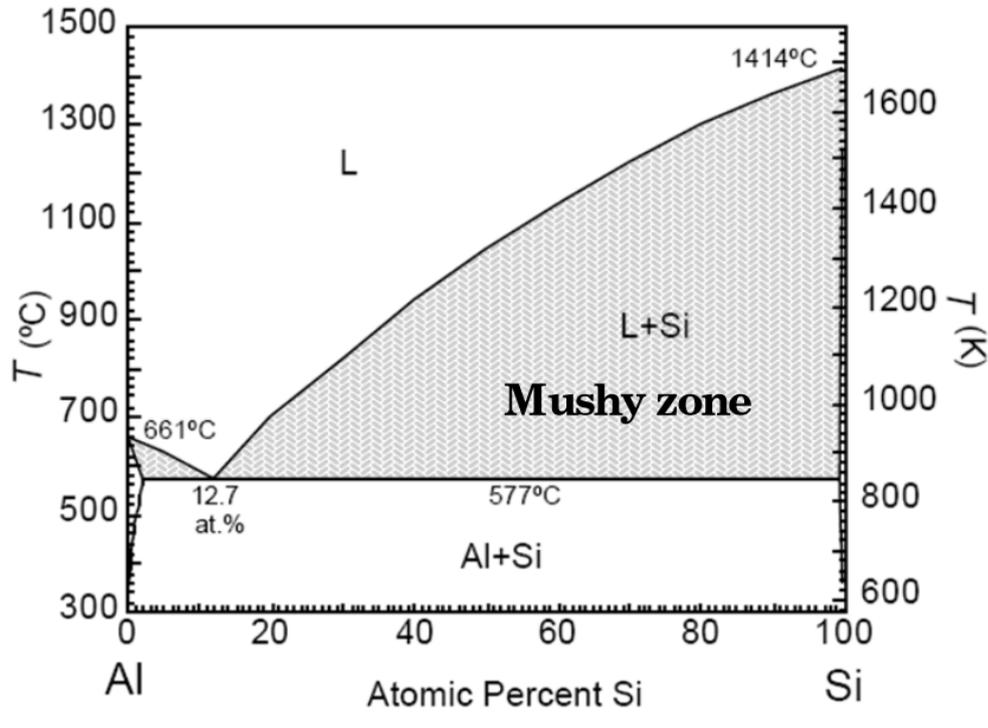


FIGURE 1.13 – Diagramme de phase Al-Si (Source : [S. M. H. Mirbagheri and Firoozi, 2011])

En observant le diagramme de phase Al-Si complet, ci-dessous (Figure 1.13 et 1.14), nous pouvons observer les températures de fusion de l'aluminium pur et du silicium pur (respectivement 660°C et 1414°C). Egalement, nous constatons que ce diagramme est découpé en plusieurs parties et qu'il y a différentes structures ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) qui se forment.

En tout premier lieu, il paraît importante de tracer correctement le diagramme de phase (Figure 1.13). [S. M. H. Mirbagheri and Firoozi, 2011]

Ce diagramme (Figure 1.13) permet de mettre en relief le fait que les liquidus ne sont pas des droites, de montrer que dans le cas des alliages hypoeutectiques, une faible quantité de silicium est ajoutée et que la température de fusion du silicium est vraiment élevée comparée à celle de l'aluminium. Néanmoins, pour faciliter nos explications et pour plus de lisibilité, nous allons schématiser le précédent diagramme (Figure 1.13) comme celui-ci dessous (Figure 1.14).

Nous avons évoqué précédemment la température de liquidus comme étant la température à laquelle se forme le premier cristal solide lors du refroidissement. Nous constatons ici que cette température varie en fonction de la concentration de Si dans l'alliage. Par opposition, dans la partie inférieure, à basse température, tout est solide et l'aluminium est sous une forme microstructurale dendritique  $\alpha$ , alors que le silicium est sous une forme quartz  $\beta$ . Enfin, nous constatons qu'il y a une ligne horizontale à  $T = 577^\circ\text{C}$ , il s'agit de l'eutectique. Ce point sera abordé très prochainement.

Les deux graphes suivants (Figure 1.15) présentent un refroidissement, pour d'une part une composition initiale inférieure à la limite de solubilité du silicium dans l'aluminium (Figure 1.15 a) et d'autre part pour une composition initiale inférieure à la composition eutectique (Figure 1.15 b).

**Alliage hypoeutectique ( $1,65 \leq \% \text{Si} < 12,7\%$ )** Pour aller plus loin dans notre étude, agrandissons la partie hypoeutectique ( $\% \text{Si} < 12,7\%$ ) (Figure 1.15b). Celle-ci est traitée en premier car c'est précisément celle qui nous concernera car la plus utilisée pour les moulages de pièces automobiles.

Sur cet agrandissement, nous distinguons quatre parties. La première à température supérieure à celle du liquidus a déjà été traitée, de même que la seconde pour une température inférieure à la température eutectique. Concentrons nous sur le grand triangle central. Soit un alliage de concentration initiale  $C_0$

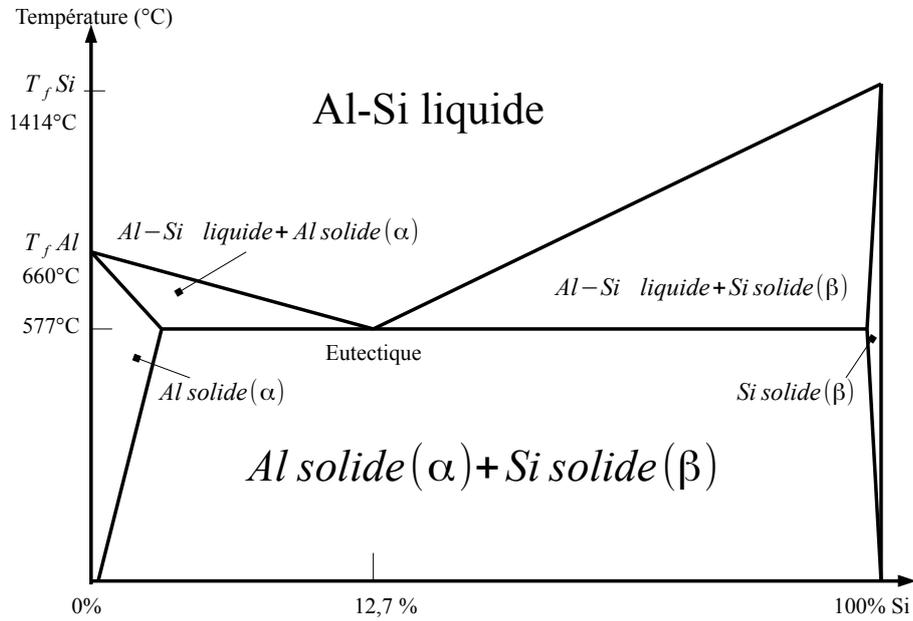
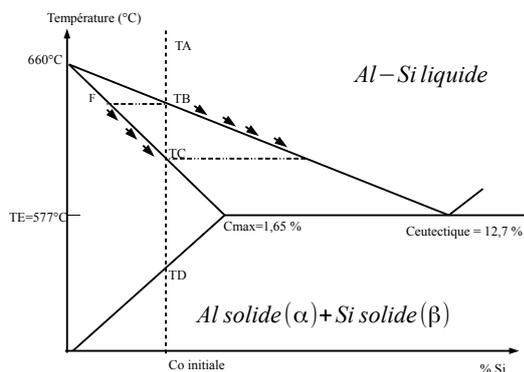
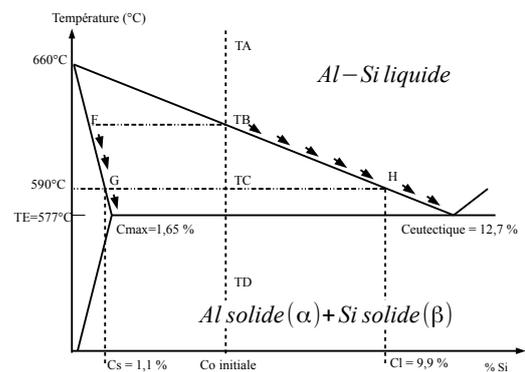


FIGURE 1.14 – Schématisation du diagramme de phase binaire Al-Si



(a) Diagramme de phase pour un alliage très faiblement allié



(b) Diagramme de phase pour un alliage hypoeutectique

FIGURE 1.15 – Agrandissement du diagramme de phases binaires Al-Si

et de température  $T_A$ . Lorsque la température diminue de  $T_A$  à  $T_B^+$ , rien ne se passe, l'énergie libre du liquide est inférieure à celle du solide. Lorsque l'alliage atteint la température  $T_B$ , alors la première nucléation de la phase  $\alpha$  se produit, les premiers cristaux apparaissent et ont une concentration  $C_F < C_{m\alpha x}$ . La concentration  $C_{m\alpha x} = 1,65\%$  représente le maximum de solubilité de Si dans la phase Al solide ( $\alpha$ ). C'est à dire qu'au delà de cette concentration, le Si restant est rejeté et devra se solidifier sous forme d'eutectique. Au plus il y aura de phases  $\alpha$  solidifiées et au plus la concentration de Si dans la phase liquide restante augmente, ceci est matérialisé par les flèches, le long du liquidus et du solidus. C'est pourquoi, au cours du refroidissement, la concentration en Si de la phase solide  $\alpha$  va augmenter, jusqu'à atteindre  $C_{m\alpha x}$  et la concentration en Si dans la phase liquide restante va également augmenter jusqu'à atteindre la concentration dite eutectique.

Le diagramme de phase permet de prévoir qu'à la température  $T_C$ , la concentration en Si dans la phase solide sera de 1,1% et dans la phase liquide de 9,9%.

La température continue de descendre pour atteindre  $T_E$ , la température eutectique. Cette température est particulière car la concentration en Si dans la phase solide a atteint son maximum et la concentration dans la phase liquide a atteint la concentration eutectique (12,7% Si). La phase liquide restante est alors appelée la phase eutectique. Elle présente la caractéristique de solidifier à température constante égale à 577°C. Nous étudions le refroidissement d'un alliage à 7% de Si (Figure 1.9), nous sommes bien dans le cadre décrit ici. Nous observons tout d'abord la croissance dendritique (croissance de la phase  $\alpha$ ), puis un palier horizontal qui est le palier eutectique (solidification à température constante).

Dans le cas d'un alliage présentant 12,7% de Si, il sera appelé alliage eutectique et il solidifiera à température eutectique, de la même manière qu'un corps pur.

**Alliage faiblement allié (%Si < 1,65%)** Pour bien comprendre ce cas, il nous faut agrandir une fois de plus la partie gauche du diagramme (Figure 1.15a). Nous nous trouvons maintenant dans le cas d'un alliage dont la composition initiale est inférieure à la limite de solubilité de Si dans Al  $\alpha$ .

De la même manière que précédemment, nous nous plaçons à  $T_A$  pour un refroidissement jusque  $T_B^+$ , rien ne se passe. A  $T_B$ , le premier cristal  $\alpha$  se forme et sa composition est inférieure à la composition initiale. De part cette formation, la concentration en Si dans la phase liquide augmente. Ceci jusqu'à atteindre la température de solidus (qui est supérieure à la température eutectique). La phase solide n'atteint jamais le maximum de solubilité et la phase liquide n'atteint jamais l'eutectique. Si nous faisons le parallèle avec la courbe refroidissement de l'alliage (Figure 1.9), nous pouvons dire que la croissance dendritique est la même mais qu'il n'y a pas de palier eutectique. La température continue de décroître, la transition de phase est terminée.

La notion de transformation de l'état solide à l'état liquide a été abordée, d'un point de vue microscopique via l'aspect atomique et macroscopique via les diagrammes de phase. Il paraît intéressant dans la suite de ce manuscrit de s'intéresser plus en détail à chacune des phases : liquide, pâteuse et solide. Chacune présentent des caractéristiques importantes qui auront leur influence lors de la solidification.

## 1.5 L'état semi-solide et solide

L'état semi solide a été évoqué à propos du moulage des alliages dans cet état particulier, non liquide et pas encore solide. Si nous revenons au diagramme de phase (Figure 1.14), nous observons que dès qu'il y a alliage binaire, cet état intermédiaire entre liquidus et solidus existe, sauf précisément à la composition eutectique. Nous savons que le passage de l'état liquide à solide demande du temps, il n'est pas immédiat (Figure 1.9). Nous savons que par définition à la température liquidus, le premier cristal se forme et à la température solidus la dernière goutte encore liquide disparaît. Il semble important d'aller un pas plus loin dans cette compréhension en développant les caractéristiques de la zone pâteuse (durée de l'intervalle de solidification et longueur des dendrites).

Le TLS est défini comme la durée de solidification (Figure 1.16) entre la température liquidus et la température eutectique (durée entre le point A et B de la courbe de refroidissement (Figure 1.9) soit environ 500s dans cet exemple). Il s'agit du temps que met un volume pour passer de l'état liquide à

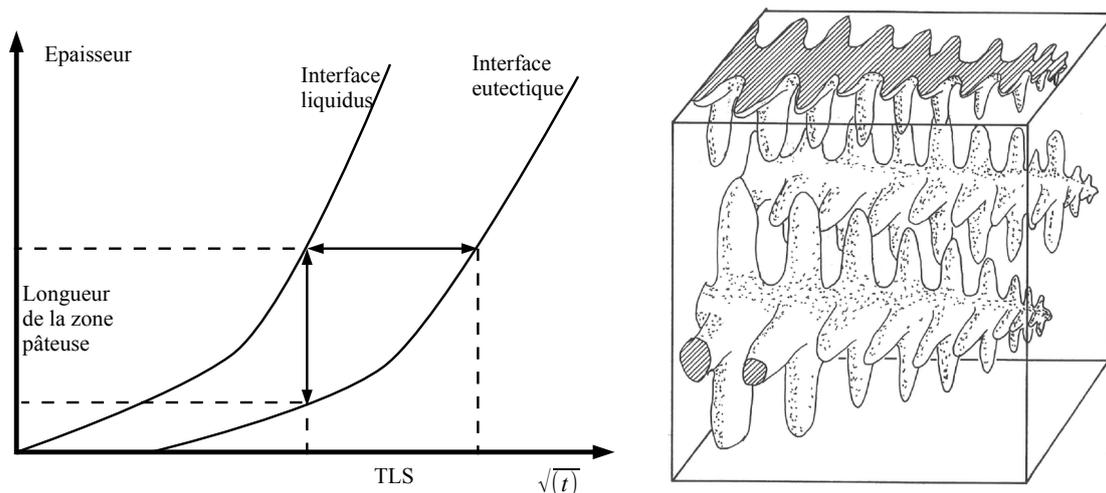


FIGURE 1.16 – Dimension de la zone pâteuse en fonction de la racine de la vitesse de progression du front de solidification (à gauche) Schématisation de dendrites dans la zone pâteuse (à droite) (Source : DR)

la fin de la croissance dendritique. Sur le diagramme ci-dessous, les deux interfaces liquide/pâteux et pâteux/eutectique ont été tracées pour un volume donné. Ce temps dépend de la géométrie de la pièce et des conditions aux limites. S'il y a des zones refroidies très rapidement, le TLS sera très court et inversement. La taille de la zone pâteuse (Figures 1.16 et 1.16) est fonction de la géométrie, de l'alliage ainsi que des conditions aux limites.

[Flemings, 1974, Mizikar, 1967, Adenis and D.V.Ragone, 1962]

Si maintenant, nous regardons cette zone pâteuse de plus près, à savoir à l'échelle microscopique, nous observerons les dendrites. Le dessin suivant nous montre un volume élémentaire dans lequel se trouve un ensemble de dendrites. Nous pouvons considérer qu'à la base ( $T_{base}$ ) de celles-ci, tout est solide et au maximum à la température de solidus, alors qu'au sommet, tout est liquide et à la température ( $T_{sommet}$ ) du liquidus au minimum. La dendrite croît tout au long de ce gradient spatial thermique. On peut alors évaluer la longueur de la zone pâteuse  $L$  comme égale au rapport de la différence thermique entre le sommet et la base rapporté au gradient thermique  $G$  :

$$L = \frac{T_{sommet} - T_{base}}{G} \quad (1.19)$$

Lorsque le gradient thermique augmente alors la longueur diminue. Lorsque le gradient diminue, la longueur augmente, ce qui facilite la casse des dendrites et permet une nucléation hétérogène plus importante.

La différence du numérateur est connu théoriquement, la longueur de la dendrite peut être mesurée par analyse micrométallurgique, on peut alors en déduire le gradient thermique appliqué localement lors de la solidification.

Chaque dendrite est composée d'un bras principal et de bras secondaires. La distance entre les bras principaux tout comme la distance entre les bras secondaires sont un critère de qualité de la finesse métallurgique. Au plus ces distances entre bras sont petits, au plus la pièce solide présentera des qualités de tenue mécanique.

**Un critère de la qualité microstructurale : DAS - Dendritic Arms Spacing** Ce critère nommé Dendritic Arm Space (DAS) ou SDAS pour Secondary Dendritic Arm Space peut être mesuré directement sur la microstructure. Evalué en microns, les DAS peuvent varier entre 10 et 100  $\mu\text{m}$  dans les pièces industrielles en fonction de la vitesse de solidification locale (Figure 1.18), les meilleurs SDAS actuels sont de l'ordre de 20 $\mu\text{m}$  [B. Zhang, 2003].

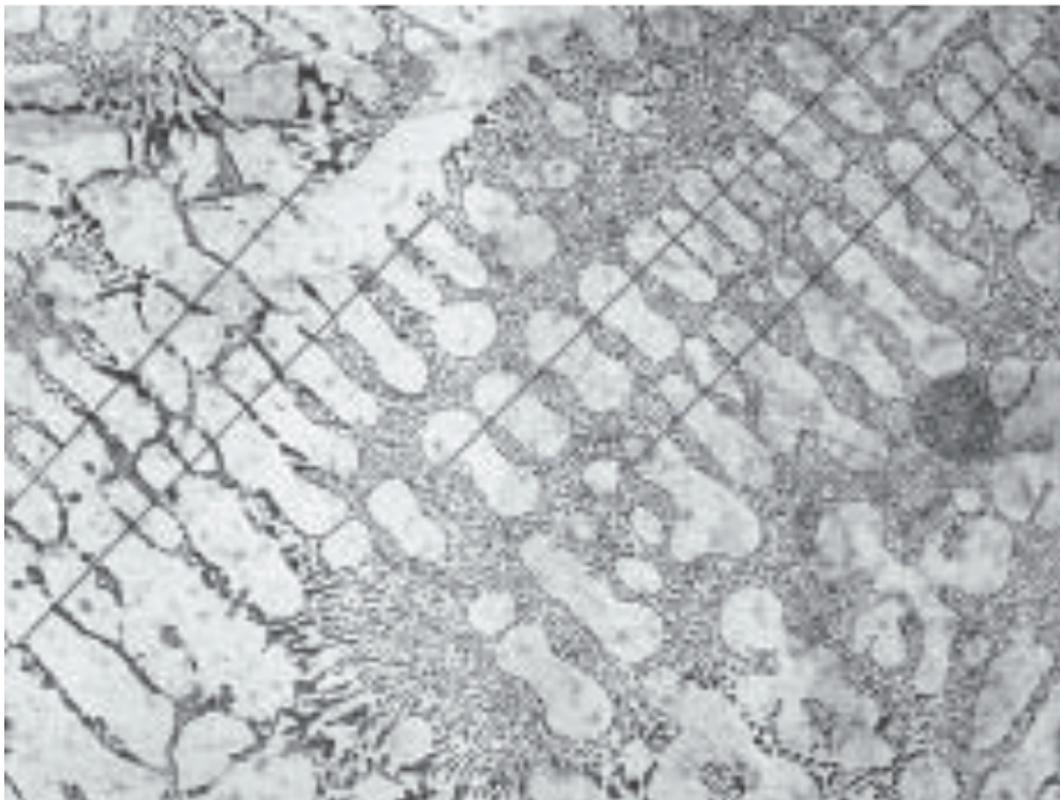
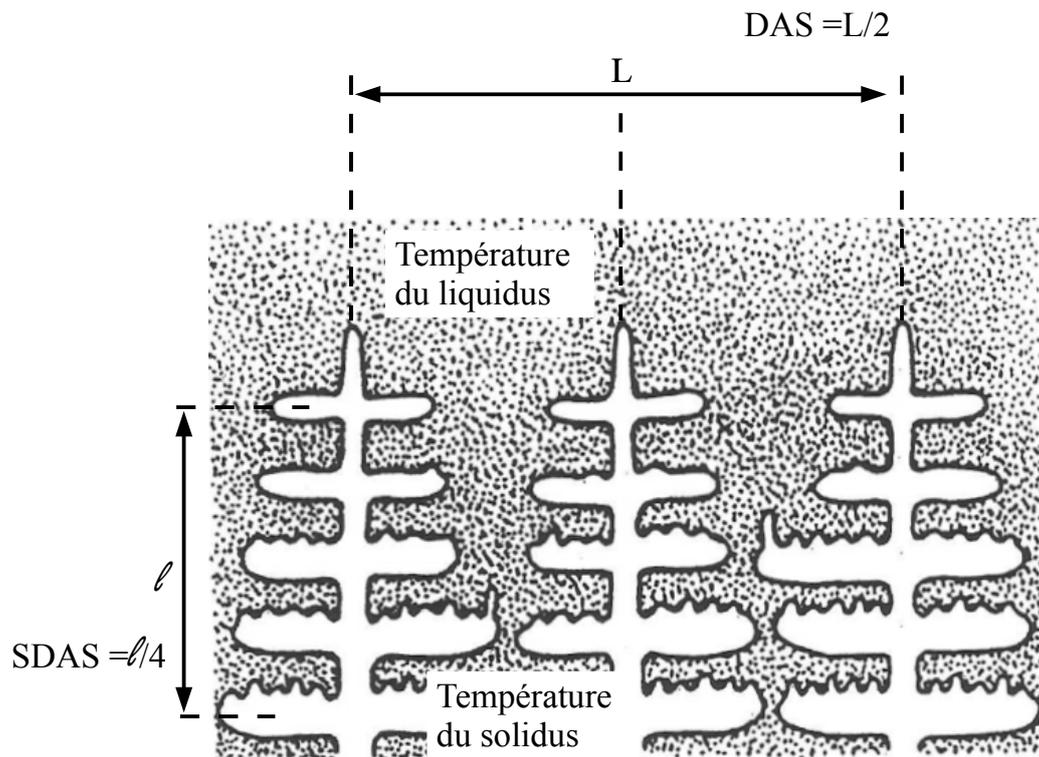


FIGURE 1.17 – Schématisation de la mesure du DAS et du SDAS entre les bras primaires et secondaires (Source : D. Apelian ) (au dessus) et mesure concrète sur une micrographie (Source : [B. Zhang, 2003]) (au dessous)

Une corrélation a été mise en avant entre la mesure du DAS et le TLS par Bower en 1962 (Figure 1.18) [Bower, 1962, Bower, 1966].

De part les figures ci-dessus, nous constatons une relation de comportement logarithmique entre le DAS ou le SDAS et le temps local de solidification.

Sur cette base, une formulation a été établie :

$$(S)DAS = a(TLS)^n = b(GR)^{-n} \quad (1.20)$$

$a$ ,  $b$  et  $n$  sont des paramètres dépendants de chaque alliage et selon que l'on veut anticiper le DAS ou le SDAS. Le terme  $GR$  est le gradient thermique par la vitesse d'avancée du front de solidification et est égal à la vitesse de refroidissement. Néanmoins, pour un alliage d'aluminium AlSi7Mg, nous pouvons dire que les paramètres du SDAS sont  $a \sim 10$  et  $n \sim 0.33$ . Dès lors, lorsque nous serons dans la partie simulation numérique et que nous aurons les champs de température pour tous les points à tous les instants, nous pourrons tracer une carte du (S)DAS de la simulation, en post-traitement [Spear, 1963, Hunt and Lu, 1996].

Nous constatons d'après Bamberger en 1986 que le DAS est également fonction de la quantité de silicium présent (Figure 1.19). Dans le cas des alliages hypoeutectiques, nous observons sur le graphe ci-dessous que moins il y a de soluté et moins le DAS est grand. La variation est de l'ordre de 35% entre un alliage comprenant 1% et 9.7% de Si en poids. Ceci avait été présenté en 1963 par Spear et al. pour différents solutés [Spear, 1963, Bamberger et al., 1986].

La zone pâteuse présente également plusieurs phénomènes concomitants : évolution de la température nous l'avons évoqué, mouvements fluides également qui transportent la matière, mais au delà se produisent des phénomènes de changement de densité (Figure 1.7).

**Défaut : les retassures ou macroporosités** Dès lors, nous pouvons préciser que le défaut de fonderie appelé retassure ou macroporosité sera créée par la fermeture des isothermes au cours de la solidification.

Imaginons qu'au cours de la solidification, une poche reste liquide, de part la géométrie de la pièce. Les contours de cette poche vont se solidifier avant le centre de ladite poche. Si l'on prend en compte l'augmentation de la masse volumique avec le refroidissement, cela signifie que la poche va se rétracter alors que l'alentour sera déjà solide. En conséquence, il apparaîtra un évidement à cet endroit.

Dans notre modélisation, nous n'aurons pas la possibilité de visualiser ce retrait matière. Dès lors nous observerons les isothermes et s'ils se referment à certains endroits, nous saurons qu'il y aura des défauts.

**Fraction solide** Enfin, il n'est pas possible de clore ce paragraphe dédié à l'état semi-solide sans évoquer la courbe de fraction solide (Figure 1.10) qui précisément indique la fraction de liquide solidifiée en fonction de la température. La fraction solide est comprise entre 0 et 1. Il est ainsi possible d'identifier les températures de liquidus, eutectique et solidus. On peut noter qu'à la température eutectique se produit un saut qui témoigne de la solidification de l'eutectique Al-Si et ensuite de l'eutectique ternaire, dans le cas d'un alliage contenant du magnésium. La courbe entre le liquidus et l'eutectique (Figure 1.10) fait écho au début de la courbe de refroidissement (Figure 1.9) où nous pouvions distinguer la phase de croissance dendritique.

La méthode d'obtention de la courbe de fraction solide fera l'objet de développements plus long dans la paragraphe flux de masse (en particulier les modèles de microségrégation) et dans la partie 4 de ce manuscrit dédié aux mesures expérimentales réalisées.

## 1.6 Flux de masse

Les premières recherches avancées sur les flux de masse et leurs modélisations ont été formulée par le Pr. Flemings dans son ouvrage "Solidification Processing" au chapitre 2 [Flemings, 1974]. Les modèles présentés ici, même s'ils ont évolué sont tous très proche de ceux présentés en 1974. Ils ont tous pour but d'obtenir une expression analytique de la fraction solide  $f_s$  en fonction de la température. Cet objectif

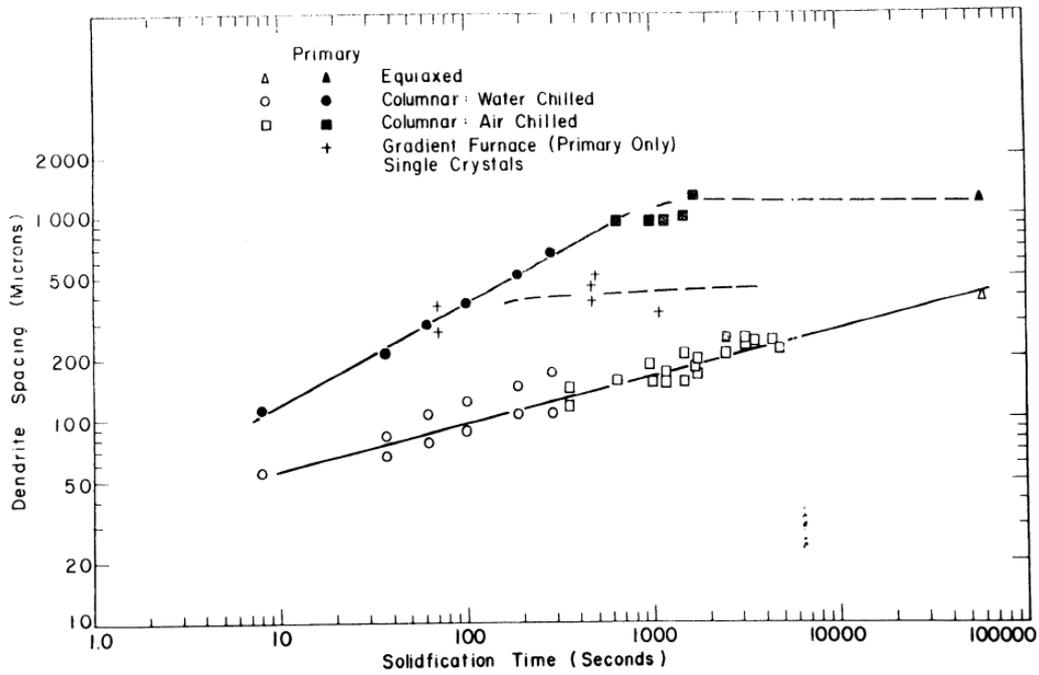
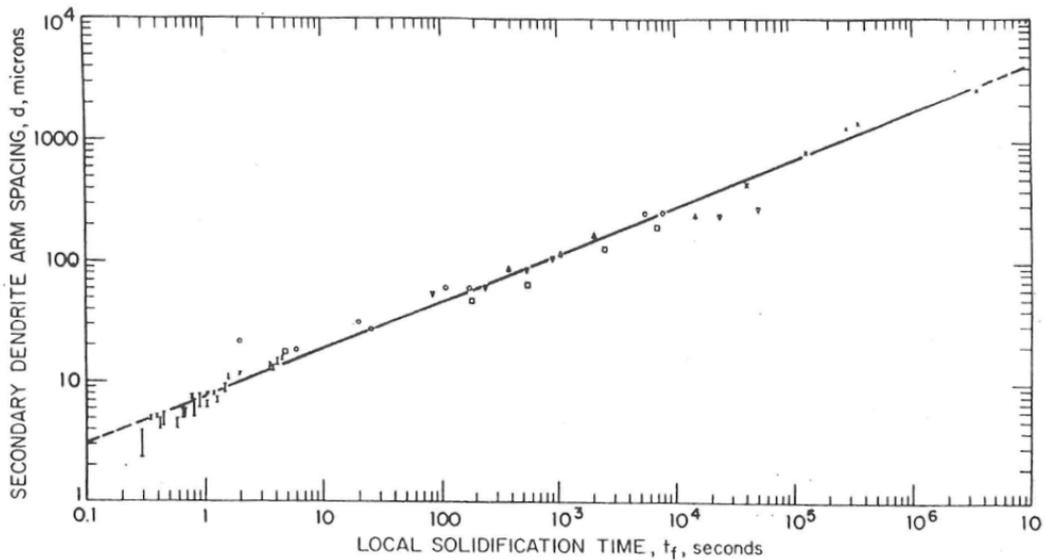


Figure III-13: Dendrite sheet spacing versus solidification time for dendrites grown under various conditions. Solid symbols are primary, open symbols are secondary or tertiary. Solidification time was taken as the time for cooling from the liquidus to 50°F below the liquidus.

(a) Mise en corrélation du DAS en fonction du temps de solidification (Source : [Bower, 1962])



(b) Mise en corrélation du SDAS en fonction du temps de solidification (Source : [Bower, 1962])

FIGURE 1.18 – Corrélation entre DAS et temps local de solidification

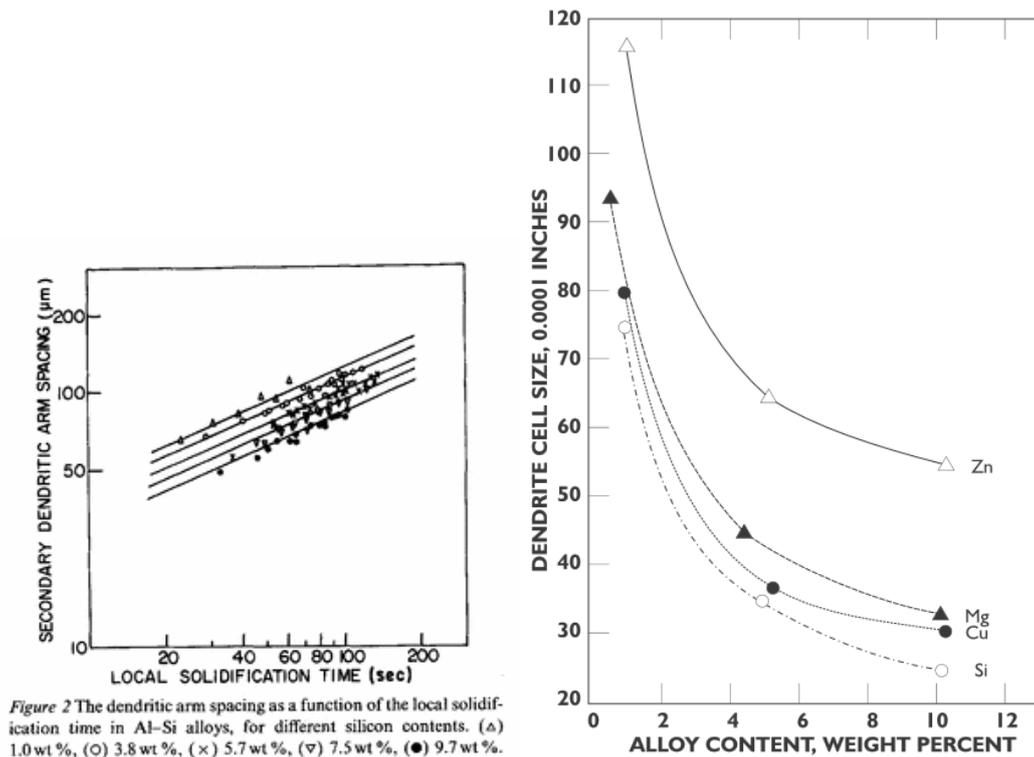


FIGURE 1.19 – Mise en corrélation du SDAS avec le temps de solidification pour différentes concentrations en Si pour des alliages Al-Si (Source : [Spear, 1963])(à gauche)et Evolution du DAS en fonction de la quantité d’éléments de soluté présent dans un alliage Al-Si (Source : [Bamberger et al., 1986])(à droite)

est en vue d’obtenir une propriété matériau de fraction solide fiable pour les simulations numériques à venir. Nous possédons, de part les données industrielles et le logiciel JMatPro, une courbe de la fraction solide (Figure 1.10). Cependant, son usage dans des méthodes numériques décrites dans la prochaine partie (qui nécessite des dérivées de cette fraction solide), la rend peu pratique. Aussi, nous recherchons une expression analytique qui pourrait approximer au plus juste la précédente figure et qui pourrait être facilement dérivable. En complément de cette section dédiée au transfert de masse, une expérimentation a été réalisé afin d’évaluer la fraction solide en fonction de la température par nous-même (voir partie 4 expérimentale).

Comme nous l’avons vu dans le diagramme de phase (Figure 1.15), pour une concentration initiale à une température  $T_A > T_{liq}$ , l’alliage est à l’état liquide et sa concentration en silicium égale à sa valeur initiale. Dès lors que la température atteint la température de liquidus  $T_B = T_{liq}$ , alors le premier solide à se former aura la concentration en silicium égale à  $C_F$  alors que la phase liquide restera très proche de la concentration initiale, sauf à proximité de la dendrite. Nous introduisons là le phénomène de partition entre la phase liquide et la phase solide.

La température continue de baisser pour atteindre une température intermédiaire  $T_C$  entre le liquidus et l’eutectique avec  $T_B > T_C > T_E$ . A cet instant, la concentration du solide nouvellement formé a la concentration  $C_G = 1.1\%$ , également noté sur le graphe  $C_1$ , alors que la concentration en Si dans la phase liquide est égale à  $C_H = 9.9\%$ , également notée  $C_2$ . Nous constatons que la phase solide formée devient de plus en plus riche en solvant, c’est à dire que l’aluminium solide accepte de plus en plus de silicium dans les dendrites, mais également qu’il y a de plus en plus de silicium qui s’accumule dans la phase liquide.

Lorsque la température eutectique est atteinte, alors le maximum de solubilité de l’aluminium est atteint avec  $C_{max} = 1.65\%$ , la phase liquide prend alors la concentration dite eutectique égale à  $C_E = 12.7\%$ . Le tracé des isoconcentrations (Figure 1.23a) en est une bonne illustration de ce phénomène.

Différents modèles utilisent le coefficient de partition afin de modéliser le transfert de masse lors de la solidification. Ces modèles reposent néanmoins sur des hypothèses énoncées ci-dessous. Pour chaque modèle particulier, il y aura des hypothèses complémentaires émises.

1. La surfusion<sup>19</sup> due à la nucléation est négligeable ou n'existe pas.
2. La surfusion due à la vitesse de solidification est négligeable ou n'existe pas, ainsi que celle due à l'effet de courbe au sommet de la dendrite.
3. Absence de mouvement de masse entrant ou sortant du volume élémentaire que nous allons schématiser.
4. Un état d'équilibre local est toujours supposé à l'interface liquide-solide.

Dans le diagramme de phases, les tracés des pentes de liquidus et solidus permettent de déterminer un coefficient de partition que nous allons détailler immédiatement.

### 1.6.1 Coefficient de partition

L'état liquide est celui dans lequel l'alliage va être coulé dans le moule, c'est également l'état où la concentration en soluté est à l'état initial. Nous avons vu grâce au diagramme de phases précédent qu'il se produit une partition entre la partie du soluté (Si) qui restera dans la phase  $\alpha$  solide et celle rejetée dans la phase liquide. Cette section est l'occasion de faire un point sur la microstructure et les propriétés de l'état liquide.

**Solubilité** Nous avons évoqué précédemment le maximum de solubilité en silicium (soluté) dans l'aluminium (solvant). Cette solubilité maximum s'élève à environ 1,65% d'après le diagramme de phase<sup>20</sup>. Il existe néanmoins d'autres types d'éléments à évoquer.

Il est intéressant de constater, pour le magnésium ou le cuivre combien le coefficient de diffusion devient grand avec l'augmentation de température (Figure 1.20), d'un ordre 3 à la limite de fusion.

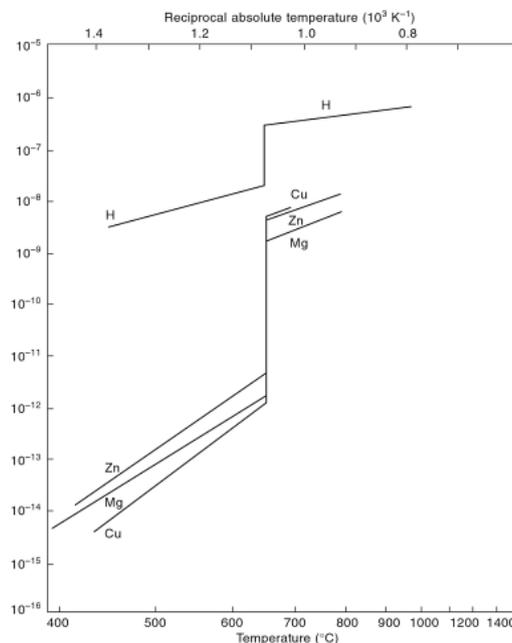


FIGURE 1.20 – Evolution de la diffusivité de certains éléments chimiques en fonction de la température (Source : [Campbell, 2003])

19. La surfusion se produit à certaines étapes de la solidification et se traduit par une baisse anormale de la température de changement de phase, puis une remontée rapide. Ceci traduit un besoin de perte d'énergie supplémentaire pour permettre la nucléation, la remontée en température traduit la croissance très rapide de la nucléation.

20. Rappelons le, est réalisé à l'équilibre (refroidissement infiniment lent).

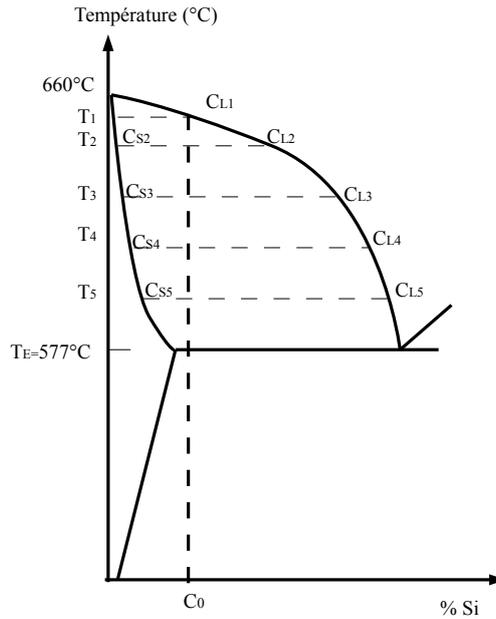


FIGURE 1.21 – Schématisation du coefficient de partition déterminé à partir d'un diagramme de phase quelconque

Ce diagramme sera également rappelé lorsque nous traiterons de diffusion de masse. En effet, nous serons face à différents modèles pour représenter la croissance dendritique et la manière dont le soluté sur-saturé est rejeté hors de la dendrite. Plusieurs hypothèses sont possibles dont : diffusion très rapide dans la phase solide ou diffusion nulle dans le solide. Ce diagramme nous apportera un élément d'analyse [Campbell, 2003, Davydov, 2012, Felberbaum et al., 2011].

Le corolaire du graphique de diffusivité de l'hydrogène dans l'aluminium est la solubilité.

**le coefficient de partition** Le coefficient de partition est le rapport des pentes des liquidus et solidus à une température donnée. Il exprime le rapport entre les concentrations en phase liquide et solide pour une température donnée :

$$k = \frac{C_{solide}}{C_{liquide}} \quad (1.21)$$

Ainsi, même si les courbes de liquidus et solidus ne sont pas des droites, mais des courbes, cette relation reste valable (Figure 1.21).

On peut alors exprimer le coefficient de partition en fonction de la température :

$$k(T) = \frac{C_s(T)}{C_l(T)} \quad (1.22)$$

A noter également que l'on vérifie pour toute température la relation suivante :

$$\forall T f_s(T)C_s(T) + f_l(T)C_l(T) = C_0 \quad (1.23)$$

Ceci afin de vérifier le principe de conservation de la masse. Les fractions liquides  $f_l$  et solide  $f_s$  peuvent être déterminées (Equation 1.25).

Tous les diagrammes de phases ont des pentes de liquidus et solidus différentes, de telle manière qu'il n'y ait pas deux coefficients de partition identiques. Dans le cas d'un alliage Al-Si, le coefficient de partition sera toujours inférieur à 1, il existe toutefois des situations où ce coefficient peut être plus grand que 1 comme dans le cas de l'alliage Al-Ti [McCartney, 1989]. Les pentes de liquidus et solidus sont alors négatives ou positives (Figure 1.22).

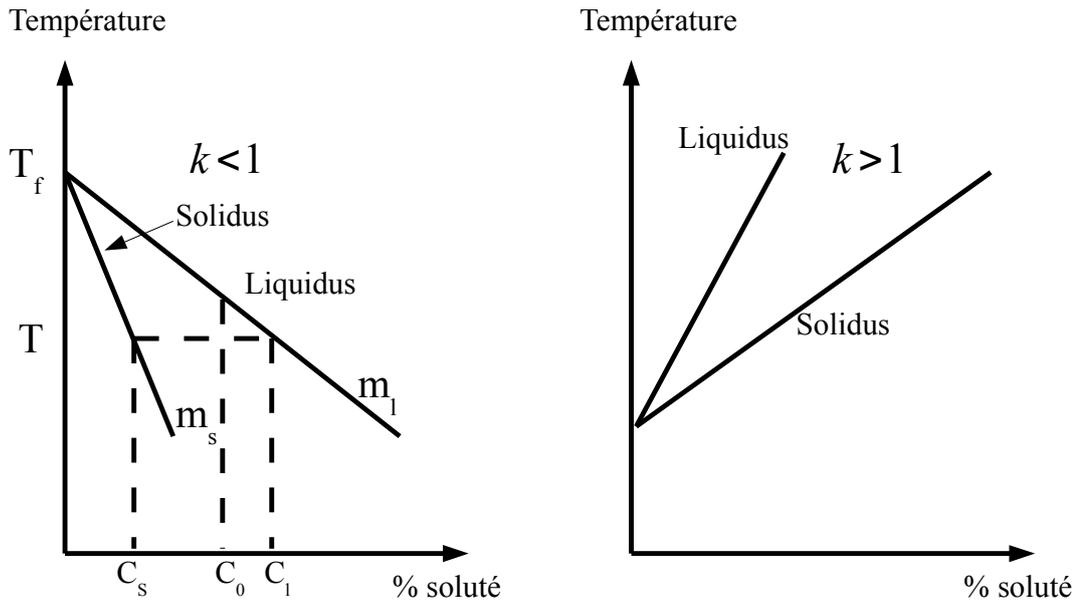
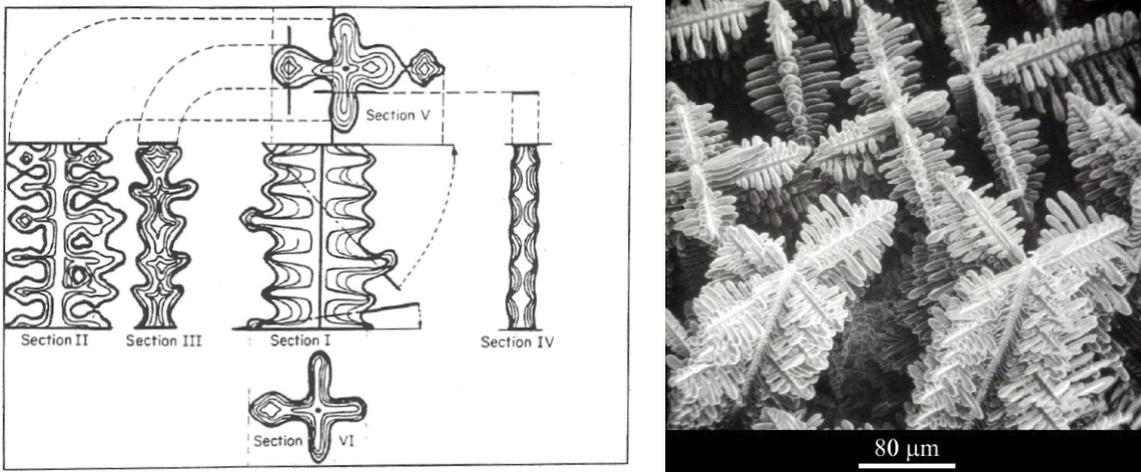


FIGURE 1.22 – Coefficients de partition positifs ou négatifs selon l’orientation des liquidus et solidus du diagramme de phase



(a) Tracé des isoconcentrations dans une dendrite (Source : [Gardon and Kurz, 1981])

(b) Dendrites (Source : DR)

FIGURE 1.23 – Dendrites et isoconcentrations internes [Gardon and Kurz, 1981]

$T_f$  est la température de fusion du solvant pur,  $m_l$  et  $m_s$  sont respectivement les pentes du liquidus et du solidus. Dans le premier cas, nous l’avons détaillé, l’excès de soluté est rejeté en phase liquide, ceci à la différence du second cas où là, le solide a besoin de ”capter” le soluté pour croître (par exemple pour un Al-Ti faiblement allié).

L’état solide regroupe énormément d’inhomogénéités. De part le diagramme de phase (Figure 1.15), nous constatons que la phase solide présente d’abord en ”F” une concentration en soluté qui croît jusqu’au maximum de solubilité du soluté dans le solvant. Ce qui implique que la dendrite elle-même est hétérogène : la richesse en aluminium sera plus grande au cœur de la dendrite qu’à sa périphérie (Figure 1.23a) [Gardon and Kurz, 1981]. Il est possible d’observer la forme des dendrites [Hunt and Lu, 1996, Burden and Hunt, 1974] (Figure 1.23b)

Par ailleurs, nous pouvons noter aussi la présence d’oxydes, d’inclusion, de finesse microstructurale

différente dans la pièce de telle manière que la pièce qui doit être assez homogène à l'échelle macroscopique se retrouve très hétérogène à l'échelle microscopique.

C'est d'ailleurs au moment du passage à l'état solide que se matérialisent les principaux défauts de fonderie. Nous allons en dresser un panorama ci-après.

**Solidification eutectique** De part sa solidification à température constante, la phase eutectique, qui se crée pour les alliages dont la composition est au delà de la limite de solubilité, mérite d'être traitée ici. Alors que la solidification touche à sa fin, la concentration en Si dans la phase liquide atteint son maximum à 12.7%. A cet instant, la phase liquide va se solidifier de manière isotherme avec cependant des géométries particulières :

1. Lamellaire : les plaques de silicium se trouvent être fines et allongées, en alternance avec de l'aluminium. Cette structure est caractéristique de nombreux eutectiques AlSi, AlCu, AlMg mais aussi, eutectoïdes comme la perlite. C'est cette structure que nous détaillerons plus par la suite car très en lien avec l'Al-Si7 utilisé par Montupet.
2. Fibreux : les plaques sont très fines et plus courtes, presque des fibres. Les propriétés mécaniques de cet eutectique sont améliorées. C'est le résultat d'un traitement métallurgie appelé la modification (la théorie de la modification trouve ses sources en 1922 par deux articles fondateurs en 1922 [Curran, 1922, Guillet, 1922], la modification consiste en l'introduction d'atomes dont le rayon atomique est plus important que ceux du solvant).
3. Aciculaire : les plaquettes de Silicium sont courtes et épaisses, sans orientation les unes par rapport aux autres. Cette forme est surtout présente pour l'Al-Si13 (alliage hypereutectique (donc très riche à la base en silicium)).

Il ne sera détaillé ici que la croissance lamellaire. La vitesse de croissance des dendrites est en général supérieure à la vitesse de diffusion du soluté, l'excès de soluté s'accumule donc dans une couche qui entoure le cristal dendritique (Figure 1.24). Loin de la création de la dendrite, la concentration de l'alliage est égale à sa valeur initiale.

Un cristal de Silicium se forme sur le bord de la dendrite, dans la zone la plus riche en Si localement où la concentration eutectique est atteinte. Ceci abaisse la concentration locale en Si, donc l'aluminium en plus grande proportion locale (supérieure à la concentration eutectique) peut de nouveau se solidifier (mais toujours avec le maximum de solubilité, donc l'Al continue de rejeter du soluté, ce qui enrichit le milieu). Ceci augmente localement la concentration en Si, un cristal de Si se forme et ainsi de suite, alternant cristaux facettés de Si et non facettés d'Al. Il s'agit alors d'une croissance compétitive entre les deux formes cristallines.

C'est ainsi qu'autour des dendrites se forme l'eutectique lamellaire comme le montre l'illustration suivante qui présente l'aluminium Al-Cu10 avec en blanc les dendrites riches en aluminium et en rayé noir et blanc l'eutectique lamellaire [Stefanescu, 2008].

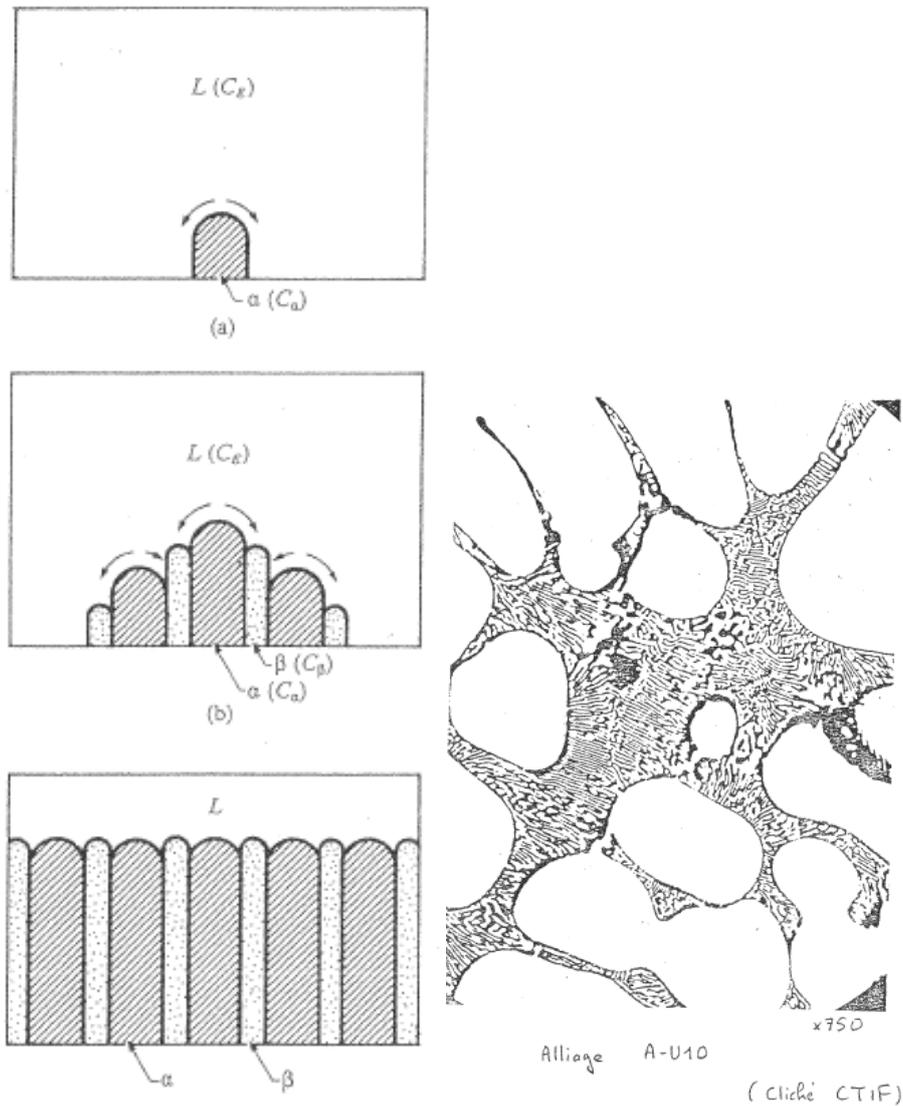


FIGURE 1.24 – Croissance eutectique compétitive (à gauche) et photographie de la phase eutectique d'un AISiCu10 (à droite) (Source : CTIF)

Le coefficient de partition est observé macroscopiquement au niveau du diagramme de phase. Il puise cependant ses origines dans la microségrégation dendritique. Nous savons maintenant que l'aluminium solide peut accepter un maximum de 1.65% de silicium dans les dendrites. Ceci de part les sites interstitiels tétraédriques et octaédriques développés, mais également de part les atomes de substitution (Règles énoncées par William Hume-Rothery (1899 - 1968)

[W. Hume-Rothery P. S. Rudman and R. I. Jaffee, 1967, Zhang et al., 2010] : le diamètre atomique de l'atome de substitution doit être de +/-15% du diamètre du solvant, la structure cristallographique doivent être les mêmes, l'atome de substitution doit avoir un nuage de valence supérieur ou égale à celui du solvant, l'électronégativité des atomes doivent être sensiblement identiques. )

Il paraît dès lors évident que pour un alliage composé initialement à 7% de Si, et une phase solide qui n'accepte que 1.65% de Si, dès que les premiers cristaux vont se former, un rejet massif de Si va se produire, depuis la phase solide vers la phase liquide. Mais attention cependant, à considérer la diffusion dans la phase solide comme d'un ordre 3 inférieure à celle dans la phase liquide (Figure 1.20). Le phénomène de diffusion et de rejet du silicium hors de la phase solide est illustré (Figure 1.25).

Ainsi quelles hypothèses peut on prendre quant à la diffusion du silicium dans la phase liquide et celle dans la phase solide ? Considérer une diffusion infinie dans les deux phases ( modèle d'équilibre), considérer une diffusion nulle dans le solide et infinie dans le liquide ( modèle de Scheil-Gulliver),

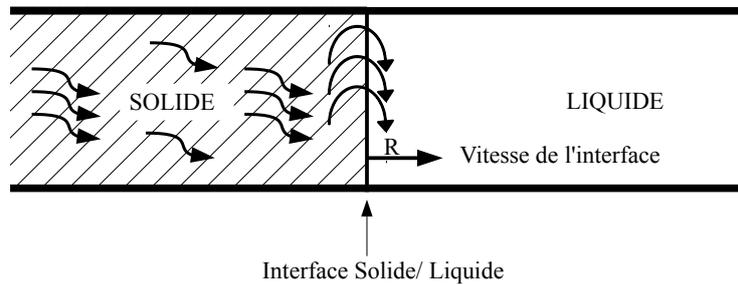


FIGURE 1.25 – Schématisation de la migration du soluté en excès dans le solvant

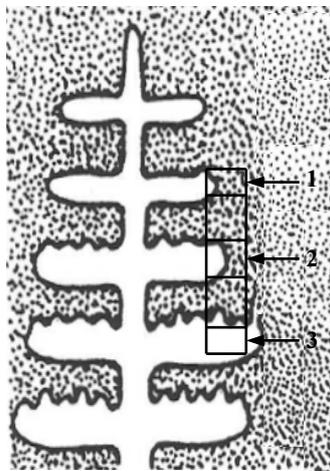


FIGURE 1.26 – Schématisation de la croissance dendritique au cours du temps et volumes élémentaires associés

considérer une diffusion limitée dans le solide (modèle de segmentation inverse, une simplification du modèle de Brody-Flemings) ?

La microségrégation s'attache particulièrement à modéliser ce phénomène. Nous allons faire en sorte de détailler ces différents modèles car même s'il s'agit de transfert de masse, donc hors limite de la thèse, ces modèles seront importants pour la partie 4 expérimentale, relative à la fraction solide. La microségrégation se déroule à l'échelle dendritique, nous définissons alors un volume élémentaire sur le bord d'une dendrite et suivrons son évolution au cours du temps (états 1, 2 et 3) (Figure 1.26). Chacun des trois volumes élémentaires décrit un instant dans la croissance de la dendrite et ils nous permettront de tracer le profil de concentration en Si, ainsi que le profil thermique.

### 1.6.2 Modèle de diffusion à l'équilibre - Règle des segments inverses

A partir du diagramme de phase (Figure 1.15b), nous savons qu'à la température de 590°C, le concentration en soluté Si dans la phase solide est de  $C_s=1,1\%$  et dans la phase liquide  $C_l=9,9\%$ , nous connaissons la concentration initiale  $C_0=7\%$ . Sur cette base, nous recherchons la fraction solide  $f_s$  et liquide  $f_l$  présente dans le milieu. Nous avons toutefois une indication relative aux fractions :  $f_l + f_s = 1$ . Il nous faut donc résoudre le système (Equation 1.24) dont les inconnues sont  $f_s$  et  $f_l$ .

$$\begin{cases} C_0 = C_s f_s + C_l f_l \\ f_s + f_l = 1 \end{cases} \quad (1.24)$$

Une rapide substitution amènera à l'expression de la fraction solide à 590°C (Equation 1.25).

$$f_s = \frac{C_0 - C_l}{C_s - C_l} \quad (1.25)$$

En terme graphique, il s'agit de la mesure des segments (Figure 1.15b) :  $f_s = \frac{CH}{GH}$ .

L'appellation segments "inverses" vient du fait qu'il faille prendre le segment opposé à la phase recherchée. Si la phase recherchée était la phase liquide, alors nous aurions pris au numérateur le segment GC (qui est du côté solide par rapport à la concentration initiale).

La démonstration de cet outil sera détaillé plus loin après les hypothèses ci-après, lorsque le transfert de masse sera traité.

Le diagramme de phase est issu d'une pluralité de courbes de refroidissement pour différentes compositions d'alliages, toutes réalisées à l'équilibre. L'équilibre peut être défini par un temps de refroidissement infini, ainsi entre chaque instant la différence d'entropie de l'alliage est nulle, il y a donc réversibilité. Nous pouvons comprendre que ceci n'est pas possible dans la réalité, mais nous pouvons nous en approcher en maintenant les isolants thermiques autour de l'expérience afin de limiter la perte calorifique et ainsi augmenter le temps de refroidissement. C'est donc sous cette hypothèse que sont réalisées les courbes de refroidissements et donc le diagramme d'équilibres (de phases).

Reprenons les trois volumes élémentaires et observons de quelle manière ils évoluent dans le temps.

Dans notre but d'évaluer la fraction solide en fonction de la température, nous avons évoqué précédemment la méthode des segments inverses (lever rule en anglais). Il s'agit à présent d'en faire la démonstration sur la base de la représentation des différents coefficients de partitions (Figure 1.22). Nous allons démontrer l'expression qui permet d'exprimer  $f_s$ , la fraction solide, en fonction de variables connues ( $T, T_f, T_{liq}$  et  $k$ ) selon respectivement la méthode des segments inverses (Lever Rule), avec  $T$  la température,  $T_f$  la température de fusion de l'aluminium pur,  $T_{liq}$  la température du liquidus à une concentration donnée,  $f_s$  la fraction solide et  $k$  le rapport des pentes liquidus sur solidus tel que  $k = \frac{m_l}{m_s}$ ,  $m_l$  avec et  $m_s$  la valeur des pentes respectivement du liquidus et du solidus.

Cette méthode exige de prendre en compte plusieurs hypothèses simplificatrices que nous détaillons.

### Hypothèse complémentaire pour la méthode des segments inverses :

1. Le refroidissement au cours du temps est infiniment lent pour permettre une diffusion complète à la fois dans la phase liquide mais également solide. (état d'équilibre, réversibilité). La première hypothèse est similaire à celle sous-jacente à la création du diagramme de phase. C'est à dire que le refroidissement doit être à l'équilibre à chaque instant pour permettre une parfaite diffusion du soluté dans la phase liquide et dans la phase solide. Ceci implique deux possibilités, soit la vitesse de solidification tend vers 0, soit la vitesse de diffusion dans le liquide et le solide tend vers l'infini. Ces conditions sont loin de celles rencontrées dans la pratique [Stefanescu, 2008]. Ceci implique également que les deux phases soient à la même température et que la solidification soit réversible [Durand-Charre, 2012].
2. La deuxième hypothèse repose sur la première car s'il y a un équilibre entre la phase liquide et solide, elle précise que les liquidus et solidus peuvent être approximés par des droites [Rappaz et al., 1998].

Ceci dépend beaucoup des alliages considérés. Dans notre cas, faiblement allié en Si, cette hypothèse est assez acceptable. Nous observons que pour la partie du diagramme (Figure 1.14) fortement allié en Si, cette hypothèse n'est pas pertinente. Dans notre cas, nous nous plaçons pour un alliage AlSi7Mg.

Si nous observons un barreau en cours de solidification (Figure 1.27), à différents instants, nous obtiendrons une évolution similaire à l'illustration suivante :

Nous sommes dans un diagramme binaire, par conséquent seuls deux phases (Liquide et Solide) peuvent co-exister (Equation 1.26) :

$$f_s + f_l = 1 \quad (1.26)$$

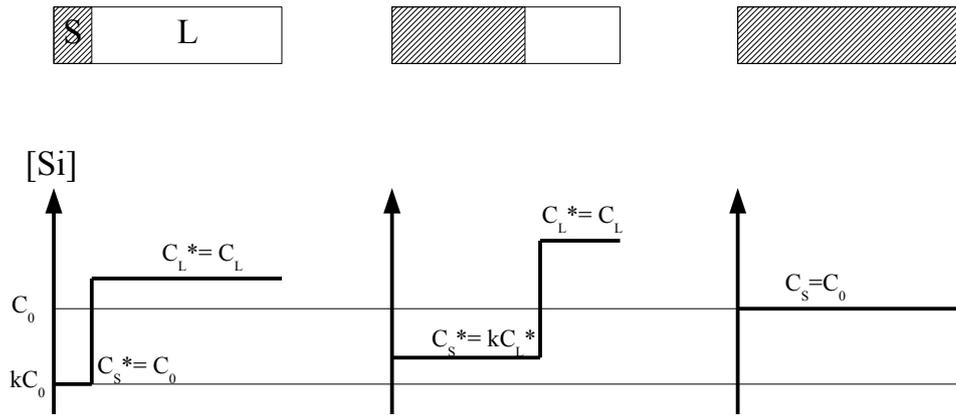


FIGURE 1.27 – Evolution de la solidification pour un refroidissement à l'équilibre dans un volume élémentaire (Source : [Stefanescu, 2008])

La règle des segments inverses permet pour une température donnée et pour un alliage connu de déterminer le pourcentage de phase solide en présence.

La concentration initiale  $C_0$  en soluté Si est constante dans l'alliage à tout instant au point de vue global. Cependant, la solubilité du Si dans l'Al varie en fonction de la température. Ce ne sera donc pas la même concentration dans la phase solide  $C_s$  et dans la phase liquide  $C_l$ .

Sur la base des équations (Equations 1.24 et 1.25), nous pouvons dire que nous avons  $f_s = \frac{C_l - C_0}{C_l - C_s}$  et  $f_l = \frac{C_0 - C_s}{C_l - C_s}$ .

Par ailleurs, nous pouvons exprimer le rapport ( $k_0$ ) (Equation 1.27) des droites solidus et liquidus comme suit :

$$C_s k_0 = C_l \quad (1.27)$$

Rappelons que cette hypothèse est forte si nous remplaçons (Equation 1.27) dans (Equation 1.25) nous obtenons  $f_s = \frac{C_l - C_0}{C_l - k_0 C_l}$  soit :

$$f_s = \frac{C_l - C_0}{C_l(1 - k_0)} \quad (1.28)$$

A partir de l'expression de la fraction solide (Equation 1.28), exprimons  $C_l$  (Equation 1.29) en fonction de  $f_s$  :  $f_s(C_l - k_0 C_l) - C_l = -C_0$  soit  $C_l[1 - (1 - k_0)f_s] = C_0$ .

$$C_l = \frac{C_0}{1 - (1 - k_0)f_s} \quad (1.29)$$

L'illustration du coefficient de partition (Figure 1.22) nous permet de déterminer les équations de l'ensemble des points appartenant au solidus et au liquidus (Equation 1.30). Attention, à partir de ce point nous allons considérer les liquidus et solidus comme des droites. Ceci est une forte restriction simplificatrice. Avec un logiciel de calcul, il serait possible de développer un code qui prendrait en compte la non linéarité des liquidus et solidus.

L'hypothèse de linéarité des liquidus et solidus nous donne que :

$$\begin{cases} T_{\text{sur le solidus}} = T_f + m_s C \\ T_{\text{sur le liquidus}} = T_f + m_l C \\ T_{\text{solidus de l'alliage}} = T_f + m_l C_0 \\ T_{\text{liquidus de l'alliage}} = T_f + m_l C_0 \end{cases} \quad (1.30)$$

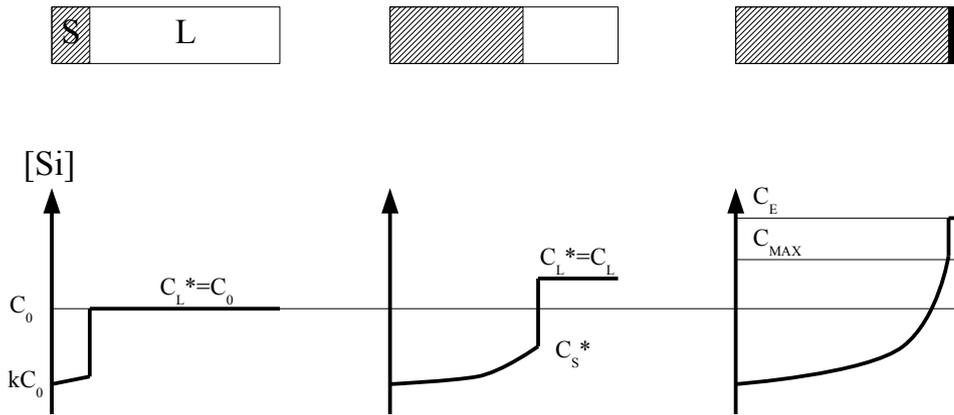


FIGURE 1.28 – Evolution de la solidification pour un refroidissement suivant un modèle de Scheil-Gulliver à l'équilibre dans un volume élémentaire (Source : [Stefanescu, 2008])

Si nous remplaçons  $C_l$  de l'équation 1.29 dans  $T_{\text{liquidus}} = T_f + m_l C$  de l'équation 1.30 nous obtenons :

$$T = T_f + m_l \frac{C_o}{1 - (1 - k_o) f_s} \quad (1.31)$$

Si nous cherchons à exprimer  $f_s$  en fonction de la température, cela donne  $\frac{m_l C_o}{T - T_f} = 1 - (1 - k_o) f_s$ , soit  $f_s = \frac{1}{1 - k_o} [1 - \frac{m_l C_o}{T - T_f}]$  soit  $f_s = \frac{1}{1 - k_o} [\frac{T - (T_f + m_l C_o)}{T - T_f}]$  or  $(T_f + m_l C_o) = T_{\text{liquidus de l'alliage}} = T_{\text{liq}}$  soit

$$f_s = \frac{1}{1 - k_o} [\frac{T - T_{\text{liq}}}{T - T_f}] \quad (1.32)$$

A noter également que nous pouvons déterminer la valeur de la concentration à l'interface, coté solide comme [Dantzig and Rappaz, 2009] :

$$c_s^* = \frac{k C_o}{1 + f_s (k - 1)} \quad (1.33)$$

Ainsi, nous pouvons exprimer la fraction solide de manière analytique pour cette approximation d'équilibre. Nous comprenons néanmoins que cette hypothèse d'équilibre est peu fréquente dans la réalité. Nous nous tournons alors vers une hypothèse de solidification rapide où la diffusion dans la partie solide est négligée, il s'agit de la méthode de Scheil-Gulliver. Cette approche fut suggérée par Gulliver en 1913, c'est Scheil qui en 1942 reprit ces travaux et les mit en pratique. [Eskin, 2008, Gulliver, 1913, Scheil, 1942]

### 1.6.3 Modèle de diffusion Scheil-Gulliver

Dans ce modèle, la grande différence de diffusion (d'un ordre 3) d'éléments dans l'aluminium est prise en compte avec en particulier une diffusion nulle dans le solide. Cela équivaut à une solidification rapide de telle manière que rien ne puisse se produire dans le solide (Figure 1.28).

A l'état final, on constate maintenant la présence d'une phase eutectique (à condition bien sûr que la composition initiale soit supérieure à  $C_{\text{MAX}}$ , la limite de solubilité).

La méthode de Scheil-Gulliver repose sur des hypothèses différentes de la méthode des leviers. En effet, nous considérons précédemment qu'il y avait diffusion à la fois dans la phase liquide et solide. Ce modèle de Scheil-Gulliver prend en compte cette notion pour s'approcher un peu plus de la réalité. Notons que cette approximation n'est pas exacte pour les aciers car la diffusion du carbone est suffisamment

grande pour être prise en compte. Il semble bien adapté aux cas de fonderie aluminium car il correspond aux conditions dans lesquelles les dendrites se forment.

**Hypothèses de la méthode de Scheil-Gulliver :**

1. La diffusion de soluté dans la phase liquide tend vers l’infini alors que la diffusion dans la phase solide tend vers 0.
2. Equilibre à l’interface
3. La température est constante à l’interface et la concentration dans le liquide est constante durant le procédé.
4. La solidification est irréversible

L’hypothèse 1 implique que la diffusion dans le liquide est rapide en regard de la progression de la solidification. Par ailleurs, il y a réversibilité s’il y a équilibre de toute la phase solide par diffusion complète. Ce qui correspond assez mal à l’hypothèse de diffusion nulle dans le solide.

[Hirt and Kopp, 2009, Dour, 2009, Durand-Charre, 2012, Jackson, 2006]

La conservation de la masse impose que  $C_o = C_s f_s + C_l f_l = \text{constante}$  soit  $dC_o = 0 = dC_s f_s + dC_l f_l + C_s df_s + C_l df_l$  or par hypothèse  $dC_s = 0$  et  $f_s + f_l = 1 \Rightarrow df_s + df_l = 0$  donc :

$$(C_l^* - C_s^*) df_s = f_l dC_l \tag{1.34}$$

L’illustration de la distribution du soluté (Figure 1.29) permet de schématiser deux instants successifs et d’observer que les deux aires des rectangles doivent être égales. Ceci de telle manière que ce qui était liquide à l’instant t devient solide à l’instant t+1. On observe alors une variation en terme de concentration, ainsi qu’une évolution de la fraction solide.

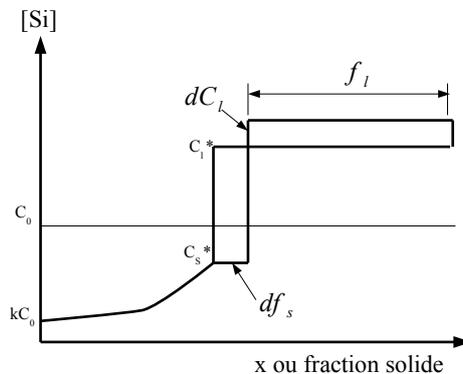


FIGURE 1.29 – Schématisation de la distribution de concentration du soluté pour la loi de Scheil-Gulliver

De la même manière que précédemment, nous suivons l’hypothèse de linéarisation des liquidus et solidus telle que  $C_s k_o = C_l$ , de plus, nous avons toujours  $f_s + f_l = 1$ .

Ainsi, l’expression 1.34 devient :

$$C_l (1 - k_o) df_s = (1 - f_s) dC_l \tag{1.35}$$

Nous avons également comme condition lorsque  $f_s = 0$ ,  $C_l = C_o$ .

Dès lors, à partir de l’équation 1.35 nous pouvons réarranger les termes de sorte que  $(k-1) \frac{df_l}{f_l} = \frac{dC_l}{C_l}$

soit par intégration  $(k-1) \int_1^{f_l} \frac{df_l}{f_l} = \int_{C_o}^{C_l} \frac{dC_l}{C_l}$

ce qui donne  $(k-1) \ln(f_l) = \ln \frac{C_l}{C_o}$  soit par passage à l’exponentielle :

$$C_l = C_o f_l^{k-1} \tag{1.36}$$

Dès cet instant et de la même manière que pour la méthode précédente, si nous remplaçons l'équation 1.36 dans  $T_{\text{liquidus}} = T_f + m_l C$  (linéarité des liquidus et solidus 1.30) nous obtenons :  $T = T_f + m_l C_o f_l^{k-1}$ . De la même manière que précédemment, nous appliquons ici une restriction à des liquidus et solidus linéaires.

Nous souhaitons isoler la fraction liquide, cela donne

$$f_l^{k-1} = \frac{T - T_f}{m_l C_o} = \frac{T - T_f}{(m_l C_o + T_f) - T_f} = \frac{T - T_f}{T_{\text{liq}} - T_f} \quad (1.37)$$

Par passage au logarithme et à l'exponentielle, nous obtenons :

$$f_l = \left( \frac{T - T_f}{T_{\text{liq}} - T_f} \right)^{\frac{1}{k-1}} \quad (1.38)$$

Nous obtenons l'expression de la fraction solide, de la même manière que pour l'hypothèse d'équilibre précédemment développée.

A noter également que nous pouvons déterminer la valeur de la concentration à l'interface, coté solide comme :

$$C_s^* = k C_o (1 - f_s)^{k-1} \quad (1.39)$$

Ce modèle est à l'extrême du modèle à l'équilibre. Il existe de nombreux modèles intermédiaires qui considèrent une diffusion plus ou moins faible dans la phase solide et une diffusion dans la phase liquide comprise entre 0 et l'infini. Ceci de telle manière à décrire au mieux le phénomène. Nous détaillerons ici le modèle de diffusion inverse (backdiffusion) qui est une simplification du modèle de Brody-Flemings, il considère une diffusion faible mais non nulle dans la partie solide. Notons qu'une diffusion inverse est considérée dans le cas de l'équilibre.

[Glicksman and Hills, 2001, Scheil, 1942, Brody, 1961, Brody, 1965]

#### 1.6.4 Modèle de diffusion "Back Diffusion" - Modèle Brody-Flemings

[Bower, 1966, Brody, 1966, Brody, 1961, Brody, 1965, Glicksman, 2010]

Le modèle de backdiffusion est une première approximation de la quantité de ségrégation chimique attendue, lorsqu'il y a diffusion dans le solide. Nous verrons qu'il dépend de trois coefficients indépendants qui sont le coefficient de partition  $k_0$ , la fraction solide  $f_s$  et le temps nécessaire pour solidifier (nombre de Fourier décrit ci-après).

Le choix de considérer une diffusion nulle (Scheil-Gulliver) dans le solide ou au contraire complète (équilibre, backdiffusion) dépend de la distance de diffusion pendant le temps de solidification. On comprend que si le temps local de solidification (TLS) est très grand ( $\alpha \gg 1$ ) alors cela laisse le temps aux atomes de migrer, l'hypothèse d'équilibre est envisageable. Par opposition, si le temps de solidification est très petit ( $\alpha \ll 1$ ), alors la distance d'influence de la diffusion sera petite, il y aura peu de diffusion dans la phase solide au regard de la vitesse rapide de progression du front <sup>21</sup>.

$$\sqrt{Fo_S} = \alpha = \frac{\sqrt{D} TLS}{L} \quad (1.40)$$

Ce terme  $\alpha$  est la racine carré du nombre de Fourier ( $Fo_S$ ) plus largement répandu. Ce nombre est utile pour avoir une mesure adimensionnelle du temps de solidification pour une diffusion à l'état semi-solide.  $D$  est le coefficient de diffusivité de l'alliage.

21. <http://www.msm.cam.ac.uk/teaching/partII/courseC8.php>

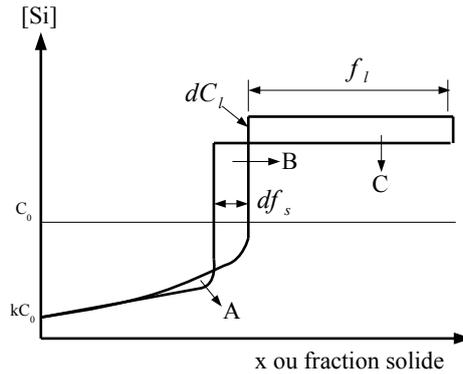


FIGURE 1.30 – Schématisation de la distribution de concentration du soluté pour la loi de Back Diffusion

Sur le diagramme de distribution du soluté (Figure 1.30), l'évaluation de la somme de surfaces A, B et C, doit être constante entre deux états. Ce graphe ressemble à celui proposé dans le modèle de Scheil-Gulliver, à ceci près que la concentration dans la phase solide évolue entre deux instants, de part le phénomène de diffusion inverse. Cela aide à déterminer analytiquement l'expression ci-après. Si le taux de transfert de chaleur, à l'état solide suit la même loi linéaire ou parabolique que durant la solidification, alors la dépendance temporelle est dans le cas linéaire  $f_s = \frac{t}{T_L S}$  et dans le cas parabolique  $f_s = \sqrt{\frac{t}{T_L S}}$ . Ceci de telle manière que nous pouvons exprimer dans le cas d'une croissance linéaire

$$\frac{C_l}{C_0} = \left[1 - \frac{f_s}{1 + kFoS}\right]^{(k_0-1)} \quad (1.41)$$

et dans le cas d'une croissance parabolique

$$\frac{C_l}{C_0} = \left[1 - f_s(1 - 2k_0FoS)\right]^{\left(\frac{k_0-1}{1-2k_0FoS}\right)} \quad (1.42)$$

avec  $\frac{C_l}{C_0} = \frac{C_s}{k_0C_0}$

ainsi que l'expression de la fraction solide :

$$f_s = (1 + \alpha k) \left(1 - \frac{T_f - T_{liq}}{T_f - T}\right)^{\frac{1}{1-k}} \quad (1.43)$$

Il faut remarquer que ce modèle respecte la première loi de Fick en terme de transport de masse mais n'est pas juste par rapport à la seconde loi de Fick relative à la dépendance temporelle<sup>22</sup>.

Si le nombre de Fourier est égal à  $FoS = \frac{1}{2k_0}$  alors il se produit un phénomène de "diffusion-réflexion" de telle manière que si la majorité des atomes se dirigent du chaud vers le froid (de part le phénomène de rejet lié à la solidification), des atomes se dirigeant également dans le sens inverse. Ce qui a pour effet de réduire le gradient de concentration à l'interface liquide-solide. Ceci impose toutefois des restrictions en terme de couple longueur, temps de solidification, de telle manière que si la longueur considérée est grande, supérieure au cm alors le nombre de Fourier sera très petit et négligeable, sauf si le temps de solidification s'étend sur des durées géologiques...

**Brody Flemings** Le modèle de Back Diffusion est une simplification de ce présent modèle qui fut le premier à être résolu de manière informatique numérique, par méthode incrémentale, plutôt que par méthode analytique. Cela valu d'ailleurs un retour du comité de relecture de l'époque exigeant qu'il

22. Pour rappel, 1ère loi :  $J_D = -D \frac{\partial c}{\partial x}$ , 2nde loi :  $D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial t}$ , avec D le coefficient de diffusion, c la concentration, x l'espace et J le flux) Cependant, cela n'est pas un problème dans la mesure où les durées de solidification sont faibles (de l'ordre de la minute pour une culasse en aluminium ou de l'heure pour des pièces beaucoup plus grandes, réalisées en fonte).

soit fourni une solution analytique (placée en annexe B du précédent papier) et précisant que la solution numérique n'était pas réellement de la Science...[Conversation avec le Pr. H. Brody]

Un avantage de la méthode numérique mise en place pour résoudre l'équation de la fraction solide est qu'elle prend en compte les pentes des liquidus et solidus à chaque instant, comme indiqué sur le diagramme suivant. Cela permet d'être plus proche de la vérité avec des liquidus et solidus qui parfois sont loin d'être des droites.

Brody introduit une mesure du comportement de départ de la croissance de la dendrite, par un nombre de Fourier multiplié par le coefficient de partition (Figure 1.31).

$$\alpha k = \frac{D T L S}{L^2} k \quad (1.44)$$

Cela détermine le degré de diffusion dans la phase solide, de la même manière que précédemment, si  $\alpha k \ll 1$ , alors la prédiction de Scheil-Gulliver hors équilibre convient, alors que si  $\alpha k \gg 1$ , la composition des dendrites sera uniforme. A noter que ce modèle tend à surestimer la diffusion dans le solide lorsque le nombre de Fourier est grand, cas lors des solidifications très lentes [Brody, 1965].

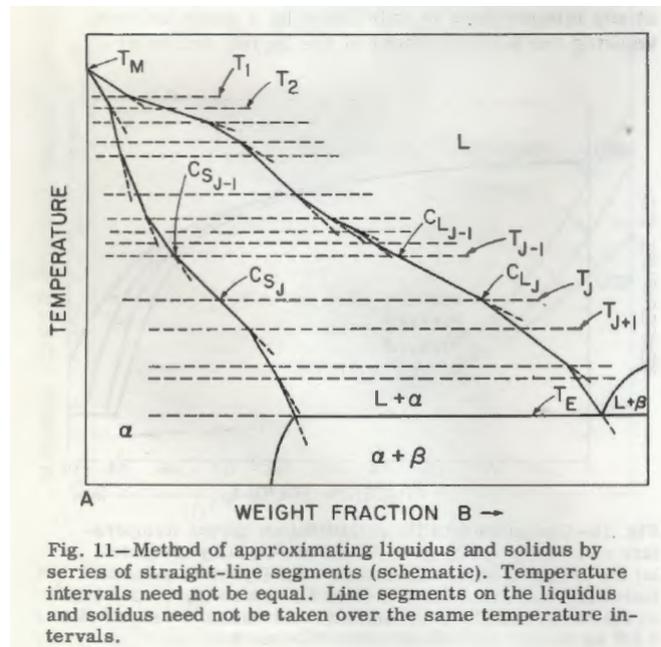


FIGURE 1.31 – Approximation des pentes de liquidus et solidus par une série de segments (Source : [Brody, 1965])

Brody fournit ainsi une expression de la fraction solide exprimée comme suit :

$$f_s = \frac{1}{1 - \alpha(T)k} (1 - [1 - (1 - \alpha(T)kf_s)] \left[ \frac{T_f - T_{liq}}{T_f - T} \right]^{\frac{1 - \alpha(T)k}{1 - k}}) \quad (1.45)$$

avec pour approximation de  $\alpha(T)$  l'expression suivante:

$$\alpha(T) = \frac{2D}{L^2} e^{(-Q/RT)} \quad (1.46)$$

Ces expressions résolues par implémentation numérique constituent un modèle intermédiaire entre la solidification à l'équilibre et celle très rapide de Scheil-Gulliver. Elle tend vers l'une ou l'autre selon le nombre de Fourier (Figure 1.32).

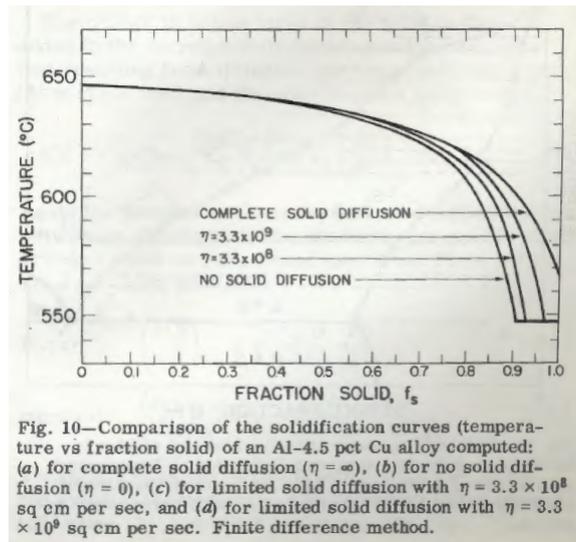


FIGURE 1.32 – Tracé de différents modèles analytiques de fraction solide pour un alliage eutectique (Source : [Brody, 1965])

Nous constatons que tous les modèles décrivent une fraction solide qui rejoint 1 à la température eutectique. Cela est très naturel dans le cas d'un alliage binaire, toutefois dans notre cas, nous travaillons avec un alliage non linéaire et surtout multi-composants, de telle manière que la fraction solide ne rejoint pas la valeur 1 de manière isotherme. Ces modèles ne conviennent donc pas pour bien approximer la courbe de fraction solide via une méthode analytique. Ceci nous invite à approfondir notre connaissance de la fraction solide afin de mieux modéliser la libération de la chaleur latente de fusion. La partie 2 fera une large place aux méthodes numériques de modélisation telle que la capacité calorifique apparente ou les méthodes enthalpiques.

Nous pouvons ici tracer la fraction solide donnée par le logiciel JMatPro et celle calculée à partir des modèles analytiques, en particulier les modèles de Scheil-Gulliver et des segments inverses. Les méthodes des segments inverses, de Scheil-Gulliver et de Back Diffusion utilisent un coefficient de partition égal à 0,13 et une température de liquidus égale à 613°C. Les modèles Brody-Flemings avec  $Fo_s = 0$  est confondu avec Scheil-Gulliver ainsi que l' "Advanced Brody Flemings" (hypothèse de solidification rapide).

Nous observons que les modèles analytiques sont assez proches pour des températures au delà du liquidus. Toutefois, nous constatons deux différences. La première est que la température de l'eutectique n'est pas la même pour les deux modèles (570°C pour les modèles analytiques et 575°C pour JMatPro). La seconde est que le logiciel prédit une fraction solide qui évolue en courbe raide au dessous de l'eutectique, alors que les modèles analytiques prévoient un passage de  $f_s = 0,55$  à 1 de manière isotherme.

Ceci s'explique par le fait que les modèles analytiques considèrent un alliage binaire, alors que JMatPro considère un alliage ternaire (et peut être même plus que ternaire). Ainsi, il est normal de ne pas avoir les mêmes courbes étant donné qu'il ne s'agit pas des mêmes physiques. Un alliage ternaire présentera un eutectique ternaire, d'où la croissance en courbe raide jusque  $f_s = 0,8$ , puis une inclinaison.

## 1.7 Conclusion du chapitre

Au cours de ce premier chapitre, nous avons détaillé les contextes et objectifs industriels de cette thèse, les variables thermodynamiques du changement de phase comme l'enthalpie et les propriétés matériaux nécessaires à la modélisation du changement de phase ( la masse volumique et la capacité calorifique d'une part, la conductivité d'autre part et enfin la chaleur latente de fusion et la fraction solide (notamment les différents modèles analytiques) pour prendre en compte la solidification. Maintenant que les bases de la solidification sont posées, tournons nous vers la modélisation et la résolution des équations de la chaleur par méthodes numérique, cet aspect est un point central de cette thèse d'un point de vue

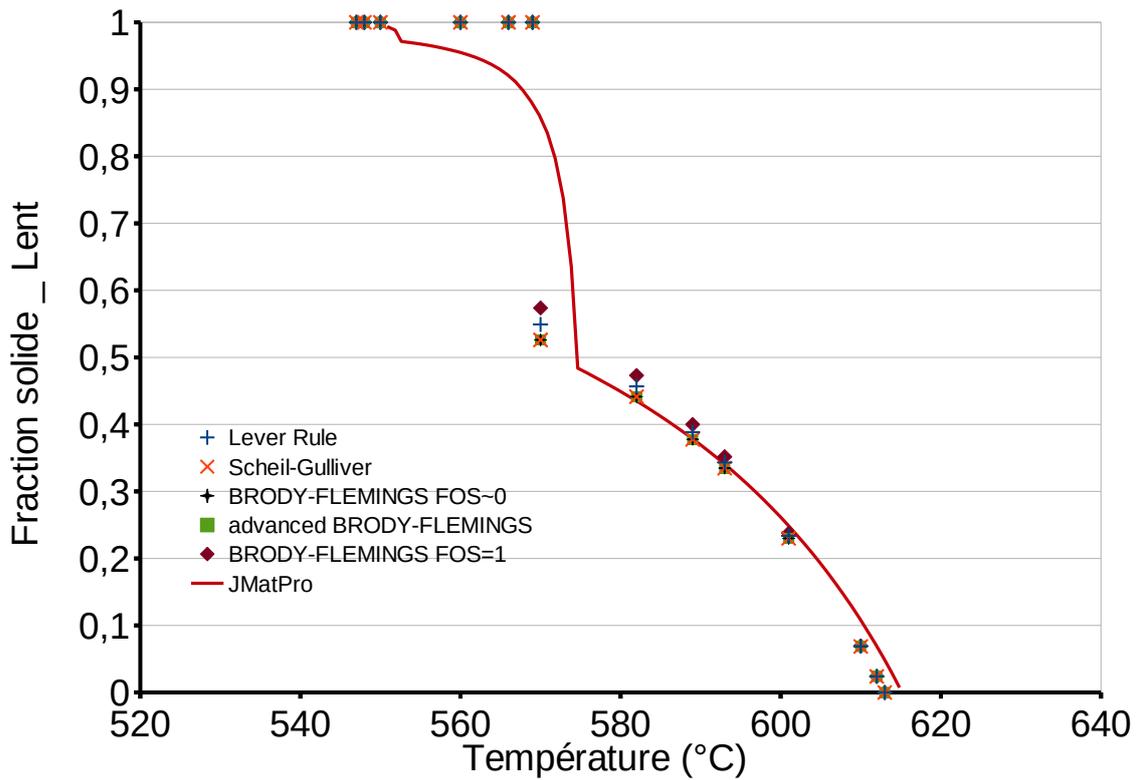


TABLE 1 – Comparaison des courbes de fraction solide obtenues par le logiciel JMatPro et les modèles analytiques

académique. En effet, aucun modèle analytique de solidification n'est adapté aux propriétés matériaux telles que décrites dans cette présente partie. De plus, la prise en compte du temps de calcul est un élément fondamental d'un point de vue industriel qui nous amène à nous tourner vers les méthodes de réduction de modèles.

### Points clés du chapitre

- Bases des procédés de mise en forme de la métallurgie et du changement de phase, à l'état liquide, semi-solide et solide.
- Établissement thermodynamique de l'équation de la chaleur sur la base du premier principe de la thermodynamique et en considérant une pression atmosphérique ainsi qu'une masse volumique constantes.
- Présentation des modèles analytiques de microségrégation qui amènent à une expression de la fraction solide en fonction de la température



# **Modélisation de la thermique non linéaire**

## Deuxième partie

# Modélisation de la thermique non linéaire

L'équation de la chaleur est largement utilisée et reconnue pour sa simplicité, en particulier sous sa forme stationnaire de l'équation de Poisson. Les développements apportés dans cette partie montreront d'une part que cette équation n'est pas aussi simple qu'il est d'accoutumé de le dire dès lors que l'on prend en compte des propriétés matériaux non linéaires, d'autre part que les méthodes de résolution classiques, dont beaucoup se satisfont, sont rapidement mises en défaut en terme de temps de calcul par rapport aux méthodes de réduction de modèles qui sont certes nouvelles mais particulièrement prometteuses.

Il sera question dans cette partie d'une modélisation de l'équation de la chaleur avec une formulation en température exclusivement et de son pendant en réduction de modèle avec la PGD. Dans les deux cas, nous ferons appel à des propriétés matériaux non linéaires et observerons la manière de les mettre en place, avec les difficultés qui leurs incombent.

## 2 Modélisation de la thermique non-linéaire sans chaleur latente

### 2.1 Équation de la chaleur

#### 2.1.1 Thermodynamique et propriétés matériaux

Nous avons développé, dans la partie précédente, le premier principe de la thermodynamique qui nous a permis d'introduire l'enthalpie ainsi que les propriétés matériaux de l'alliage que nous allons utiliser dans tout ce manuscrit, relatif à l'alliage AlSi7Mg. Les propriétés matériaux détaillées sont la masse volumique et la chaleur latente que nous considérerons constantes également (comme présenté en partie 1, notamment pour vérifier la conservation de la masse), ainsi que la conductivité thermique, la capacité calorifique et de fraction solide, toutes trois fonction de la température.

Ces propriétés matériaux sont issues du logiciel JMATPRO [JMatPro, 2014]. Il permet l'obtention des propriétés matériaux, sur la base de calculs thermodynamiques et cinétiques. Des travaux expérimentaux ont été conduits pour le développement de ce logiciel [Saunders et al., 2003, Guo et al., 2009, Guo et al., 2013, Belsito, 2014]. Ceci de telle manière qu'en précisant la nature et les quantités d'éléments atomiques utilisés, il est possible de déduire les propriétés matériaux pour tous types d'alliages.

Ces propriétés matériaux nous seront nécessaires comme coefficients de l'équation de la chaleur mixte, exprimée en enthalpie et en température que nous allons introduire immédiatement.

Il est important de préciser ici que cette partie est dédiée aux propriétés matériaux non linéaire. Ceci de telle façon que la non linéarité ne proviendra que des matériaux. Concernant le changement de phase et la libération de la chaleur latente de fusion, celle-ci sera traitée en partie 3.

#### 2.1.2 Equation de la chaleur mixte en température et enthalpie

L'expression locale de l'équation de la chaleur (équation 1.11) est proposée avec les termes d'enthalpie et de température, ce qui lui a d'ailleurs valu la dénomination de « gradient d'enthalpie » ou de « diffusion enthalpique » par certains auteurs [Pham, 1985, Pham, 1995, Eyres et al., 1946, Mundim et al., 1989]. Il s'agit là d'une équation d'équilibre à deux inconnues  $(h, T)$ , équation différentielle de premier ordre aux dérivées partielles (Equation 2.1).

$$\rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot [k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (2.1)$$

avec les fonctions  $h : \Omega \times ]0; t_f[ \rightarrow \mathbb{R}$  et  $T : \Omega \times ]0; t_f[ \rightarrow \mathbb{R}$   
 $(\mathbf{x}, t) \mapsto h(\mathbf{x}, t)$  et  $(\mathbf{x}, t) \mapsto T(\mathbf{x}, t)$ .

Où  $\mathbf{x}$  est l'espace discrétisé,  $t$  le temps,  $t_f$  est le temps final de la simulation et  $\Omega$  le domaine de simulation.

Les conditions aux limites de cette équation sont les suivantes. Considérons un contour  $\partial\Omega$  tel qu'il existe deux domaines  $\Gamma_C$  et  $\Gamma_D$  sur lesquels sont respectivement appliqués un flux de type Cauchy convectif et une température de type Dirichlet, température imposée.

$$\begin{aligned} t &\in [0, t_f] \\ \mathbf{x} &\in \Omega \\ \Gamma_C \cup \Gamma_D &= \partial\Omega \\ \Gamma_C \cap \Gamma_D &= \emptyset \\ \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{n} &= h_c(T - T_{ext}) \text{ sur } \Gamma_C \\ T(\mathbf{x}, t) &= T_D(\mathbf{x}, t) \text{ sur } \Gamma_D \end{aligned}$$

Avec  $h_c$  le coefficient d'échange convectif entre le milieu étudié et le milieu ambiant de température  $T_{ext}$ .

Nous restreignons notre étude aux cas où les conditions aux limites ainsi que le coefficient convectif  $h_c$  sont constants dans le temps.

Par ailleurs, les conditions initiales sont telles que :

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x})$$

Il est nécessaire d'avoir une compatibilité entre la condition initiale et aux limites sur les bords de Dirichlet, c'est à dire  $T_0(\mathbf{x}) = T_D(\mathbf{x}, 0)$  sur  $\Gamma_D$ .

L'équation proposée repose sur l'enthalpie et la température qui sont reliées par les propriétés matériaux (Equation 1.16). Compte tenu des relations entre l'enthalpie, la température, la capacité calorifique et la fraction solide précédemment développés, nous pouvons reformuler l'équation de la chaleur, cette fois-ci en température uniquement.

### 2.1.3 Equation de la chaleur en température

Sur la base de la partie précédente (Equation 1.17), nous avons montré qu'à partir de l'équation mixte de la chaleur (Equation 2.1), il est possible d'identifier une seconde manière d'exprimer l'équation de la chaleur, uniquement en température. Il s'agit là de l'expression la plus connue et la plus largement utilisée<sup>23</sup>. Elle trouve son origine<sup>24</sup>, chez Joseph Fourier [Fourier, 1822], qui l'a développé concomitamment aux travaux de Lamé et Clapeyron [Lamé, 1831, Rubinshtein, 1971, Vuik, 1993, Kholpanov et al., 2003] :

$$\rho c_p(T(\mathbf{x}, t)) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad (2.2)$$

Nous observons que chaque terme de l'équation est affecté de coefficients matériaux non linéaires qui dépendent de la température.

Dans le cas où toutes les propriétés matériaux sont constantes, l'expression est simplifiée<sup>25</sup>.

23. Ceci pour la raison que l'inconnue est la température (qui est l'objectif habituel recherché).

24. En particulier l'expression de l'équation sous la forme :  $\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ .

25. Il est habituel de les regrouper sous la forme d'un coefficient de diffusivité  $D$  qui est défini comme le rapport suivant et s'exprime en  $m^2/s$  :

$$D = \frac{k}{\rho c_p} \quad (2.3)$$

Dès lors, l'équation de la chaleur s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla \cdot (\nabla T) \quad (2.4)$$

Cette formulation n'est pas adaptée à notre cas pour la raison que la conductivité thermique est fonction de la température, il est donc impossible de la « sortir » de la divergence.

## 2.2 Méthode de référence de résolution

Afin de comparer les résultats de nos méthodes numériques, il est nécessaire d'établir une méthode de référence. Celle-ci nous permettra d'évaluer nos résultats, d'un point de vue précision mais également temps des calculs. Cette méthode de résolution a été validée à l'aide du logiciel de simulation de fonderie QuikCast (ESI). Cette méthode de résolution a fait l'objet d'un codage attentif et optimisé de telle sorte qu'elle soit efficace et donc significative en terme de résultat de gain de temps.

La méthode que nous allons utiliser consiste en une discrétisation spatiale Élément Finis

[Zienkiewicz et al., 1977, Onate et al., 1996, Zienkiewicz et al., 2013, Dhatt et al., 2013], en un schéma temporel implicite et en une résolution via une linéarisation par la méthode Newton-Raphson. Cette méthode est particulièrement répandue dans les codes de calcul, bien connue des numériciens et de manière générale accessible d'un point de vue codage.

Aussi, nous détaillerons dans l'ordre la formulation variationnelle de notre problème décrit précédemment, le schéma implicite employé, la discrétisation Élément Finis (FEM) et enfin la résolution-linéarisation par la méthode de Newton-Raphson (MNR).

De par les non linéarités matériaux, seules les méthodes numériques peuvent résoudre les équations. La prise en compte des matériaux non linéaires en fonction de la température a connu une succession d'améliorations :

1. depuis [Wilson and Nickell, 1966] à la fin des années 1960 qui résolvait une équation de conduction de la chaleur linéaire ;
2. début des années 1970, la conductivité thermique a été rendue fonction de la température par [Aguirre-Ramirez and Oden, 1973], il inclut également les flux convectifs ;
3. en 1979 [Lemmon, 1979] a utilisé la formulation enthalpique avec la conductivité thermique non linéaire ;
4. en 1982 [Rolph and Bathe, 1982], s'intéressent au transfert de chaleur et de fluide durant la solidification. Ce changement de phase les conduit à obtenir pour la première fois un gradient thermal discontinu.

### 2.2.1 Formulation variationnelle

A partir de l'équation locale continue exprimée en température uniquement (Equation 2.2), nous pouvons écrire cette équation multipliée par un champ virtuel  $T^*$ , intégrée sur le domaine  $\Omega$  :

$$\int_{\Omega} \rho c_p (T(\mathbf{x}, t)) \dot{T} T^* dV = + \int_{\Omega} \nabla \cdot (k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)) T^* dV \quad \forall T^* \quad (2.5)$$

Avec  $T^* \in \mathcal{J}_0^{adm}$ , l'ensemble des champs admissibles à 0 et défini comme suit :

$$\mathcal{J}^{adm} = \{T(\mathbf{x}, t) / T(\mathbf{x}, t) \text{ régulier et continu sur } \Omega \text{ et } T(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$$

Afin d'alléger les notations dans cette partie, nous définissons  $T = T(\mathbf{x}, t)$ . Après intégration par parties, nous pouvons exprimer :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (k(T) \nabla(T)) T^* dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot (k(T) \nabla(T) T^*) dV - \int_{\Omega} k(T) \nabla(T)^T \nabla(T^*) dV \quad (2.6)$$

Le premier terme de droite est converti en intégrale surfacique au moyen du théorème de flux-divergence Green-Ostrogradski :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (k(T) \nabla(T) T^*) dV = \int_{\partial\Omega} T^* k(T) \nabla(T) \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.7)$$

Ce qui permet d'introduire les conditions aux limites présentées en partie précédente, c'est à dire les différents flux appliqués sur les surfaces du solide :

$$\int_{\partial\Omega} T^* k(T) \nabla(T) \cdot \mathbf{n} dS = - \int_{\Gamma_c} T^* h_c T dS + \int_{\Gamma_c} T^* h_c T_{ext} dS + \int_{\Gamma_D} T^* k(T_D) \nabla(T_D) \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.8)$$

Puisque, par définition,  $T^* \in \mathcal{J}_0^{\text{adm}}$ , le dernier terme est nul et on obtient finalement la forme faible usuelle de l'équation de la chaleur :

$$\int_{\Omega} \rho c_p(T) \dot{T} T^* dV = - \int_{\Omega} k(T) \nabla(T)^T \nabla(T^*) dV - \int_{\Gamma_c} T^* h_c T dS + \int_{\Gamma_c} T^* h_c T_{\text{ext}} dS \quad (2.9)$$

## 2.2.2 Schéma temporel implicite

Il est maintenant question de définir le schéma temporel<sup>26</sup> que nous allons utiliser.

La résolution temporelle de l'équation 2.9 nécessite une discrétisation de type différence finie, appliqué sur l'intervalle d'étude  $[0, t_f]$ . Les pas de temps peuvent être fixes ou adaptatifs pour faciliter la convergence, l'intervalle entre deux pas de temps est noté  $\delta t$ . Lors de la résolution, nous recherchons le pas de temps  $t^{n+1} = t^n + \delta t$ . En terme de notation, nous considèrerons que :

$$\begin{aligned} T(\mathbf{x}, t^{n+1}) &= T^{n+1} \\ \dot{T}(\mathbf{x}, t^{n+1}) &= \dot{T}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Le schéma temporel implicite s'exprime de telle manière que  $\dot{T} = \frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T^{n+1} - T^n}{\delta t}$ ,  $n$  étant l'indice du dernier instant connu. La gestion des non-linéarités se fera de manière incrémentale implicite, ainsi les propriétés matériaux considérées seront  $(k(T^{n+1}), c_p(T^{n+1})...)$ .

Dès lors, la formulation variationnelle (Equation 2.9) devient :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho c_p(T^{n+1}) \frac{T^{n+1} - T^n}{\delta t} T^* dV &= - \int_{\Omega} k(T^{n+1}) \nabla(T^{n+1})^T \nabla(T^*) dV \\ &- \int_{\Gamma_c} T^* h_c T^{n+1} dS + \int_{\Gamma_c} T^* h_c T_{\text{ext}} dS \end{aligned} \quad (2.12)$$

soit, en réunissant à gauche les termes en  $T^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho c_p(T^{n+1}) \frac{T^{n+1}}{\delta t} T^* dV + \int_{\Gamma_c} T^* h_c T^{n+1} dS + \int_{\Omega} k(T^{n+1}) \nabla(T^{n+1})^T \nabla(T^*) dV &= \\ - \int_{\Omega} \rho c_p(T^{n+1}) \frac{T^n}{\delta t} T^* dV + \int_{\Gamma_c} T^* h_c T_{\text{ext}} dS \end{aligned} \quad (2.13)$$

En raison des coefficients matériaux, l'équation précédente (Equation 2.13) est non linéaire en  $T^{n+1}$ .

26. Avec la présentation du schéma temporel, nous devons utiliser deux indices ; relatifs aux boucles de linéarisation par la méthode Newton-Raphson (indice) et temporelle (exposant) :

$$T_{i:\text{Newton-Raphson}}^{n:\text{temps}} \quad (2.10)$$

### 2.2.3 Linéarisation et résolution par la méthode Newton-Raphson

La méthode de linéarisation de Newton-Raphson (NR) repose sur un développement limité à l'ordre 1 du résidu de l'équation 2.13 [Bergheau and Fortunier, 2013], à savoir :

$$r(T^{n+1}, T^*) = - \int_{\Omega} \rho c_p (T^{n+1}) T^{n+1} T^* dV - \delta t \int_{\Omega} k(T^{n+1}) \nabla(T^{n+1})^T \nabla(T^*) dV + \int_{\Omega} \rho c_p (T^{n+1}) T^n T^* dV - [\int_{\Gamma_c} T^* h_c T^{n+1} dS - \int_{\Gamma_c} T^* h_c T_{ext} dS] \delta t \quad (2.14)$$

Son développement limité à l'ordre 1 s'écrit, en notant  $i$  l'itération de Newton-Raphson :

$$r(T_{i+1}^{n+1}, T^*) = r(T_i^{n+1}, T^*) + \left( \frac{\partial r}{\partial T} \Big|_{T_i} \right) (T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}) + o(T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1})$$

La procédure de Newton Raphson impose que  $r(T_{i+1}) = 0$ , cela revient à exprimer  $T_{i+1}$  comme :

$$- \frac{\partial r}{\partial T} \Big|_{T_i} \delta T = r(T_i^{n+1}, T^*) \quad (2.15)$$

en définissant l'incrément de température  $\delta T = T_{i+1}^{n+1} - T_i^{n+1}$ . Sur cette base, nous définissons la tangente  $A_T$  comme :

$$A_T(T_i^{n+1}, T^*) = - \frac{\partial r(T_i^{n+1}, T^*)}{\partial T^{n+1}} \quad (2.16)$$

D'après la définition du résidu (Equation 2.14) on obtient alors (Equation 2.17) :

$$A_T(T_i^{n+1}, T^*) \delta T = \int_{\Omega} \rho c_p (T_i^{n+1}) \delta T T^* dV + \int_{\Omega} \rho c_p' (T_i^{n+1}) \delta T (T_i^{n+1} - T_i^n) T^* dV \quad (2.17)$$

$$+ \delta t \int_{\Omega} k'(T_i^{n+1}) \delta T \nabla(T_i^{n+1})^T \nabla(T^*) dV + \delta t \int_{\Omega} k(T_i^{n+1}) \nabla(\delta T)^T \nabla(T^*) dV + \delta t \int_{\Gamma_c} T^* h_c \delta T dS$$

Par ailleurs, les propriétés matériaux sont dérivées et notées  $c_p'$  et  $k'$ , dans la mesure où elles varient avec  $T$ .

### 2.2.4 Discrétisation Éléments finis

La méthode de référence que nous explicitons actuellement repose, comme la majorité des méthodes numériques<sup>27</sup>, sur la discrétisation de l'espace à l'aide d'un maillage.

Compte tenu du changement de phase, se pose la question du lien entre le maillage et la zone de changement de phase qui est mobile au cours du temps. Aussi, deux méthodes numériques concernant le maillage sont explicitées ci-après.

**Méthodes de suivi du front ou grille fixe** La méthode du "front tracking" consiste à remailler l'espace à chaque mouvement de l'interface liquide-solide. Ce qui implique un transfert/projection de champ de température de l'ancien au nouveau maillage. Il a été montré que pour un problème avec des propriétés matériaux fonction de la température, cette méthode permet de prendre en compte des interfaces ou des surfaces libres, lorsque cela n'est pas possible via les équations différentielles [Meyer, 1978]. La discrétisation du terme source, présentée dans la partie suivante ne peut pas être appliquée avec le suivi de front. Il est recommandé d'avoir une séparation distincte entre les deux phases pour appliquer cette

27. Il existe néanmoins des méthodes numériques sans maillage [Belytschko et al., 1996, Breitkopf et al., 2000]

méthode. De part cette dernière considération et au regard de l'existence d'une zone pâteuse entre les phases liquide et solide, cette méthode de suivi de front ne paraît pas adaptée pour les alliages.

La méthode à grille fixe (fixed grid) est proposée par de nombreux auteurs [Fox, 1973, Meyer, 1978, Pham, 1995] en raison du fait qu'elle permet de capter l'interface si le maillage est suffisamment fin et adapté à l'échelle des températures du changement de phase. De plus, cette méthode s'avère être facile d'implémentation, flexible et donne une bonne description de la phase pâteuse. Celle-ci contient implicitement les conditions de déplacement de l'interface liquide-solide via les équations aux dérivées partielles [Crivelli and Idelsohn, 1986]. Pour [G. Comini and Saro., 1989], le fait d'avoir des propriétés matériaux dépendantes de la température implique l'usage d'un maillage spatial suffisamment fin, de même que le pas de temps, afin de capter l'effet du changement de phase d'un nœud sur les autres nœuds alentours. Sans cela, l'auteur prévient qu'il y aura une perte d'énergie dans le système et conduira à des erreurs. La méthode à grille fixe est la plus en phase avec nos besoins, nous utiliserons donc cette méthode [Dantzig and Rappaz, 2009, Pham, 1995, Nedjar, 2002].

**Discrétisation Eléments Finis** Il s'agit maintenant de discrétiser spatialement la tangente (Equation 2.17) ainsi que le résidu de manière standard. Ceci est réalisé par une discrétisation Eléments Finis (EF) spatiaux dont les fonctions de formes sont notés  $N_k$  au nœud  $k$ .

La température est alors approximée comme :  $T(x, t) = \sum_k N_k(x)T_k(t)$ . Les valeurs  $T_k(t)$  sont les températures au nœud  $k$ , en fonction du temps. La sommation précédemment indiquée peut se traduire sous forme de produit scalaire de vecteurs notés en gras :  $T(x, t) = \mathbf{N}(x)^T \mathbf{T}(t)$ . Chacune des variables est approximée de cette manière (Equations 2.18).

$$\begin{aligned} T(x, t) &= \mathbf{N}(x)^T \mathbf{T}(t) & \nabla T(x, t) &= \nabla(\mathbf{N}^T) \mathbf{T}(t) \\ T(x, t)^* &= \mathbf{N}(x)^T \mathbf{T}^* & \nabla(\delta T)(x, t) &= \nabla(\mathbf{N}^T) \delta \mathbf{T}(t) \\ \delta T &= \mathbf{N}^T(x) \delta \mathbf{T} \\ k &= \mathbf{N}^T \mathbf{k} & \rho c_p &= \mathbf{N}^T \rho c_p \end{aligned} \quad (2.18)$$

Par ailleurs, sont définis les matrices et vecteurs usuels, assemblés sur les volumes élémentaires  $\Omega_{el}$  :

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}_{el}] &= \int_{\Omega_{el}} \rho c_p(T) \mathbf{N} \mathbf{N}^T dV & [\mathbf{M}] &= \sum_{el} [\mathbf{M}_{el}] \\ [\mathbf{K}_{C_{el}}] &= \int_{\Gamma_C} h_c \mathbf{N} \mathbf{N}^T dS & [\mathbf{K}_C] &= \sum_{el} [\mathbf{K}_{C_{el}}] \\ [\mathbf{K}_{el}] &= \int_{\Omega_{el}} k(T) \nabla(\mathbf{N}^T)^T \nabla(\mathbf{N}^T) dV & [\mathbf{K}] &= \sum_{el} [\mathbf{K}_{el}] \end{aligned} \quad (2.19)$$

### 2.2.5 Discrétisation du résidu

A partir de l'équation du résidu (Equation 2.14), et des définitions précédentes (Equations 2.18 et 2.19) le résidu s'écrit sous forme discrète :

$$\begin{aligned} r(\mathbf{T}, \mathbf{T}^*) &= -\mathbf{T}^{*T} ([\mathbf{M}] + \delta t([\mathbf{K}_C] + [\mathbf{K}])) \mathbf{T} \\ &+ \mathbf{T}^{*T} ([\mathbf{M}] \mathbf{T}^n + \delta t[\mathbf{K}_C] \mathbf{T}_{ext}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Nous pouvons alors poser (valable  $\forall \mathbf{T}^*$ ) :

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}] &= [\mathbf{M}] + \delta t[\mathbf{K}_C] + \delta t[\mathbf{K}] \\ \mathbf{b} &= [\mathbf{M}] \mathbf{T}^n + \delta t[\mathbf{K}_C] \mathbf{T}_{ext} \\ \mathbf{r} &= \mathbf{b} - [\mathbf{A}] \mathbf{T} \end{aligned}$$

On notera que, en raison de la dépendance des matériaux à la température, les matrices  $[\mathbf{K}]$  et  $[\mathbf{M}]$  dépendent de  $\mathbf{T}$ , donc  $[\mathbf{A}]$  et  $\mathbf{b}$  aussi.

## 2.2.6 Discrétisation de la matrice tangente

De la même manière que précédemment, la matrice tangente doit être discrétisée. Toutefois, la différence est qu'il y aura ici des matrices dérivées qu'il nous faut maintenant définir (Equation 2.21) :

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}'_{el}] &= \int_{\Omega_{el}} (\rho c_p)'(T) \mathbf{N} \mathbf{N}^T (T - T^n) \mathbf{N}^T dV & [\mathbf{M}'] &= \sum_{el} [\mathbf{M}'_{el}] \\ [\mathbf{K}'_{el}] &= \int_{\Omega_{el}} k'(T) \nabla(\mathbf{N}^T)^T \nabla(\mathbf{N}^T) T dV & [\mathbf{K}'] &= \sum_{el} [\mathbf{K}'_{el}] \end{aligned} \quad (2.21)$$

En utilisant les discrétisations (Equations 2.19 et 2.21) appliquées à la formulation de la matrice tangente (Equation 2.17), la formulation devient :

$$[\mathbf{A}_T] = [\mathbf{M}] + [\mathbf{M}'] + \delta t([\mathbf{K}] + [\mathbf{K}_C]) + \delta t([\mathbf{K}']) = [\mathbf{A}] + [\mathbf{M}'] + \delta t[\mathbf{K}'] \quad (2.22)$$

Ainsi, résoudre la formulation faible (Equation 2.9) revient à résoudre itérativement les deux sous-équations qui nous fournissent l'incrément de température résultat :

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}_T(T_i)] \delta T = \mathbf{r}(T_i) &\iff \delta T = [\mathbf{A}(T_i)]^{-1} \mathbf{r}(T_i) \\ T_{i+1} &= T_i + \delta T \end{aligned} \quad (2.23)$$

Nous avons établi notre méthode de référence. Bien qu'elle soit classique, cela nous a permis d'introduire les notions de base qui nous permettent maintenant de nous tourner vers une méthode de réduction de modèle, la "Proper General Decomposition (PGD)" qui permet un calcul de l'ensemble du champ résultat (tous les degrés de liberté spatiaux à tous les pas de temps) par approximation modale.

## 2.3 Résolution par réduction de modèles *a priori* : PGD

### 2.3.1 Bibliographie - Algorithme

La méthode de référence présentée offre un intérêt dans le cas des simulation 1D, 2D et 3D, ceci jusque plusieurs millions de degrés de libertés. Toutefois, les temps de calculs deviennent prohibitifs (24h en moyenne pour moins de 10 millions d'éléments) et difficilement acceptables en industrie. Plus il y aura de paramètres inconnus à l'équation : l'espace, le temps, la température, la pression, la vitesse... sans parler des propriétés matériaux... ( $x, y, z, t, T, p, v, \dots$ ), plus le nombre de mailles à calculer sera important et plus les méthodes classiques auront de difficultés à résoudre les modèles. D'autant plus si les pas de temps deviennent très petits pour assurer la stabilité du calcul...

C'est là que les méthodes de réduction de modèle prennent leur place et en particulier la "Proper General Decomposition PGD" [Chinesta et al., 2005]. Il est à noter que la preuve de l'existence et ou de la convergence de la méthode PGD n'est pas encore faite<sup>28</sup>, néanmoins, d'un point de vue empirique sa convergence est constatée sur les équations dont la solution peut s'écrire sous forme séparable [Nouy, 2010, Ammar et al., 2006, Chinesta et al., 2005].

La méthode PGD repose sur la recherche d'un champ solution sous l'hypothèse de variables séparées [Chinesta et al., 2011]. Dans notre cas, les variables seront l'espace ( $\mathbf{x}$ ) et le temps ( $t$ ). Ainsi, nous pouvons exprimer un champ de température  $T$  comme une somme de produits de modes spatiaux et d'amplitudes temporelles. A chaque nouvel enrichissement, un produit (mode, amplitude) est ajouté à la somme. Théoriquement, plus il y aura de modes, meilleur sera le champ solution<sup>29</sup>. L'esprit de la méthode n'est pas de prédire la réponse à un modèle unique mais plutôt d'une famille de modèles. Dans cette thèse nous ne traiterons cependant que de la résolution d'un seul modèle.

28. Dans le cas de l'équation de Poisson stationnaire linéaire, la convergence est démontrée [Ammar et al., 2010, Amine Ammar, 2010]. Dans le cas de l'équation de Poisson instationnaire linéaire, la convergence est montrée empiriquement, des exemples de convergence existent [Dumon, 2011]. Dans tous les autres cas non linéaires, la convergence est présentée sous certaines conditions, notamment de séparabilité du terme source [Bonithon et al., 2010, Nouy, 2010, Pruliere et al., 2010].

29. Cela est vrai dans la mesure où les modes sont optimaux et n'apportent que peu de bruit numérique. La POD nous informe que dans une résolution optimale, le nombre maximum de modes utiles est égal au nombre de degrés de liberté temporels.

La résolution d'équations différentielles par la méthode de séparation de variables est connue et pratiquée depuis la fin du XVIIème siècle (Huygens 1629-1695 [Guenther et al., 2014], Leibniz 1646-1716 [Leibniz and Parmentier, 1989] et Newton 1642-1727 [Lacroix, 1819]), sa plus illustre application est la séparation de variables en séries de Fourier. Dans son application à la modélisation, elle a déjà fait l'objet de recherches à propos de la chimie quantique<sup>30</sup>. Elle consiste à exprimer les inconnues sous forme de deux fonctions dépendantes chacune d'une seule variable, lorsque cela est possible [Kreyszig and Norminton, 2001, Ammar et al., 2006, Ammar et al., 2007, Ammar et al., 2010].

La méthode "Proper General Decomposition (PGD)" repose sur ce principe, à ceci près qu'une somme de fonctions séparables est effectuée. Il s'agit dans notre cas de rechercher le champ solution  $T(\mathbf{x}, t)$ . Pour chaque enrichissement, nous recherchons deux fonctions  $\varphi_i(\mathbf{x})$  et  $\alpha_i(t)$ <sup>31</sup> tels que leur produit soit homogène à un champ de température<sup>32</sup> et que la somme des modes ainsi obtenus tende vers le champ solution  $T$  recherché [Chinesta et al., 2011, Ladeveze et al., 2010, Ladeveze and Chamoin, 2011]. Une approximation du champ résultat  $T$ , avec  $m$  modes s'exprimera ainsi (Equation 2.24) :

$$T^m(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \varphi_i(\mathbf{x})\alpha_i(t) \quad (2.24)$$

Dans le cas où la recherche des couples spatio-temporels est efficace, alors plus il y a de modes calculés et plus la convergence vers la bonne solution s'effectuera. C'est à dire que dès les premiers modes, l'évolution globale  $\forall(\mathbf{x}, t)$  est connue avec une certaine erreur. Il se dégage immédiatement tout l'intérêt de la méthode appliquée aux cas industriels.

Dès les années 1980 une méthode non incrémentale en temps, utilisant les variables séparées a été développées par Pierre Ladevèze et nommée LATIN pour Large Time Increment"  
[Ladeveze and Dureisseix, 1999].

Cette méthode se compose d'un découplage du problème entre une considération globale, linéaire et une autre locale, non linéaire. Une séparation de variables est réalisée afin d'améliorer la résolution du problème global linéaire [Bonithon et al., 2010]. Une approximation radiale de la fonction solution qui dépend de l'espace et du temps et qui est initialement inconnue est réalisée. La convergence de cette méthode a été prouvée par [Ladeveze, 1989].

Nous pouvons aussi faire un parallèle avec la méthode POD *a posteriori* (Proper Order Decomposition) qui "extraie" des modes et amplitudes à partir d'un champ résultat connu<sup>33</sup>. La PGD recherche également ces modes, mais directement à partir de l'équation variationnelle et non pas du champ solution. La PGD n'obtient jamais les mêmes modes que la POD *a posteriori*.

Il se pose maintenant la question de la recherche des couples  $\varphi_i(\mathbf{x})$  et  $\alpha_i(t)$ . Nous considèrerons que le couple  $\varphi_m(\mathbf{x})$  et  $\alpha_m(t)$  est convergé, c'est à dire qu'il est satisfaisant au regard d'un critère que nous détaillerons plus loin. Nous recherchons alors le meilleur couple  $\varphi_{m+1}(\mathbf{x})$  et  $\alpha_{m+1}(t)$  tels que :

$$T^{m+1} = \left( \sum_{j=1}^m \varphi_j(\mathbf{x})\alpha_j(t) \right) + \varphi_{m+1}(\mathbf{x})\alpha_{m+1}(t)$$

Pour ce faire, nous posons  $\varphi_{m+1}(\mathbf{x}) = R(\mathbf{x})$  et  $\alpha_{m+1}(t) = S(t)$  afin de faciliter les écritures. Il nous faudra écrire une formulation variationnelle qui présentera une intégrale en espace, assez habituelle, mais également une intégrale en temps, ce qui l'est déjà moins. En effet, dans la méthode de référence, décrite précédemment, le temps est discrétisé, avec souvent un pas de temps adaptatif, de telle manière qu'à

30. Notamment pour le modèle Hartree-Fock.

31.  $i$  est le mode actuellement recherché

32. Il est possible de normer  $\varphi$  de telle manière que  $\alpha$  soit directement homogène à un champ de température. Cela facilite l'exploitation du code.

33. La POD fournit la matrice  $\psi$  des vecteurs propres et la matrice  $\alpha$  de leurs amplitudes. Ceci de telle manière que le champ reconstruit à partir de la POD *a posteriori* s'exprime comme  $[T_{\text{approx}}] = \left( \sum_{i=1}^m \psi_i \alpha_i \right) + [T_m]$ , avec  $[T_m]$  la matrice du vecteur moyen extrait du champ d'entrée.

chaque pas de temps, l'équation d'équilibre est résolue. Dans le cadre de la PGD, le temps devra être discrétisé *a priori*, tout comme la discrétisation spatiale, ce qui peut poser des problèmes de convergence<sup>34</sup>.

Pour illustrer la méthode PGD, l'algorithme de résolution est présenté ci-après. Cet algorithme sera enrichi au fur et à mesure de la présentation de la méthode. La méthode comprend en entrée le champ  $T^0$ , une recherche du meilleur couple (R,S) qui sera décrit prochainement, une mise à jour du champ recherché  $T^{m+1}$  et un test de convergence de l'enrichissement. Ce processus est décrit dans l'algorithme suivant (Algorithme 1).

---

**Algorithme 1** Algorithme de la méthode PGD - enrichissement

---

$T^0$ ;

**Boucle** en enrichissement  $m$

**Recherche** du couple (RS)

$$T^{m+1} = T^m + RS$$

**Test** de convergence sur  $T_{m+1}$

$T = T^{m+1}$ ;

---

Bognet en 2011 [Bognet et al., 2011] utilise cette méthode afin d'évaluer les contraintes thermoélastiques linéaires dans une pièce composite. Pour ce faire, il réalise un couplage simple entre thermique et déformation. Le champ de température est d'abord calculé puis la déformation (dilatation) associée est évaluée. Il réduit à cette occasion un problème 3D de plis composites en une résolution de problèmes 1D pour l'épaisseur et 2D pour le plan. Il précise que le maillage doit également être sous forme séparée. Pour réaliser cette résolution, les  $m$  premiers modes sont réputés connus et il est recherché le mode suivant [Chinesta et al., 2010]. De part les deux types de modèles, 1D et 2D, l'auteur obtient un problème non linéaire avec une fonction  $a(x, y)$  pour la description du plan et  $b(z)$  pour l'épaisseur.

En 2010 Bonithon [Bonithon et al., 2010] applique une méthode des éléments de frontière (BEM) associé à la méthode PGD. La méthode BEM est pratique pour les équations dont le noyau est connu, comme l'équation de la chaleur. L'auteur propose de considérer une séparation de variable de la solution et d'utiliser la méthode BEM pour calculer les variations spatiales en régime stationnaire alors que la partie temporelle pourra être calculée de manière classique via une équation différentielle de premier ordre et par exemple un schéma en différences finies.

Ghnatios en 2012 [Ghnatios et al., 2012] propose d'utiliser la PGD avec la méthode de décision en temps réel DDDAS pour Dynamic Data Driven Application System. L'auteur prend l'exemple de la résolution de l'équation de la chaleur mais sans que l'on connaisse la valeur de la conductivité thermique. Dès lors trois options s'offrent à lui : mesurer la conductivité et faire la simulation, estimer de nombreuses valeurs et faire autant de simulations (proche de la méthode de Monte-Carlo) ou enfin, via la PGD, obtenir le résultat pour de nombreuses valeurs en une seule simulation. C'est évidemment cette dernière solution qui est envisagée ici en ajoutant simplement le paramètre  $k$  de conductivité thermique aux autres paramètres d'espace et de temps. Cette idée peut être étendue au terme source, aux conditions initiales et aux limites... Au plus le nombre de paramètres sera grand, au plus la PGD prendra son utilité. Dans l'exemple proposé par l'auteur, les paramètres à déterminer sont des températures imposées aux limites du modèle.

Prulière en 2013 [Pruliere et al., 2013] soulève la question de la séparabilité du champ solution. En effet, si ce champ ne peut pas être exprimé sous forme de variables séparées, alors la PGD ne convergera

---

34. Dans la mesure où nous ignorons quelle sera la meilleure discrétisation temporelle *a priori*, nous sommes contraint d'utiliser un pas de temps défini *a priori*. Toutefois, des recherches ont porté sur la possibilité d'établir un pas de temps variable sur la méthode PGD [Nguyen, 2012]. Si celui-ci est trop large alors il pourra se produire des difficultés de convergence. Si celui-ci est trop petit, le calcul est inutilement surchargé. Il n'existe pas à notre connaissance de méthode pour résoudre ce problème, sauf peut être à réaliser un calcul de référence, avec pas de temps adaptatif, de sauvegarder les pas de temps convergés et de les utiliser pour faire un autre calcul, proche du précédent par une méthode de réduction de modèles.

jamais vers un champ séparé. Pour connaître la séparabilité du champ solution, l’auteur propose de résoudre une première fois le problème de manière classique et d’appliquer ensuite une séparation de variable via la méthode POD. Si le niveau de coupure est élevé, c’est à dire que peu de modes suffisent à décrire le phénomène, alors le champ est réputé séparable. Les méthodes PGD pourront être employées avec succès. Prulière en 2010 [Pruliere et al., 2010] indique d’ailleurs que si le champ recherché n’était pas séparable, alors l’enrichissement conduira à introduire autant de modes que de degrés de liberté.

Heyberger en 2013 [Heyberger et al., 2013] indique qu’à la différence de la POD, la PGD ne nécessite pas l’orthogonalité des fonctions spatiales. Dans son article l’auteur propose la recherche par la méthode LATIN-PGD de deux propriétés matériaux, d’une part  $\rho c_p$  (coefficient du terme instationnaire) et d’autre part  $k$  (coefficient du terme stationnaire), considérées comme des paramètres. Leurs domaines d’existence sont alors définis.

Nouy en 2010 [Nouy, 2010] a proposé différentes formulations de la PGD, basées sur une formulation de Galerkin ou de minimisation du résidu. Egalement, il a réalisé une séparation de variables progressives ou simultanées. Cette dernière semble plus efficace. La formulation PGD Minimax introduite peut être comprise comme une méthode de réduction de modèle de type Petrov-Galerkin, ce qui garde l’avantage de vitesse de calcul de la méthode de Galerkin et améliore la convergence. L’auteur montre que la décomposition progressive via la méthode de Galerkin offre une meilleure convergence que via la méthode de minimisation du résidu (bien que cette dernière soit plus robuste mais nécessite plus de temps de calcul). Enfin, l’auteur note que la méthode Minimax s’approche de la solution proposée par la POD dans certains cas.

### 2.3.2 Algorithme de résolution de $R(x)$ et $S(t)$

Pour identifier les couples de  $R(x)$  et  $S(t)$  deux méthodes sont possibles ; la minimisation du résidu et la méthode du point fixe.

**Par la méthode de minimisation du résidu** La minimisation du résidu est une méthode de résolution par ”optimisation”. Il s’agit de définir une fonction coût ” $J$ ”, fonction de  $R$  et  $S$ , qu’il faut minimiser. Elle présente néanmoins des inconvénients. Elle peut nécessiter plus de temps de calcul pour converger. Cette écriture peut être implémentée à moindre coût dans le cadre d’un schéma discrétisé ou algébrique, mais beaucoup plus difficilement dans un contexte continu (besoin d’un meilleur raffinement du maillage pour s’assurer d’une bonne convergence et de l’unicité de la solution). Une norme  $L_2$  naturelle ne semble pas être adaptée

[Nouy, 2010, Billaud-Friess et al., 2014].

La fonction  $J(R, S)$  à minimiser s’écrira (Equation 2.25) :

$$J(R, S) = \frac{1}{2} \|r(R, S)\|^2 \quad (2.25)$$

Avec  $r$  est l’expression du résidu déjà présenté précédemment.

Plus de détails sont disponibles dans les articles [Nouy, 2010, Falco et al., 2013, Billaud-Friess et al., 2014]. De par le temps de calcul supérieur et le choix délicat du critère de sortie, nous faisons le choix d’utiliser la méthode du point fixe qui est d’ailleurs largement diffusée dans la communauté.

**Par la méthode du point fixe** La méthode du point fixe<sup>35</sup> consiste à résoudre un système de deux équations et deux inconnues en fixant successivement une inconnue pour trouver l’autre. Il s’agit d’une méthode itérative à directions alternées [Chinesta et al., 2013]<sup>36</sup>. Il est recherché le meilleur couple d’in-

35. La convergence de cet algorithme de point fixe appliqué à la résolution du système d’équations de la PGD est connue pour l’équation de Poisson. Pour l’équation de la chaleur, cela est déjà moins clair et pour des propriétés matériaux non linéaires, beaucoup reste à faire.

36. En raison de la non linéarité des matériaux, toutes les intégrales doivent être recalculées systématiquement à chaque itération du point fixe, contrairement à l’approche habituelle utilisée sur des problèmes linéaires [Ammar et al., 2012, Boucinha et al., 2013].

connues (R, S) en fixant successivement R pour trouver S et réciproquement (Algorithme 2). Cette méthode sera décrite par l'exemple tout au long de cette section.

---

**Algorithme 2** Algorithme complet de la méthode PGD avec résolution du couple (R,S) par la méthode du Point Fixe

---

$T^0$

**Boucle** en enrichissement m

Initialisation  $S_0$  connue

**Boucle** en itération n de point fixe (Recherche des couples  $R(x)$  et  $S(t)$ )

**Recherche**  $R_n$  connaissant  $S_{n-1}$

**Recherche** de  $S_n$  en fonction de  $R_n$

**Test** de convergence du point fixe couple  $(R_n, S_n)$  ; Si OUI alors  $R = R_n$  et  $S = S_n$

$T^{m+1} = T^m + RS$

**Test** de convergence de l'enrichissement

$T = T^{m+1}$

---

### 2.3.3 Formulation variationnelle

La formulation variationnelle de l'équation de la chaleur exprimée en température (Equation 2.5) est exprimée ci-dessous :

$$\int_{\Omega t} \int_{\Omega} \rho c_p(T) \dot{T} T^* dV dt = - \int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T) \nabla(T)^T \nabla(T^*) dV dt - \int_{\Omega t} \int_{\Gamma_C} T^* h_c T dS dt + \int_{\Omega t} \int_{\Gamma_C} T^* h_c T_{ext} dS dt \quad (2.26)$$

Nous réalisons une projection de Galerkin avec un champ  $T^*$  admissible à 0 en espace et en temps. On notera que la non linéarité matériau est gérée de manière incrémentale par l'enrichissement, c'est à dire que l'on utilise les propriétés matériaux du mode précédent, par exemple pour la conductivité thermique :  $k(T^m)$  et non pas  $k(T^{m+1})$ . Ce point est développé juste après. Les propriétés matériaux non linéaires doivent rester au cœur des deux intégrales espace et temps.

On pose  $T^{m+1}(x, t) = T^m(x, t) + R(x)S(t) = \left( \sum_{j=1}^m a_j(t) \varphi_j(x) \right) + R(x)S(t)$  dans l'équation (Equation 2.26), cela fournit une équation à deux inconnues. On prendra le coefficient convectif dépendant de l'espace uniquement, de même que la température extérieure. Cela amène en séparant les variables à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega t} \int_{\Omega} \rho c_p(T^m) \frac{\partial RS}{\partial t} T^* dV dt + \int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla^T(RS) \nabla(T^*) dV dt + \int_{\Omega t} \int_{\Gamma_C} T^* h_c RS dS dt = \\ - \int_{\Omega t} \int_{\Omega} \rho c_p(T^m) \sum_j \frac{\partial T^m}{\partial t} T^* dV dt - \int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla^T(T^m) \nabla T^* dV dt \\ + \int_{\Omega t} \int_{\Gamma_C} T^* h_c T_{ext} dS dt - \int_{\Omega t} \int_{\Gamma_C} T^* h_c(T^m) dS dt \end{aligned} \quad (2.27)$$

Le terme de gauche regroupe les inconnues à rechercher (R, S), alors que le terme de droite regroupe l'ensemble des variables connues de l'itération précédente.

**Non linéarité en PGD** Le traitement de la non linéarité est un point qui nous intéresse particulièrement. Il s'avère que, à notre connaissance et au regard de la revue bibliographique réalisée, la non-linéarité matériaux est peu abordée avec la méthode PGD. D'une part, il n'a pas été observé de publication avec

des propriétés matériaux dépendantes de la température, autre qu'une conductivité thermique présentée comme une fonction linéaire ( $k(t) = aT + b$ ) [Nouy, 2010]. Par ailleurs, la non linéarité matériau est très souvent abordée sous l'angle d'un terme source qui aurait un comportement parabolique en fonction de la température, facilement séparable.

Dans le cas de Bonithon en 2010 [Bonithon et al., 2010], la non linéarité est introduite, via le terme source comme une fonction  $Q(T) = T^2(1 - T)$ . Pour Prulière en 2010 [Pruliere et al., 2010], la non linéarité du terme source a été introduite par  $Q(T) = T^2 + f(x, t)$  et  $f(x, t)$  une fonction sinusoïdale. Dans le cadre d'un modèle paramétré, le terme conductif est exprimé comme une fonction affine :  $k(T) = aT + b$ . Alors  $a$  et  $b$  deviennent des paramètres, au même titre que  $x$  ou  $y$ . Nouy 2010 [Nouy, 2010] fait appel à un terme source non linéaire exprimé sous la forme  $f(x, y, t) = 1 + 2xt$  ou sous une forme sinusoïdale.

Tous les autres cas de résolution de l'équation de la chaleur rencontrés dans la littérature font appels à des propriétés matériaux constantes scalaires.

De part cette analyse de l'état de l'art, il apparait que l'usage de propriétés matériaux non-linéaires réellement fonction de la température n'a pas encore été traité jusqu'à maintenant. Il s'agit là de l'objectif premier de cette thèse.

Par ailleurs, la non linéarité des propriétés matériaux entraine que celles-ci se présentent sous forme de champ de l'espace et du temps dans notre cas : cet aspect est également peu abordé dans la littérature.

### 2.3.4 Discrétisation en Eléments Finis

La discrétisation par éléments finis est très largement employée comme décrit dans la méthode de référence. Elle nécessite de discrétiser les variables sur la base de fonctions de formes. Ainsi dans les deux prochains points, qui traitent particulièrement de discrétisation, nous allons employer les éléments suivants (Equation 2.28). Ils sont basés sur une fonction de forme espace  $\mathbf{N}(x)$ , ainsi que sur une fonction de forme en temps que nous introduisons  $\mathbf{P}(t)$ .

$$\begin{aligned} R(x) &= \mathbf{R}^T \mathbf{N}(x); & S(t) &= \mathbf{S}^T \mathbf{P}(t); & k(T(x, t)) &= \mathbf{N}^T(x) [\mathbf{K}] \mathbf{P}(t) \\ \nabla(R) &= \mathbf{R}^T [\nabla(\mathbf{N}(x))] & \frac{\partial S(t)}{\partial t} &= \mathbf{S}^T \dot{\mathbf{p}}; & \rho c_p(T(x, t)) &= \mathbf{N}^T(x) [\mathbf{C}] \mathbf{P}(t) \\ R^*(x) &= \mathbf{R}^{*T} \mathbf{N}(x); & S^*(t) &= \mathbf{S}^{*T} \mathbf{P}(t); & h_c(x) &= \mathbf{h}_c^T \mathbf{N}(x) \\ & & & & T_{ext}(x) &= \mathbf{T}_{ext}^T \mathbf{N}(x) \end{aligned} \quad (2.28)$$

$R(x)$  et  $S(t)$  sont les inconnues,  $R^*$  et  $S^*$  sont les champs admissibles à 0 en espace et en temps. Dans le principe nous allons tout discrétiser, néanmoins dans les pages à venir, et en vue de garder une certaine concision, nous n'allons pas discrétiser les termes en temps dans la première équation où  $R$  est recherché et les termes en espace dans la seconde équation où  $S$  est recherché.

Il est à noter une discrétisation particulière des champs matériaux de telle manière que  $k$  et  $\rho c_p$  s'expriment sous forme d'une matrice matériau coefficientée de fonctions de formes en espace et en temps. On a alors affaire à des champ matériaux

### 2.3.5 Méthodologie de la gestion des champs matériaux

**Propriétés matériaux constantes** Les propriétés matériaux sont, dans la plupart des exemples de la littérature, considérées constantes, souvent dans le but de simplifier le problème. Ce qui implique qu'elles sont traitées comme des scalaires. Dès lors, l'intégrale double espace et temps est séparable. Prenons un exemple avec le terme de conductivité :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega t} \int_{\Omega} k \nabla^T(RS) \nabla(R^*S) dV dt & (2.29) \\ & = k \mathbf{R}^T \left[ \int_{\Omega} \nabla^T(\mathbf{N}) \nabla(\mathbf{N}^T) dV \right] \mathbf{R}^* \mathbf{S}^T \left[ \int_{\Omega t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt \right] \mathbf{S} \end{aligned}$$

La séparation en espace et en temps est alors immédiate. Les matrices  $\int_{\Omega} \nabla^T(\mathbf{N}(\mathbf{x}))\nabla(\mathbf{N}(\mathbf{x}))^T dV$  et  $\int_{\Omega t} \mathbf{P}(t)\mathbf{P}(t)^T dt$  peuvent être précalculées et réutilisées car elles sont des constantes au cours des enrichissements. L'intérêt est évident en terme de gain de temps...

**Propriétés matériaux non linéaires** Dans notre cas, les propriétés matériaux dépendent de la température :  $k(T)$  et  $\rho c_p(T)$ . Dans ce cas, les intégrales en espace et en temps ne sont plus aussi facilement séparables. Il faut donc procéder autrement :

a) Par une POD sur le champ matériau, il est possible de séparer les variables. On a alors :

$$k(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}(\mathbf{x})^T [\mathbf{K}] \mathbf{P}(t) = \mathbf{N}^T \boldsymbol{\psi} \mathbf{b}^T \mathbf{P} = \sum_i \mathbf{N}^T \boldsymbol{\psi}_i \mathbf{b}_i^T \mathbf{P} \quad (2.30)$$

Le terme de conductivité devient alors :

$$\int_{\Omega t} \int_{\Omega} k \nabla^T(\mathbf{R}\mathbf{S}) \nabla(\mathbf{R}^* \mathbf{S}) dV dt \quad (2.31)$$

$$= \sum_i \left( \mathbf{R}^T \left[ \int_{\Omega} \nabla^T(\mathbf{N}(\mathbf{x})) \nabla(\mathbf{N}(\mathbf{x})^*) (\mathbf{N}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\psi}_i) dV \right] \mathbf{R}^* \mathbf{S}^T \left[ \int_{\Omega t} \mathbf{P}(t) \mathbf{P}(t)^T (\mathbf{b}_i \mathbf{P}(t)) dt \right] \mathbf{S} \right)$$

On obtient alors autant de matrices séparées que de modes. Il s'agit là de la méthode communément utilisée en cas de non linéarité matériaux [Bonithon et al., 2010].

Les deux intégrales sont alors séparées, ce qui se traduira par un gain de temps, mais attention... Cela suppose le stockage d'autant de matrices que de modes POD, il faudra rafraichir les intégrales à chaque enrichissement. Une autre solution consiste à sortir les modes POD des intégrales et à stocker des tenseurs d'ordre 3. Par ailleurs, la POD introduira du bruit numérique de part le seuil de coupure.

Pour illustrer ce bruit introduit, nous présentons ci-dessous un exemple simple. Il s'agit d'un champ de température, fonction de l'espace et du temps. La température est comprise entre 160°C et 660°C. L'équation du champ est  $T(x, t) = (ax + b)(ct + d)$  avec  $a=0,7$  ;  $b=3$  ;  $c=0,8$  et  $d=60$ .

Sur ce champ qui est plan, nous interpolons les valeurs de conductivité thermique non linéaires, issues du logiciel JMatPro (Figure 1.6). Le champ de température qui était une surface plane devient un champ de conductivité thermique dont la surface présente une sorte de falaise (Figure 2.1).

Dès lors, sur ce champ de conductivité, nous réalisons une POD avec 4 modes<sup>37</sup>, comme nous le ferions dans la méthode présentée. Puis nous reconstruisons le champ avec le nombre de modes associés au critère de coupure (Figure 2.2b).

Nous pouvons comparer les deux champs, original et reconstruit (Figure 2.2).

Nous pouvons distinctement observer des irrégularité dans le champ reconstruit. L'approximation POD crée des oscillations et rend ce nouveau champ matériau instable et quasiment inutilisable dans l'objectif qui est le notre. Ceci de part la forte non linéarité matériau due au changement de phase. Il nous faut donc éviter de séparer les propriétés matériaux par POD. Nous proposons une alternative.

b) Par discrétisation spatio-temporelle. Il s'agit ici de discrétiser le champ matériaux, au même titre qu'une variable avec d'une part une fonction de forme en espace et une autre en temps.

Ceci de la manière proposée ci-avant en éléments finis (Equation 2.28) :

$$k(T(x, t)) = \mathbf{N}^T(x) [\mathbf{K}] \mathbf{P}(t) \quad (2.32)$$

$$\rho c_p(T(x, t)) = \mathbf{N}^T(x) [\mathbf{C}] \mathbf{P}(t) \quad (2.33)$$

37. Le choix d'employer uniquement 4 modes est pédagogique, afin de mettre en relief l'effet de la POD.

Où  $\mathbf{N}^T(x)$  et  $\mathbf{P}(t)$  sont les fonctions de formes respectives en espace et en temps et où  $[\mathbf{C}]$  est la matrice matériaux avec  $[\mathbf{C}_{ij}] = \rho c_p(x_i, t_j)$ . Si nous prenons comme illustration le premier terme de la première équation à venir, nous pouvons écrire sous formulation faible et sous forme discrétisée :

$$\int_{\Omega t} \int_{\Omega} k \nabla^T(RS) \nabla(R^*S) dV dt = \int_{\Omega} \mathbf{R}^{*T} \nabla^T(\mathbf{N}) \nabla(\mathbf{N}^T) \mathbf{R} \left( \mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega t} \mathbf{P} \right) \mathbf{S}^T \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{S} dt dV \quad (2.34)$$

Le détail des assemblages sera explicité juste après.

La propriété matériau entre parenthèse ne peut pas être séparés, les deux intégrales ne peuvent pas être dissociées, il faut les calculer ensemble à chaque itération du point fixe et par ailleurs remettre à jour les matrices matériaux à chaque enrichissement. C'est pour cela que les propriétés matériaux  $k$  et  $\rho c_p$  devront être calculées au cœur des intégrales car la matrice temporelle est à l'intérieur de la matrice espace. Ceci évite le stockage de deux matrices, chacune de taille nombre de degrés de liberté fois nombre de pas de temps : (nb ddl x npdt). On gagne cependant en précision en ne passant pas par la POD.

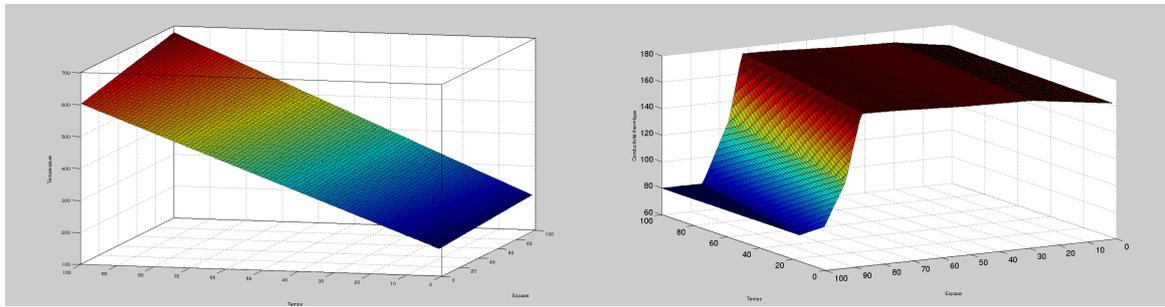


FIGURE 2.1 – Champ de température (gauche) et champ de conductivité associé (droite)

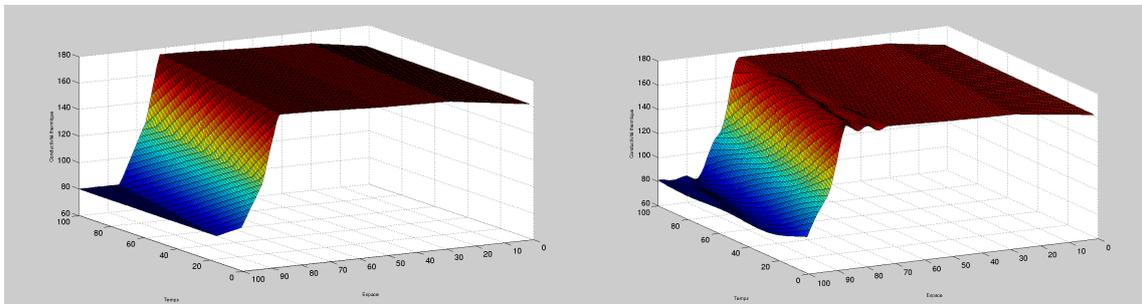


FIGURE 2.2 – Comparaison des champs de conductivité thermique original (à gauche) et reconstruit avec 4 modes (à droite)

Poursuivons maintenant la discrétisation des équations du point fixe avec cette séparation espace temps des matrices matériaux.

### 2.3.6 Formulation du point fixe

Le détail des discrétisations de la formulation (Equation 2.27) se trouve en annexe. Dans un but de concision, nous détaillerons avec précision le seul terme de conductivité.

Le terme de conductivité se résume à :  $\int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(T^{m+1})^T \nabla(T^*) dV dt$ , avec  $T^{m+1} = T^m + RS$ . Nous pouvons développer :

$$\int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(T^{m+1})^T \nabla(T^*) dV dt = \int_{\Omega t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(T^m + RS)^T \nabla(T^*) dV dt \quad (2.35)$$

soit encore :

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(T^m + RS)^T \nabla(T^*) dV dt = \int_{\Omega_t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(T^m)^T \nabla(T^*) dV dt + \int_{\Omega_t} \int_{\Omega} k(T^m) \nabla(RS)^T \nabla(T^*) dV dt \quad (2.36)$$

**Première équation en R avec**  $T^*(x, t) = R^*(x)S(t)$  La première équation (recherche R connaissant S) est issue du fait que l'on pose  $T^*(x, t) = R^*(x)S(t)$ . Dès lors, il nous faut discrétiser et poser les fonctions de formes suivantes. Nous plaçons à gauche les termes à rechercher (R, S) et à droite les termes connus ( $T^m = \sum_j \varphi_j(x) a_j(t)$ ).

Terme de gauche :

D'une part nous discrétisons suivant les termes précédemment évoqués (Equation 2.28), d'autre part nous réarrangeons les intégrales de telle manière que la matrice matériaux qui fait appel aux fonctions de forme espace et temps soit intriquée dans les deux intégrales. Ainsi la fonction de forme spatiale sera dans l'intégrale en espace et la fonction de forme temporelle sera dans l'intégrale en temps. Attention, de ce fait l'intégrale en temps devra être calculé avec l'intégrale en espace. Pour remettre à jour l'intégrale en espace, il faudra remettre à jour l'intégrale en temps avant.

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) \nabla(RS) \nabla(R^*S) dV dt = \int_{\Omega_e} \mathbf{R}^{*T} [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T \mathbf{R} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S^2 dt dV \\ = \mathbf{R}^{*T} [\mathbf{K}_2^R] \mathbf{R}$$

Il est donc possible d'identifier le vecteur temporel à calculer en premier :  $\mathbf{b}_1(S) = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} S^2 dt$  et la matrice de conductivité fonction de  $\mathbf{b}_1$  :  $[\mathbf{K}_2^R(S)] = \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \mathbf{b}_1) [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T dV$ .

On procède de même pour les autres termes et nous obtenons pour le terme de gauche, et de manière condensée la formulation suivante, le terme de masse, le terme de conductivité décrit ici et le terme de convection qui présente la même forme que le terme de conduction :

$$\mathbf{R}^{*T} \left( [\mathbf{M}_1^R] + [\mathbf{K}_2^R] + c_1 [\mathbf{K}_C] \right) \mathbf{R} \quad (2.37)$$

R est l'inconnue recherchée.

Pour le terme de droite, les modes et amplitudes ( $\varphi, a$ ) sont connus des itérations précédentes. Il apparait le terme de somme sur j devant les intégrales :

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) \nabla \left( \sum_j a_j \varphi_j \right) \nabla(T^*) dV dt = \mathbf{R}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S a_j dt [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T dV \varphi_j \quad (2.38)$$

$$= \mathbf{R}^{*T} \mathbf{b}_{2,j}^R$$

On retrouve le terme de propriété matériau de conductivité intriqué sur les deux intégrales. Le terme  $\varphi_j$  peut être sorti des intégrales car il ne dépend de rien. Cependant, le terme  $a_j$  est bloqué à l'intérieur de l'intégrale en temps avec S. On fait maintenant apparaitre un vecteur pour le second membre :

$$\mathbf{b}_{2,j}^R = \sum_j \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S a_j dt [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T dV \varphi_j \quad (2.39)$$

On procède de même pour les autres termes et nous obtenons pour le terme de droite, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{R}^{*T} \left( -\mathbf{b}_1^R - \mathbf{b}_2^R + \mathbf{b}_3^R - \sum_j [\mathbf{K}_C] \varphi_j g_{1,j} \right) \quad (2.40)$$

Ce qui donne, en regroupant les formes condensées de droite et de gauche :

$$\mathbf{R}^{*\top}([\mathbf{M}_1^{\mathbf{R}}] + [\mathbf{K}_2^{\mathbf{R}}] + c_1[\mathbf{K}_C])\mathbf{R} = \mathbf{R}^{*\top}(-\mathbf{b}_1^{\mathbf{R}} - \mathbf{b}_2^{\mathbf{R}} + \mathbf{b}_3^{\mathbf{R}} - \sum_j [\mathbf{K}_c] \boldsymbol{\varphi}_j g_{1,j}) \quad (2.41)$$

On voit bien se distinguer l'inconnue  $\mathbf{R}$  qui sera trouvée par inversion de la matrice de gauche, regroupée sous le terme  $\mathbf{A}^1$ .

Nous devons alors résoudre  $\forall \mathbf{R}^*$  le système :

$$\mathbf{A}^1(\mathbf{S}) \mathbf{R} = \mathbf{b}^1 \quad (2.42)$$

avec  $\mathbf{A}^1 = [\mathbf{M}_1^{\mathbf{R}}] + [\mathbf{K}_2^{\mathbf{R}}] + c_1[\mathbf{K}_C]$  et  $\mathbf{b}^1 = -\mathbf{b}_1^{\mathbf{R}} - \mathbf{b}_2^{\mathbf{R}} + \mathbf{b}_3^{\mathbf{R}} - \sum_j c_1 [\mathbf{K}_c] \boldsymbol{\varphi}_j g_{1,j}$ .

Remarquons que par construction,  $\mathbf{A}^1$  a la même structure creuse que les matrices masses et rigidité usuelles de la méthode de référence.

Intéressons nous maintenant à la seconde équation. Nous procédons exactement de même pour la seconde équation en  $\mathbf{S}$ .

**Seconde équation en  $\mathbf{S}$  avec  $\mathbf{T}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}(\mathbf{x})\mathbf{S}^*(t)$**  La seconde équation (on recherche  $\mathbf{S}$  connaissant  $\mathbf{R}$ ) est issue du fait que l'on pose  $\mathbf{T}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}(\mathbf{x})\mathbf{S}^*(t)$ . Nous reprenons l'équation variationnelle 2.27.

Dans un but de clarté, nous exprimerons de la même manière que précédemment chacune des intégrales individuellement.

Termes de gauche :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(\mathbf{T}^m) \mathbf{S} \mathbf{S}^* \nabla \mathbf{R} \nabla^{\top} \mathbf{R} dV dt &= \mathbf{S}^{*\top} \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^{\top} \mathbf{S} (\mathbf{P}^{\top} \int_{\Omega_e} [\mathbf{K}^{\top}] \mathbf{N}) \nabla(\mathbf{R}) \nabla^{\top}(\mathbf{R}) dV dt \quad (2.43) \\ &= \mathbf{S}^* \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^{\top} \mathbf{v}) \mathbf{P} \mathbf{P}^{\top} dt \mathbf{S} = \mathbf{S}^{*\top} [\mathbf{A}_2^{\mathbf{S}}] \mathbf{S} \end{aligned}$$

avec  $\mathbf{v} = [\mathbf{K}]^{\top} \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \nabla(\mathbf{R}) \nabla^{\top}(\mathbf{R}) dV$

On procède de même pour les autres termes et nous obtenons pour le terme de gauche, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{S}^{*\top}([\mathbf{A}_1^{\mathbf{S}}] + [\mathbf{A}_2^{\mathbf{S}}] + c_2[\mathbf{Q}])\mathbf{S} \quad (2.44)$$

Termes de droite :

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(\mathbf{T}^m) \mathbf{S}^* \nabla \left( \sum_j a_j \boldsymbol{\varphi}_j \right) \nabla \mathbf{R} dV dt \\ &= -\mathbf{S}^{*\top} \sum_j \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^{\top} a_j (\mathbf{P}^{\top} [\mathbf{K}^{\top}] \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \nabla(\mathbf{R}) \nabla^{\top}(\boldsymbol{\varphi}_j) dV dt) = -\mathbf{S}^{*\top} \mathbf{b}_2^{\mathbf{S}} \end{aligned}$$

Avec  $\mathbf{e}_{2,j}(\mathbf{R}) = \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \nabla(\mathbf{R}) \nabla^{\top}(\boldsymbol{\varphi}_j) dV$  et  $\mathbf{b}_2^{\mathbf{S}} = \sum_j \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^{\top} [\mathbf{K}^{\top}] \mathbf{e}_{2,j}) \mathbf{P} \mathbf{P}^{\top} a_j dt$ .

On procède de même pour les autres termes et nous obtenons pour le terme de droite, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{S}^{*\top}(-\mathbf{b}_1^{\mathbf{S}} - \mathbf{b}_2^{\mathbf{S}} + \mathbf{b}_3^{\mathbf{S}} - \mathbf{b}_4^{\mathbf{S}}) \quad (2.45)$$

Ce qui donne, en regroupant les formes condensées de droite et de gauche :

$$\mathbf{S}^{*\top}([\mathbf{A}_1^{\mathbf{S}}] + [\mathbf{A}_2^{\mathbf{S}}] + c_2[\mathbf{Q}])\mathbf{S} = \mathbf{S}^{*\top}(-\mathbf{b}_1^{\mathbf{S}} - \mathbf{b}_2^{\mathbf{S}} + \mathbf{b}_3^{\mathbf{S}} - \mathbf{b}_4^{\mathbf{S}}) \quad (2.46)$$

Nous devons alors résoudre  $\forall \mathbf{S}^*$  le système :

$$\mathbf{A}^2(\mathbf{R}) \mathbf{S} = \mathbf{b}^2 \quad (2.47)$$

avec  $\mathbf{A}^2 = [\mathbf{A}_1^S] + [\mathbf{A}_2^S] + c_2[\mathbf{Q}]$  et  $\mathbf{b}^2 = -\mathbf{b}_1^S - \mathbf{b}_2^S + \mathbf{b}_3^S - \mathbf{b}_4^S$ .

Aussi, de la même manière que précédemment, nous obtenons un système à résoudre en inversant la matrice  $\mathbf{A}^2$ .

Ainsi le point fixe se déroule en une succession de résolution des vecteurs  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{S}$ . Il faut maintenant chercher à quel moment arrêter les itération d'enrichissement et celles du point fixe.

Cette démarche de résolution peut être synthétisée dans l'algorithme ci-dessous (Algorithme 3).

---

**Algorithme 3** Algorithme complet de la méthode PGD avec résolution du couple (R,S) par la méthode du Point Fixe

---

$\top^0$

**Boucle** en enrichissement m

Initialisation  $S_0$  connue

**Boucle** en itération n de point fixe (Recherche des couples  $R(x)$  et  $S(t)$ )

**Recherche**  $R_n$  connaissant  $S_{n-1}$

**Assemblage** des intégrales temporelles

**Assemblage** des intégrales spatiales

**Résolution** du système  $A_n^1(S_{n-1})R_n = b_n^1(S_{n-1})$

**Recherche** de  $S_n$  en fonction de  $R_n$

**Assemblage** des intégrales spatiales

**Assemblage** des intégrales temporelles

**Résolution** du système  $A_n^2(R_n)S_n = b_n^2(R_n)$

**Test** de convergence du point fixe couple  $(R_n, S_n)$  ; Si OUI alors  $R = R_n$  et  $S = S_n$

$\top^{m+1} = \top^m + RS$

**Test** de convergence de l'enrichissement

$\top = \top^{m+1}$

---

Compte tenu des deux boucles qui composent cet algorithme, il est nécessaire de discuter des critères de sortie et d'erreur.

### 2.3.7 Critères de sortie et d'erreur

Il y a deux niveaux de critères de sortie car la PGD utilise deux boucles itératives (enrichissement et point fixe). Le premier niveau est celui du point fixe. A quelle itération estime-t-on avoir obtenu le meilleur couple  $(\mathbf{R}, \mathbf{S})$  ? Lorsque ce couple est très proche du précédent ? Lors qu'il n'apporte pas beaucoup plus d'information que le précédent ? Un second niveau de sortie existe en terme d'enrichissement. Lorsque plusieurs modes ont été calculés, quand s'arrêter ?

**Enrichissement** Le choix du critère de sortie de l'enrichissement est défini comme l'écart entre deux champs solutions qui doit être inférieur à un certain critère. Ceci indépendamment du calcul du résidu qui est fonction de la discrétisation spatiale et temporelle. Toutefois, nous ne sommes pas en mesure de présenter un critère de sortie efficace. Ceci de telle manière que nous avons calculé et sauvegardé

le champ de température mis à jour pour chaque enrichissement. Il nous est alors possible de calculer l'erreur par rapport à un champ de référence (calculé par la méthode de référence a priori). La sortie de la boucle d'enrichissement est donc pour le moment "manuelle".

**Point fixe** En terme de critère de convergence du point fixe, nous avons utilisé une estimation de l'erreur relative du nouveau couple  $(\mathbf{R}, \mathbf{S})$  par rapport à l'ancien couple issu du précédent point fixe  $(\mathbf{R}_{old}, \mathbf{S}_{old})$  [Chinesta et al., 2005, Chinesta et al., 2010]. Ainsi l'erreur relative s'écrit sous la forme :

$$e_{relative} = \left\| \frac{\mathbf{R}_{old} \mathbf{S}_{old}^T - \mathbf{R} \mathbf{S}^T}{\mathbf{R} \mathbf{S}^T} \right\|_{\infty} < \varepsilon \quad (2.48)$$

Nous avons utilisé une valeur de  $\varepsilon = 10^{-5}$ . La différence  $\mathbf{R}_{old} \mathbf{S}_{old}^T - \mathbf{R} \mathbf{S}^T$  est calculée point à point.

Maintenant que nous avons présenté les deux méthodes de résolution, ainsi que les critères utilisés, nous pouvons passer à l'application sur un modèle 2D industriel.

## 2.4 Application au modèle 2D Industriel

Ce modèle est issu de l'industrie de la fonderie. L'éprouvette à retassures (Figure 2.3) permet d'évaluer la manière dont se comporte le métal d'un point de vue macroscopique, lors de la solidification et en particulier la facilité avec laquelle il crée des défauts<sup>38</sup>. Cette éprouvette présente une échancrure localisée à mi-hauteur, de telle manière que les bords vont se refroidir rapidement et ainsi refermer les isothermes. Ces résultats ont fait l'objet d'un acte de congrès national CSMA 2013 [Despret, 2013].

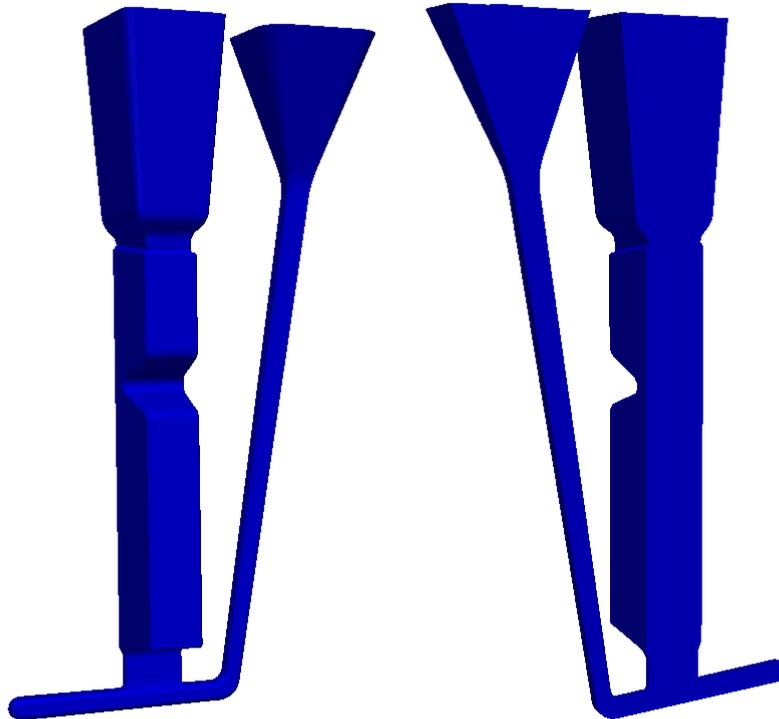


FIGURE 2.3 – Modélisation CAO d'une éprouvette à retassures avec descente de coulée, pièce et masse-lotte (Source : Montupet SA)

38. Les défauts vont se créer dans les parties inférieure et supérieure, proche de l'échancrure. En effet, lors du refroidissement, les flux de chaleur extraits seront plus grands sur les bords latéraux et inférieur en contact avec le moule, que la partie supérieure en contact avec l'air. De ce fait, le métal présent à l'échancrure qui est étroite ainsi que le long des bords latéraux et bas va se solidifier en premier. Ceci va créer un contour solide, alors que le cœur sera encore liquide. Lors de la solidification des métaux, il y a contraction volumique, cela va créer les évidements décrits en partie 1 (retassures).

**Présentation du modèle Géométrie - Maillage** Afin de réaliser la simulation numérique sous le logiciel Matlab, la géométrie 2D a été relevée sur le profil d'une éprouvette en aluminium. Une schématisation est proposée (Figure 2.4), de même qu'une cotation en mm (Tableau 2). Sur celle-ci apparaissent les bords de l'éprouvette où seront appliquées deux conditions aux limites différentes, ainsi que la localisation d'un point sonde, permettant comme précédemment le tracé de la température en fonction du temps.

En terme de cotation, nous pouvons relever les sept points angulaires qui composent ce modèle. Ces points serviront à fournir les dimensions de l'éprouvette. L'origine est définie comme l'angle en bas à gauche de l'éprouvette, les points suivants sont indiqués ensuite dans le sens trigonométrique.

TABLE 2 – Détail des cotations de l'éprouvette à retassures modélisée sous matlab (modèle 2D)

points	1	2	3	4	5	6	7
Coordonnée x (mm)	0	37,5	37,5	12,5	37,5	50,5	0
Coordonnée y (mm)	0	0,6	122,5	134,5	150,5	315,0	316,0
Remarques	origine	bas droite		échancrure		haut droit	haut gauche

Le thermocouple est localisé à la position (20 ; 90). Deux maillages ont été utilisés : le premier présente 803 ddl spatiaux (noté -1-) et le second 2961 ddl (noté -2-), composé uniquement d'éléments Q4 linéaires.

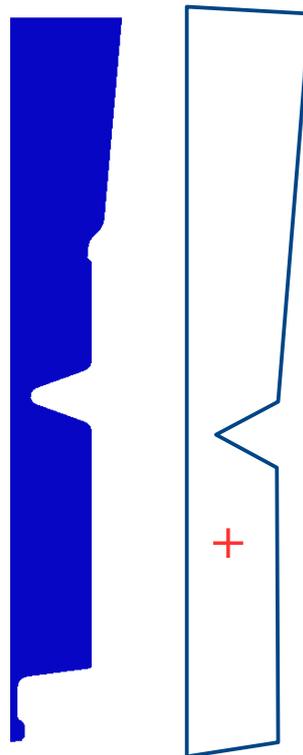


FIGURE 2.4 – Modèle 2D : Profil d'une éprouvette à retassures issue de la CAO industrielle (à gauche) (Source : Montupet SA) et sa modélisation pour résolution sous Matlab, la croix rouge indique la localisation du point sonde dont nous allons tracer l'évolution de la température (à droite)

La géométrie a été simplifiée et le maillage, irrégulier, présente des tailles de maille comprises entre 1,25mm et 5mm (Figure 2.5). La croix symbolise la localisation du point sonde.

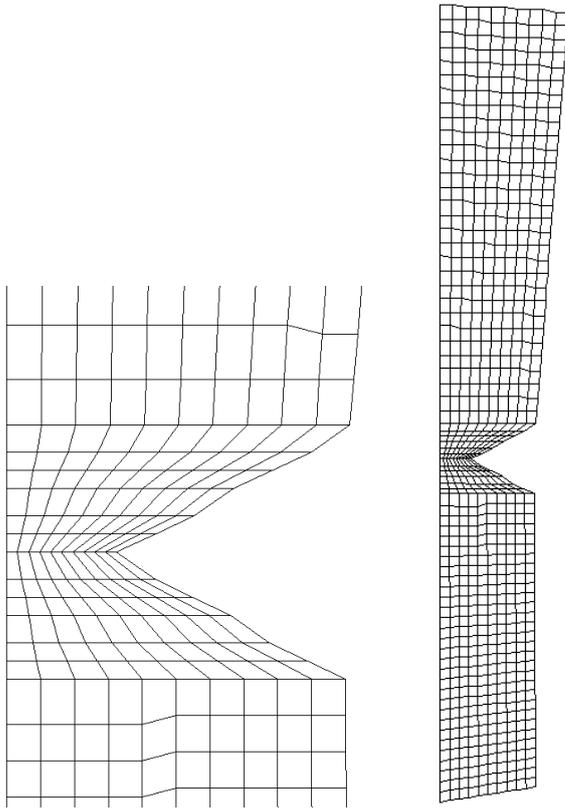


FIGURE 2.5 – Détail du maillage à 803 mailles complet (à droite) et agrandissement de la zone échancre (à gauche)

**Conditions Initiales et Limites** Dans notre modèle, nous employons un moule virtuel, les effets des bords sont modélisés par un coefficient convectif. Le moule est considéré comme rempli au début de la simulation. Il est modélisé via des coefficients convectifs. Les coefficients convectifs de la partie en contact avec l'air, au dessus de la masselotte et de celle en contact avec le moule seront respectivement de  $h_{\text{air}} = 15\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$  et  $h_{\text{moule}} = 500\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$ . Ces valeurs sont utilisées dans le domaine industriel. La température extérieure est considérée égale à  $100^{\circ}\text{C}$  partout autour de l'éprouvette.

La température initiale de l'alliage est considérée uniforme et égale à  $720^{\circ}\text{C}$ .

**Matériaux** Le matériau employé dans ce modèle est l'AlSi7Mg, comme présenté en partie 1 ; ses propriétés sont non linéaires car fonction de la température.

**Placement du thermocouple** Lors d'expériences en laboratoire, un thermocouple permet l'enregistrement de l'évolution de la température en fonction du temps. Dans notre cas de simulation numérique, celui-ci est simulé par l'étude du relevé de la température en un point précis du maillage (localisé par une croix (Figure 2.4)).

## 2.5 Résultats et comparaisons des méthodes PGD et de référence appliquées à un modèle 2D

La simulation présente un temps final de simulation de 400s et un incrément  $dt=1\text{s}$ .

**Contexte de difficulté numérique** Afin d'évaluer la difficulté numérique à laquelle nous sommes confrontés, il nous est possible d'effectuer une POD sur le champ de température résultat issu de la méthode de référence. A la suite de quoi, la contribution des modes est évalué de la façon suivante

(Equation 2.49) :

$$\text{Contribution des modes 1 à } i = \frac{\sum_{j=1}^i \lambda_j}{\sum_{j=1}^m \lambda_j} * 100 \quad (2.49)$$

avec  $m$  le nombre total de modes POD,  $i$  le mode évalué. Cette contribution tend vers 1 au plus l'on prend de modes.

Ainsi, pour un maillage de 803ddl, il apparait qu'il faut 3 modes POD<sup>39</sup> pour décrire à 99,99% la solution de référence (premier mode : 99,657%, deuxième mode : 0,329% et troisième mode : 0,008%). En d'autres termes, la POD nous informe qu'il est possible de décrire ce problème à 99.99% avec 3 modes optimaux. Il en faudrait 4 pour arriver à 99,999%<sup>40</sup>.

La POD donne l'indication du nombre minimum de vecteur de base nécessaires pour décrire le champ  $T_{\text{solution}}$ .

**Température en fonction du temps** Afin d'obtenir une solution de référence, notée REF, ces modèles sont d'abord résolus au moyen d'un schéma de résolution standard (schéma implicite en temps, linéarisé par la méthode de Newton-Raphson et discrétisé spatialement en EF présenté au début de cette partie). Ensuite, la méthode PGD décrite ci-dessus est utilisée. Toutes les simulations sont réalisées sous Matlab [Mat, 2013].

Nous pouvons comparer les deux méthodes en traçant, pour le point sonde présenté plus haut, l'évolution de la température en fonction du temps (Figure 2.6).

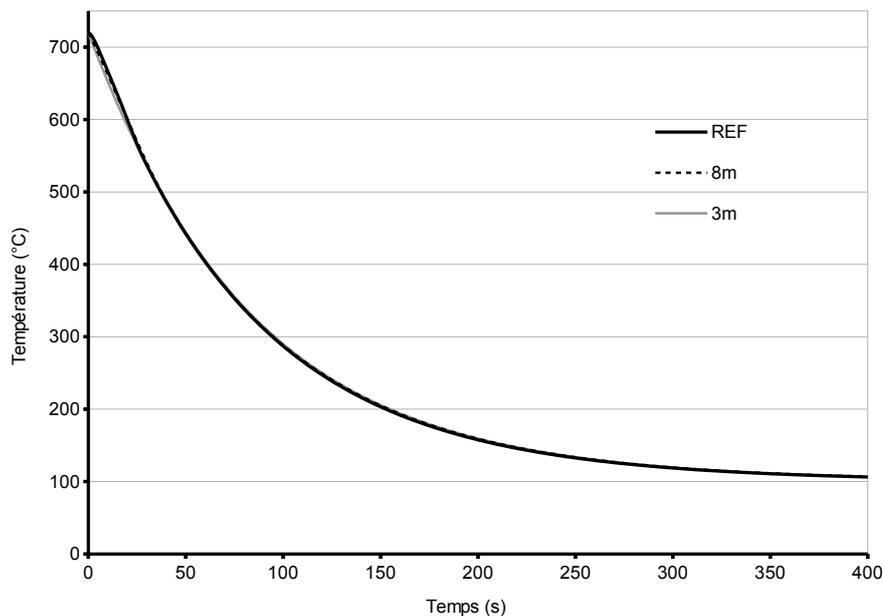


FIGURE 2.6 – Tracé de la température du point sonde en fonction du temps, tracé pour la méthode de référence et la méthode PGD pour 3 et 8 modes

Nous constatons que dans le cas de propriétés matériaux non-linéaires, les courbes décrites par les deux méthodes sont très similaires.

**Evaluation de l'erreur commise** Afin d'évaluer l'erreur commise entre les deux méthodes de simulation, nous évaluons l'erreur  $e$  (Equation 2.50) comme le rapport des normes  $L_2$  en espace et  $L_\infty$  en temps

39. Les modes POD sont optimaux, alors que ce n'est pas le cas pour la PGD.

40. Notons que pour un maillage à 3000ddl, il en va exactement de même : 3 modes pour 99,99% et 4 pour 99,999%.

de la différence entre le champ résultat et le champ PGD, par rapport au champ résultat de référence. Le tout exprimé en pourcentage.

$$e = \max_t \frac{\|T_{ref}(x, t) - T_{PGD}(x, t)\|_{L_2}}{\|T_{ref}(x, t)\|_{L_2}} * 100 \quad (2.50)$$

Cette expression présente l'avantage d'obtenir la plus forte erreur sur le domaine temporel. Cette expression est très exigeante et néanmoins pertinente au vu de l'évaluation de la température au cours du temps.

Le gain (noté G) est défini (Equation 2.51) comme le temps total de la méthode de référence rapporté au temps nécessaire pour obtenir le mode considéré<sup>41</sup> par la méthode à évaluer, ici la méthode PGD.

$$G = \frac{\text{temps total de calcul de la méthode de référence}}{\text{temps de calcul à l'obtention du mode considéré}} \quad (2.51)$$

Le graphique ci-dessous (Figure 2.7) représente l'erreur  $e$  calculée pour chaque maillage et chaque enrichissement. Nous observons pour chacun des maillages une stabilisation de l'erreur dans les deux cas.

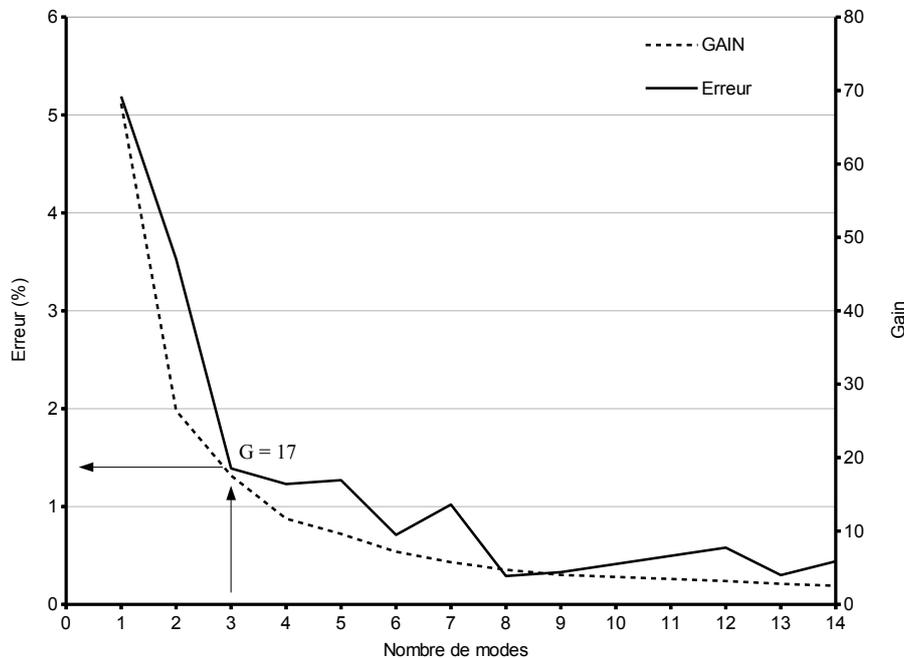


FIGURE 2.7 – Tracé de l'erreur et du gain en fonction du nombre de modes de la PGD par rapport à la méthode de référence pour un maillage de 803ddl

Nous observons que le gain et l'erreur décroissent régulièrement avec l'augmentation du nombre de modes. En particulier, dès 3 modes, nous passons sous 2% d'erreur, ce qui offre un gain de 17. En ajoutant plus de modes, nous obtenons une erreur de 0.25% pour un gain de 6.

Nous pouvons dire que la méthode PGD est capable de prendre en compte les non linéarités matériaux.

Pour le maillage à 803 ddl, l'erreur s'établit à plus de 3 % après seulement 5 modes, alors qu'elle est inférieure à 1 % après 11 modes pour le maillage le plus fin. Nous observons une forte diminution de l'erreur dès 3 modes dans les deux cas.

Un second maillage à 2961 ddl a également été évalué et présente également de bons résultats pour 3 modes : une erreur inférieure à 2% et un gain de 23. Les deux modèles offrent des résultats similaires et cohérents.

41. Ainsi, pour le mode 2, le temps considéré inclura le temps de calcul du mode 1.

Si nous mettons ces résultats en perspectives avec les 3 modes POD identifiés un peu plus tôt, nous constatons que la PGD ne fournit pas de modes optimaux. Néanmoins, avec 3 modes, il est possible d'obtenir moins de 2% d'erreur, ce qui est très acceptable en simulation numérique.

D'un point de vue industriel, il est souhaitable d'obtenir un pré-résultat permettant de décider s'il est pertinent de continuer une simulation qui prendra 24, 48 heures ou plus. Cela permet d'augmenter le nombre de calculs réalisables dans un temps donné pour arriver à une simulation plus fiable dans le cadre de la mise au point d'un nouveau produit.

## 2.6 Analyse du code et origine des gains de la méthode PGD

Les gains significatifs de la méthode de résolution PGD par rapport à la méthode de référence peuvent amener de nombreuses questions. Sans tenter ici de démontrer mathématiquement la convergence de la méthode PGD dans le cas de l'équation de la chaleur avec propriété matériaux non linéaires, nous allons procéder à une énumération comparative des algorithmes des méthodes PGD et de référence.

### 2.6.1 Analyse du "PROFILER"

L'option "PROFILER" de Matlab permet d'analyser le code et en particulier de connaître le nombre de passages (ainsi que le temps passé) dans telle boucle ou telle opération. Il indique également le temps de calcul. Dans notre cas la méthode MEF (1288s) et la méthode PGD (75s), nous retrouvons bien le rapport de 17.

**Optimisation du code** Nous avons observé que dans le cas de référence, la majorité du temps passé dans le calcul de référence se trouve dans l'assemblage des matrices élémentaires (~1170 s) sur un total de 1322s. Alors que la résolution des systèmes est bien plus rapide (~9,4s). En d'autres termes, le coût de l'assemblage est très supérieur au coût de l'inversion de matrice. Ceci s'explique par le fait que le logiciel Matlab n'est pas optimisé pour calculer les boucles "for", or les deux méthodes reposent sur de nombreuses boucles "for"<sup>42</sup>.

**Nombre de pas de temps calculés** Le profiler nous indique que les méthodes de référence et PGD calculent tous deux 400 pas de temps. Cette comparaison est très importante car à chaque pas de temps calculé est associée une boucle Newton-Raphson dans le cas de référence.

**Détermination du nombre de systèmes à résoudre** Le profiler nous informe que pour la PGD, une moyenne de 7 itérations point fixe est nécessaire par enrichissement. Il y a par ailleurs pour chaque point fixe deux systèmes à résoudre (R et S). De plus, il est à noter que le nombre de systèmes à résoudre n'est pas directement lié au nombre de pas de temps pour la PGD (la discrétisation temporelle est réalisée a priori), il est fonction de la convergence des itérations du point fixe. Ceci contrairement à la méthode de référence dont le nombre de systèmes à résoudre est directement lié au nombre de pas de temps nécessaires. Pour cette dernière méthode, une moyenne de 3,2 itérations Newton-Raphson sont nécessaires par pas de temps. Dès lors, nous pouvons présenter le tableau suivant :

---

42. Pour réduire ce rapport de temps qui s'élève actuellement à plus de 10, il faudrait réaliser le code sous FORTRAN ou C.

	PGD	REF	Gain
Nombre d'enrichissements	2		
Nombre moyen de points fixes/enrichissement	7		
Nombre de système par point fixe	2		
Nombre de pas de temps calculés	400	400	1
Nombre moyen d'itérations NR/pdt		3,2	
Nombre de systèmes à résoudre	28	1264	45
Temps de calcul (s)	75	1288	17
Erreur par rapport à la référence	<2%		

TABLE 3 – Tableau algorithmique comparatif afin d'établir le nombre des systèmes à résoudre pour chacune des méthodes

Au regard du nombre de systèmes linéaires à résoudre, la PGD en présente 45 fois moins. Attention cependant à bien considérer que le point fixe est compté pour rechercher l'inconnue R mais ensuite, il faut rechercher l'inconnue S (soit 14 pour rechercher R et 14 pour rechercher S). Il faut néanmoins s'assurer que les matrices à inverser de la PGD sont de la même structure que celles de la méthode de référence.

**Analyse des matrices à résoudre** Les matrices à inverser, tant pour la méthode de référence que pour la recherche de R et de S sont des matrices bandes. Par construction, la matrice à inverser pour rechercher S est de largeur de bande égale à 3. La matrice à inverser pour rechercher R est identique à cette pour la matrice de référence (Equation 2.19). La résolution de S est donc négligeable devant celle de R, nous arrivons alors à un gain théorique de 90 !

**Conclusion sur l'origine des gains de la méthode PGD** D'une part une erreur de codage de la méthode de référence est à exclure. Les deux méthodes passent beaucoup de temps sur l'assemblage des matrices, ce qui est normal pour Matlab. Nous avons observé que la PGD résout 45 fois moins de systèmes et que sur les 28 systèmes résolus, la moitié l'est à un coût négligeable. Ceci nous amène à déterminer que la méthode PGD, dans notre exemple, présente un gain théorique de 90 par rapport à la méthode de référence.

Le gain de la méthode PGD est fonction de la très bonne convergence des itérations point fixe (gage d'enrichissements efficaces) alors que la méthode de référence nécessite de très petits pas de temps pour assurer la convergence.

Nous observons un gain de temps réel de 17 qui est dû au temps perdu dans les assemblages de matrices. Un codage sur un code C ou FORTRAN rendrait cette étape beaucoup plus efficace et offrirait un gain au delà de 17, pouvant atteindre théoriquement 90.

Fort de ces résultats positifs, l'étape suivante consistera à prendre en compte l'effet thermique de la chaleur latente de fusion. La capacité calorifique se trouvera nettement affectée par cette chaleur latente et sera d'autant plus non linéaire. Il sera certainement nécessaire d'adapter une nouvelle fois notre formulation afin que soit bien prise en compte cette énergie libérée lors de la solidification.

## 2.7 Conclusion du chapitre

Nous avons montré dans ce chapitre que l'équation de la chaleur avec une formulation en température seule peut être traitée en tenant compte des non linéarités matériaux. D'autre part, cette formulation peut être résolue par la méthode PGD. Dans ce cas, il faut mettre en place une nouvelle stratégie par rapport à l'état de l'art actuel qui consiste en une discrétisation spatiotemporelle des propriétés matériaux. Nous avons montré que le fait de pratiquer une POD sur le champ matériau de conductivité amène à du bruit qui nuit à la résolution. Ces propriétés matériaux sont, dans notre cas, calculées à la volée pour chaque boucle de point fixe, sur la base de l'enrichissement précédent convergé. Par application de cette méthode

et comparaison à la méthode de référence, nous avons montré qu'elle permettait d'obtenir des résultats rapides et fiables sur un modèle industriel 2D.

Nous n'en sommes à présent qu'à prendre en compte la non linéarité matériaux. Il est nécessaire de considérer le relargage de la chaleur latente de fusion, qui est libérée lors de la solidification. Seule cet apport supplémentaire d'énergie interne dans le milieu rend la courbe de refroidissement caractéristique de celles observées sur les courbes d'analyse thermique.

### **Points clés du chapitre**

- Prise en compte des non linéarités matériaux dans la PGD via une discrétisation spatio-temporelle des propriétés matériaux. Cela évite de considérer une POD pour séparer les propriétés matériaux ;
- Une analyse des gains générés par la méthode PGD montre que son origine repose dans la résolution d'un nombre plus faible de résolution de systèmes. Dans notre exemple, un gain théorique de 48 est mise en avant. Il est à noter que les codes ayant été développés sous Matlab, une large partie du temps est perdue dans la construction sous forme de boucles des matrices élémentaires.





# **Modélisation de la thermique non linéaire avec chaleur latente**

## Troisième partie

# Modélisation de la thermique non linéaire avec chaleur latente

Dans le chapitre précédent, nous avons montré la manière de prendre en compte les non linéarités matériaux. Ceci par deux moyens, d'une part la méthode de référence qui consiste à discrétiser par éléments finis l'espace, à employer un schéma implicite temporel, à linéariser l'équation par la méthode de Newton-Raphson puis à la résoudre. A la suite de quoi nous avons mis en place une résolution par réduction de modèle, précisément par la méthode PGD, afin d'améliorer les temps de résolution. Cette méthode de réduction de modèle a montré sa capacité à traiter des non linéarités matériaux.

Une étape supplémentaire doit encore être franchie. La non linéarité matériau ne suffit pas à simuler le changement de phase qui est l'objectif de la simulation des procédés de fonderie. Dès lors, il faut prendre en compte la libération de la chaleur latente de fusion. Nous avons vu en partie 1 que cette énergie est libérée par la réorganisation des atomes sous forme cristalline, plus stable, les dendrites. Cette énergie libérée dans le milieu peut être considérée comme un terme source ajouté à l'équation de la chaleur.

De part la partie 1, et en particulier l'équation formulée en température (Equation 1.18) nous distinguons déjà plusieurs pistes de modélisation. La première consiste à considérer le terme source et à le discrétiser comme tel. La seconde, qui est un corolaire de la première, consiste à prendre en compte une capacité calorifique apparente, notée  $c_{p,app}$ .

## 3 Modélisation du changement de phase

Il existe deux manières de formuler l'équation de la chaleur : d'une part mixte ( $h, T$ ) (Equation 2.1) ou uniquement en température (Equation 2.2). Dans le premier cas, la prise en compte de la chaleur latente se fait sur la base de la courbe de l'enthalpie (Figure 3.11), celle-ci contient intrinsèquement la chaleur latente de part le saut. Nous observons d'ailleurs que cette figure est beaucoup plus irrégulière que les deux autres cas présentés (transformation isotherme (Figure 1.12) et libération de la chaleur latente de manière linéaire (Figure 3.10)). Dans le cas de l'équation uniquement en température (Equation 2.2), il est besoin d'ajouter le terme source, comme présenté dans la partie 1 (Equation 1.18) :

$$Q = \rho L \frac{\partial}{\partial t} [f_s(T)] \quad (3.1)$$

### 3.1 Méthode du terme source

Egalement appelée "internal heat source", cette méthode consiste à discrétiser le terme source comme les autres termes de l'équation. Cela ajoute un terme instationnaire, de telle manière que pour un schéma eulérien implicite, pour résoudre le pas de temps  $t^{n+1}$ , cette formulation nécessite de sauvegarder le pas de temps  $t^n$  comme proposé par [Voller et al., 1990]. L'un des inconvénients de cette méthode est que si le pas de temps employé est trop large, alors le terme source sera grand et pourra introduire une instabilité numérique, cela nécessitera alors une méthode de relaxation. De même, cette méthode a été peu développée par le passé dans la mesure où elle aboutit à l'expression d'une dérivée seconde de la fraction solide par rapport à la température lors de l'écriture de la matrice tangente, ce qui pose de lourds problèmes numériques.

$$\frac{\partial}{\partial t} [f_s(T)] = \frac{f_s(T^{n+1}) - f_s(T^n)}{\Delta t} \quad (3.2)$$

Une autre manière d'évaluer le terme source est de le quantifier en terme d'incrément successifs d'énergie libérée comme fonction des incréments de fraction solide. A chaque variation de fraction solide

est associée une variation de chaleur latente [Rolph and Bathe, 1982, Brent et al., 1988, Voller et al., 1990, Fachinotti et al., 1999].

Cette méthode semble néanmoins refaire son apparition actuellement sur des problèmes avec résolution par méthodes inverses. Nous décidons de ne pas nous y attarder, les personnes intéressés se tourneront vers les auteurs [Pailhes et al., 2012, Shi et al., 2014, Modi et al., 2014, Taigbenu, 2015]. Nous nous tournons vers une prise en compte de la chaleur latente via la capacité calorifique.

### 3.2 Formulation de référence : $c_{p \text{ app}}$

Cette formulation sera utilisée comme référence, elle s'inscrit dans le prolongement de la méthode de référence décrite dans la partie 2. Elle présente l'avantage de ne nécessiter aucun changement de codage. Le seul changement réside dans les propriétés matériaux employées, précisément dans la capacité calorifique. Dans le cas non linéaire, nous employons une capacité calorifique assez simple (Figure 1.11) alors que dans le cas avec changement de phase, nous verrons que cette courbe est bien plus "pointue".

Cette méthode peut être décrite comme relevant d'un artéfact mathématique qui vise à substituer le terme source dans la propriété de capacité calorifique placée en facteur du terme transitoire.

La question de la conservation de l'énergie est soulignée comme une lacune de cette méthode, comme nous le verrons dans la section résultats de la partie 3, pourtant exacte théoriquement [Pham, 1986, Pham, 1995, Feulvarch et al., 2009].

Dans le cas d'une évolution non monotone de la température (cas de la recalescence : la température remonte lors du refroidissement à certaines températures), une prise en compte est alors possible via des modèles cinétiques [Feulvarch and Bergheau, 2007, Feulvarch et al., 2009]. De plus, s'il y a recalescence, alors la courbe de fraction solide en fonction de la température n'est plus bijective car pour une température donnée il existe plusieurs valeurs de fraction solide associées. Le cas de recalescence ne sera pas abordé dans ce manuscrit. Ceci, en accord avec l'industriel Montupet.

La méthode d'obtention de la capacité calorifique apparente consistera à détailler la dérivée temporelle en un produit de dérivées spatiale et temporelle.

**Obtention du  $c_{p \text{ app}}$**  Comme montré en partie 1 (Equation 1.16), la capacité calorifique est la dérivée de l'enthalpie par rapport à la température<sup>43</sup>. Nous pouvons écrire la dérivée temporelle de la fraction solide, présente dans le terme source (1.18), comme un produit de dérivées :

$$\frac{\partial}{\partial t}[f_s(T)] = \frac{df_s(T)}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.4)$$

De cette manière apparait distinctement le terme  $\frac{\partial T}{\partial t}$ , qui se trouve être le même que celui du terme instationnaire (Equation 2.2). Il apparait donc envisageable de déplacer ce terme du côté instationnaire et de mettre "en facteur" les termes  $c_p(T)$  ainsi que  $L_f \frac{df_s(T)}{dT}$ . Ceci de telle façon que le terme de gauche de l'équation de la chaleur, écrite uniquement en température, comprenne les termes :

$$\rho c_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} + \rho L_f \frac{df_s(T)}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} = \dots \quad (3.5)$$

Il devient alors possible d'identifier (Equation 2.2) une forme apparente de la capacité calorifique comme :

$$c_{p \text{ app}} = c_p(T) + L_f \frac{df_s(T)}{dT} \quad (3.6)$$

43. [Thomas et al., 1984] a proposé un modèle simplifié de capacité calorifique apparente en considérant une libération linéaire de la chaleur latente entre les températures de liquidus et de solidus. Cette expression n'est valable que sur l'intervalle de solidification et équivaut à une représentation de l'enthalpie comme présenté figure 2. On retrouve ce résultat si l'on considère que la fraction solide est linéaire de pente  $\frac{1}{T_{liq} - T_{sol}}$ .

$$c_{p \text{ app}} = c_p + \frac{L_f}{T_{liq} - T_{sol}} \quad (3.3)$$

Ceci a pour conséquence de modifier la propriété matériau de la capacité calorifique avant même de faire tout calcul. De ce fait, cette prise en compte de la chaleur latente nécessite simplement un pré-traitement des données matériaux.

**Tracé de la capacité calorifique avec et sans libération de chaleur latente** Nous pouvons mettre en parallèle deux tracés de la capacité calorifique. D’une part, sans chaleur latente, nous l’avons déjà décrite partie 1. D’autre part avec chaleur latente, voir la figure ci-dessous (Figure 3.1) basée sur le logiciel JMatPro. Nous observons que la grande différence se produit sur l’intervalle de solidification. Cela est assez naturel dans la mesure où c’est précisément là que l’énergie est libérée. Nous constatons également que l’on passe d’une valeur de  $1E3$  à  $4E4$ , soit un rapport de 40.

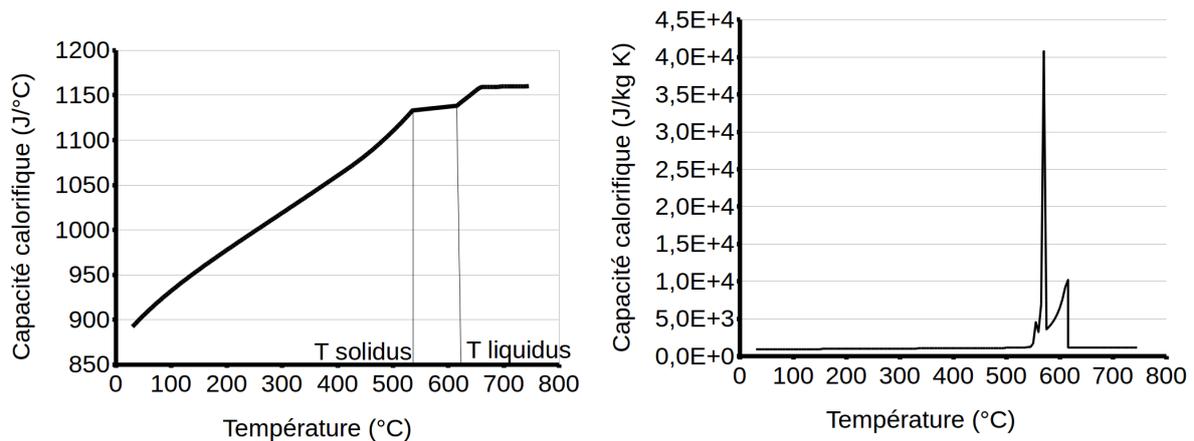


FIGURE 3.1 – Tracé de la capacité calorifique sans chaleur latente (à gauche) et avec chaleur latente (à droite), tous deux pour un alliage AlSi7Mg (Source : [JMatPro, 2014])

Sur le graphe de droite, le pic principal est dû au saut eutectique ( $T=575^{\circ}\text{C}$ ) visible sur le graphe de la fraction solide (Figure 1.10). Nous comprenons que ce saut va induire des difficultés numériques pour certaines méthodes de calcul. Il faut maintenant observer si la linéarisation par la méthode de Newton Raphson est capable d’accepter de tels pics.

Ce sera cette courbe de JMatPro que nous considérerons pour modéliser la capacité calorifique apparente  $c_{p\text{ app}}$ , nous obtenons de l’équation de la chaleur (Equation 2.2) la forme suivante :

$$\rho c_{p\text{ app}}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k(T) \nabla(T)) \quad (3.7)$$

Ce sera cette formulation que nous utiliserons avec une méthode de résolution de type schéma implicite en temps, linéarisation par la méthode de Newton-Raphson et discrétisation éléments finis. Il s’agit là de notre méthode de référence.

Ce présent développement se discrétise alors exactement de la même manière que la version de référence présentée en partie 2. Seule la propriété matériau de capacité calorifique est modifiée avant le calcul.

Détaillons maintenant la PGD avec cette formulation.

### 3.3 Schéma numérique de résolution PGD

Il s’agit maintenant d’employer la méthode PGD pour prendre en compte la libération d’énergie de chaleur latente et ainsi résoudre l’équation de la chaleur (Equation 3.7). Les équations de la chaleur exprimées en  $T$ , avec  $c_p$  ou  $c_{p\text{ app}}$  (Equation 2.2 et Equation 3.7) étant strictement identiques au coefficient  $c_{p\text{ app}}$  près, la méthode PGD qui s’y appliquera sera strictement la même.

### 3.4 Résultats et comparaisons des méthodes PGD avec formulation $c_{p,app}$ et de référence appliquées à un modèle 1D

En terme de résultat, nous allons tout d'abord présenter un nouveau modèle, 1D, de conduction thermique unidirectionnelle qui présente une solution analytique [Carslaw and Jaeger, 1959] sur la base de laquelle nous pourrions valider notre méthode de résolution. Il est à noter que les solutions analytiques pour des problèmes de solidification non linéaires sont très peu nombreuses.

#### 3.4.1 Présentation du modèle

**Géométrie - Maillage et Conditions Initiales - Limites** Le modèle 1D orienté  $x > 0$ , est une demi-droite  $[0; \infty[$ . Bien que le problème soit semi-infini, le modèle numérique est de longueur finie. La température initiale  $V$  est uniforme et égale à  $800^\circ\text{C}$  sauf en  $x = 0$  où la température est imposée sous forme d'une condition de Dirichlet à  $0^\circ\text{C}$ ,  $\forall t$ . Le matériau présente une diffusivité thermique  $\alpha$ .

L'équation de la chaleur en 1D, ainsi que les conditions initiales et limites s'écrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} = 0 \quad (3.8)$$

$$T(0,t) = 0 \quad \forall t > 0 \quad (3.9)$$

$$T(x,0) = V, \quad \forall x > 0 \quad (3.10)$$



FIGURE 3.2 – Schématisation du Modèle 1D à l'instant initial

On notera que ce modèle présente une singularité, en  $T(0,0)$ .

**Matériaux** Le modèle suppose des propriétés matériaux simplifiées d'un alliage d'aluminium AlSi7Mg. Il présente deux températures de changement de phase  $T_2 = 615^\circ\text{C}$  et  $T_1 = 555^\circ\text{C}$ .  $T_2$  correspond à la température de liquidus et  $T_1$  à celle du solidus, il s'agit de l'intervalle de solidification.

$V$  est la température uniforme dans le barreau à l'instant initial, égal à  $800^\circ\text{C}$ .  $T_D$  est la température imposée en  $x = 0$  et pour tout temps  $t$  égal à  $0^\circ\text{C}$ . La chaleur latente  $L_f$  est libérée de manière linéaire sur l'intervalle de solidification. Ainsi, trois domaines sont définis : le solide (1) sur  $[0^\circ\text{C}; T_1]$ , le pâteux (2) sur  $]T_1; T_2[$  et le liquide (3) sur  $[T_2; 800^\circ\text{C}]$ . Les interfaces entre les domaines 1-2 et 2-3 sont respectivement localisées en  $X_1(t)$  et  $X_2(t)$ . La figure 3.3 présente les 3 domaines, ainsi que la localisation des deux interfaces à un instant  $t$  donné.

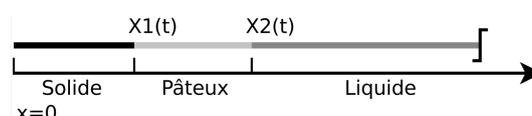


FIGURE 3.3 – Schématisation des différents domaines de la simulation à  $t > 0s$ , laissant apparaître les phases solide, pâteuse et liquide, ainsi que leurs interfaces fonction du temps

	1- solide	2- pâteux	3- liquide
$k$ (W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	120	120	120
$\rho$ (kg.m <sup>3</sup> )	2675	2675	2675
$c_p$ (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )	1000	8000	1000
$\alpha$ (m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	4,48e-5	5,60e-6	4,48e-5
$L_f=431\ 000$ J/kg			

TABLE 4 – Tableau des propriétés matériaux appliquées au modèle 1D pour chacune des phases

Le tableau ci-dessous présente les propriétés matériaux employées pour chacune des phases considérées. En partie 1, nous avons défini les propriétés matériaux de l'AlSi7Mg. Le modèle analytique 1D impose d'une part que la propriété de masse volumique soit constante sur les trois domaines (continuité des flux aux interfaces des domaines) et d'autre part que la conductivité thermique et la capacité calorifique soient constantes sur chacun des domaines et  $\alpha_i$  les coefficients de diffusivité des domaines solides et pâteux.

Notons que dans le tableau suivant  $c_{p\text{ pâteux}} = c_p + \frac{L_f}{T_2 - T_1}$ . Ce qui implique une figure de  $H(T)$  de même allure que le graphe 3.10.

Notons que seule varie dans ce modèle la capacité calorifique et donc par conséquent la diffusivité thermique  $\alpha$ .

Pour la résolution en méthode PGD et MFM, nous avons utilisé la courbe d'enthalpie que nous avons régularisée.

### 3.4.2 Résolution du modèle analytique

La résolution analytique de ce modèle multiphasés se trouve dans l'ouvrage [Carslaw and Jaeger, 1959]. Toutefois, des erreurs ont été identifiées, aussi il nous parait utile de réécrire correctement ces équations.

Les équations 3.11 et 3.12 définissent la position des interfaces au cours du temps,  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  des constantes numériques.

$$X_1(t) = 2\lambda_1\sqrt{\alpha_1 t} \quad (3.11)$$

$$X_2(t) = 2\lambda_2\sqrt{\alpha_2 t} \quad (3.12)$$

La résolution se déroule en deux phases. La première consiste à rechercher les constantes  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  par la résolution du système ci-dessous avec Matlab et la méthode "trust-region-dogleg option" qui est la méthode de résolution par défaut.

$$\frac{T_1 \exp(-\lambda_1^2)}{\text{erf}(\lambda_1)} - \frac{(T_2 - T_1)k_2 \exp(-\lambda_1^2 \frac{\alpha_1}{\alpha_2})}{\text{erf}(\lambda_2) - \text{erf}(\lambda_1 \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}})k_1 \sqrt{\alpha_2}} = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{(T_2 - T_1) \exp(-\lambda_2^2)}{\text{erf}(\lambda_2) - \text{erf}(\lambda_1 \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}})} - \frac{(T_0 - T_2)k_3 \sqrt{\alpha_2} \exp(-\lambda_2^2 \frac{\alpha_2}{\alpha_3})}{k_2 \sqrt{\alpha_3} \text{erfc}(\lambda_2 \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_3}})} = 0 \quad (3.14)$$

Ensuite, pour chaque domaine d'étude, l'évolution du champ de température est donnée par les équations suivantes.

$$T_{\text{solide}}(x,t) = \frac{T_1 \text{erf}(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_1 t}})}{\text{erf}(\lambda_1)}, \quad x \in [0, X_1] \quad (3.15)$$

$$T_{\text{pâteux}}(x, t) = \frac{(T_2 - T_1) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_2 t}}\right) + T_1 \operatorname{erf}(\lambda_2) - T_2 \operatorname{erf}\left(\lambda_1 \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda_2) - \operatorname{erf}\left(\lambda_1 \sqrt{\frac{\alpha_1}{\alpha_2}}\right)}, \quad x \in [X_1, X_2] \quad (3.16)$$

$$T_{\text{liquide}}(x, t) = T_0 - \frac{(T_0 - T_2) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_3 t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\lambda_2 \sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_3}}\right)}, \quad x \in [X_2, \infty] \quad (3.17)$$

Ce champ de température va maintenant nous servir de référence pour notre résolution.

### 3.4.3 Résolution numérique

**Géométrie - Maillage, Conditions Initiales - Limites et Matériaux** Numériquement, le modèle précédent est modélisé sur une longueur limitée  $L = 0,40\text{m}$ . Il est discrétisé en 100 éléments spatiaux. La durée simulée est de 200s, discrétisée en 100 pas de temps de 2s.

Afin de comparer le modèle numérique au modèle analytique, l'évolution temporelle de la température sera étudiée en un point particulier, appelé « point sonde », situés en  $x = 0,08\text{m}$ .

Les conditions initiales et limites sont strictement identiques à celles présentées précédemment. Le modèle analytique prévoit que le flux est nul lorsque  $x \rightarrow \infty$ . Dans notre cas, nous supposons que la longueur  $L$  est suffisamment grande, ou le temps de simulation suffisamment court, pour qu'il n'y ait pas de changement de température en  $x = L$  (le gradient de température doit être nul en  $L$  au cours de la simulation), donc pas de flux.

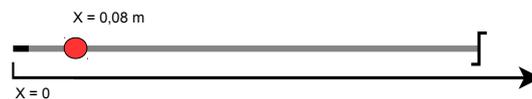


FIGURE 3.4 – Localisation du point sonde, rouge, en  $x=0,04\text{m}$

Enfin, les matériaux employés sont ceux définis précédemment (Tableau 4).

Dès lors, nous pouvons tracer l'évolution temporelle de la température et l'évolution de la température dans la poutre à un instant donné pour les différentes méthodes et les comparer à la solution analytique.

### 3.4.4 Comparaison des résultats

**Température en fonction du temps** Nous traçons ici la température du point sonde situé (Figure 3.5). Nous observons que la méthode implicite avec  $c_{p,app}$  converge vers la solution analytique (respectivement les courbes en croix et noir), ce qui n'est pas le cas de la PGD (courbe supérieure en tirets). Nous décidons alors de faire croître progressivement la non linéarité en réalisant 10 calculs successifs de telle manière que la capacité calorifique de la phase pâteuse passe progressivement d'une valeur de 1000 à 8000 avec un incrément de 700 à chaque calcul (courbe inférieure en tirets-points). Cela ne converge pas mieux vers la solution analytique (courbe en tirets et points inférieure).

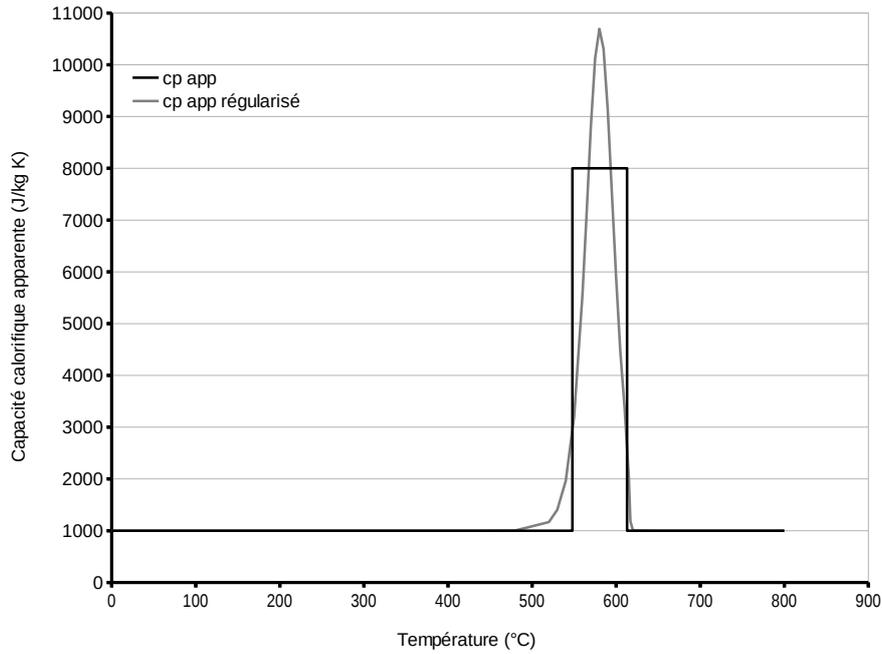


FIGURE 3.6 – Capacité calorifique par morceaux et régularisée

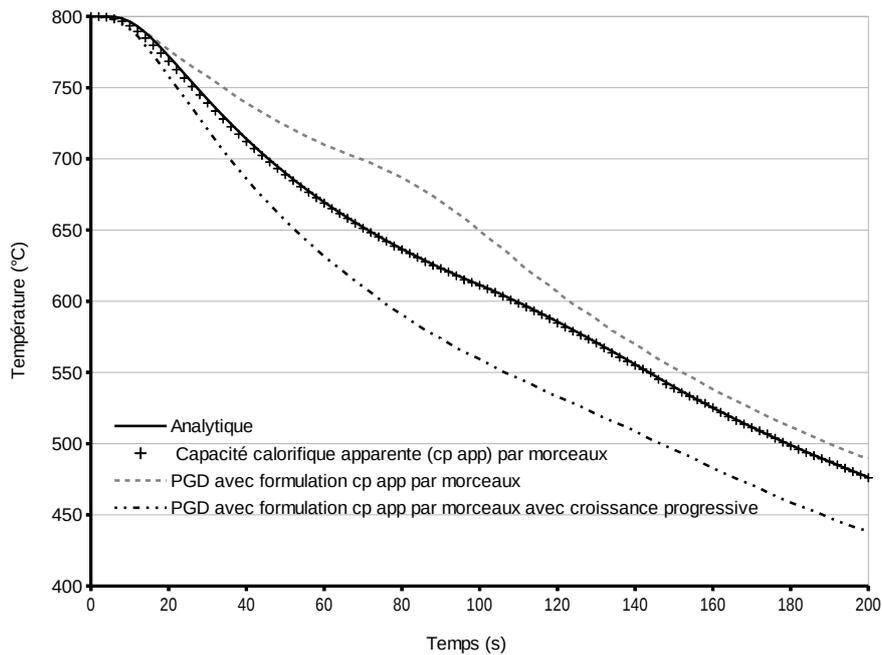


FIGURE 3.5 – Evolution temporelle de la température avec capacité calorifique constante par morceaux et croissance progressive de la non linéarité

Afin d'assouplir la forte non linéarité matériau, nous décidons de régulariser la courbe de la capacité calorifique de telle manière qu'elle suive la forme suivante (Figure 3.7) :

Dès lors, tout comme précédemment, nous traçons l'évolution de la température au cours du temps (Figure 3.7), observons que la PGD ne converge pas vers la solution et mettons en place la croissance progressive qui n'apporte rien de plus.

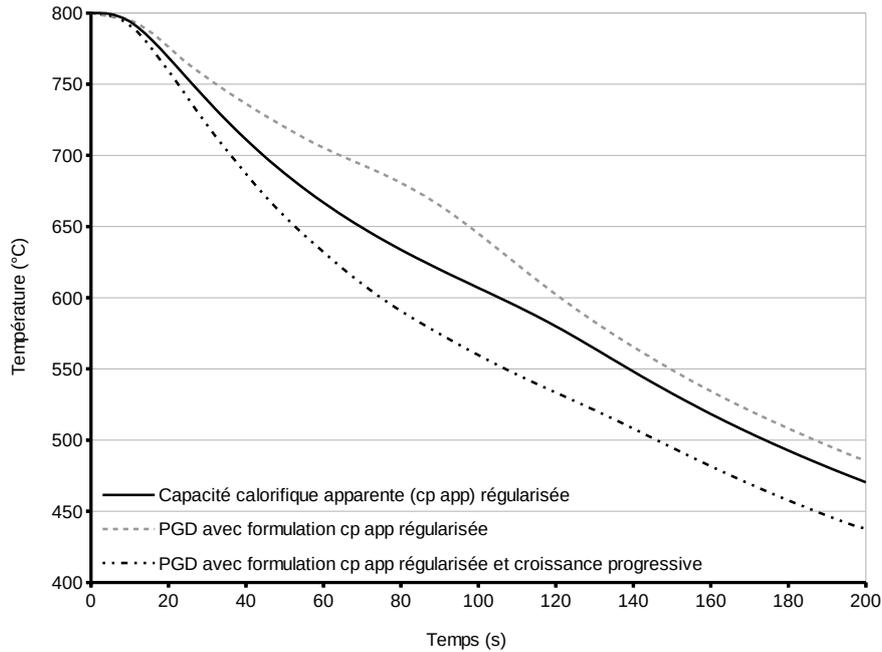


FIGURE 3.7 – Evolution temporelle de la température avec capacité calorifique régularisée et croissance progressive de la non linéarité

**Conclusion partielle du modèle 1D** Le modèle 1D présente une solution analytique, ce qui en fait un modèle diffusé dans la littérature. Il est néanmoins discontinu à l’instant initial et à l’origine  $(x, t) = (0, t) = 0$  et  $(x, t) = (0 + \delta x, 0) = 800$ , ce qui en fait un modèle difficile à faire converger. Il nous permet néanmoins de constater que la méthode de résolution numérique PGD codée avec une formulation en capacité calorifique apparente, n’est pas capable de capter les fortes discontinuités liées aux conditions aux limites. Ceci malgré une régularisation de la propriété matériau et une croissance progressive de celle-ci.

Ceci peut s’expliquer par le fait que nous cherchions à approximer une discontinuité par des approximations modales continues. Cette forte non linéarité est équivalente à modéliser une trempe. Néanmoins, ce modèle est utile pour tester la robustesse de la méthode numérique. Nous le réutiliserons par la suite (Figure 3.18). Poursuivons notre application au modèle 2D, présenté en partie 2 et qui présente l’avantage d’avoir des conditions convectives sur les bords.

### 3.5 Résultats et comparaisons des méthodes PGD avec formulation $c_{p\text{ app}}$ et de référence appliquées à un modèle 2D

Même si la condition aux limites n’est plus discontinue (de part les flux convectifs aux bords), nous pouvons néanmoins anticiper des difficultés de convergence dans la mesure où la capacité calorifique est particulièrement pointue (Figure 3.1). De même, pour ce modèle, la conductivité varie, ainsi que la fraction solide, en fonction de la température.

Le modèle 2D a été développé en partie 2, nous avons expliqué qu’il suffit simplement de changer les propriétés matériaux pour faire calculer la PGD avec chaleur latente, ainsi, même si le modèle 1D converge mal, nous pouvons tester le modèle 2D sans efforts supplémentaires. Ce que nous faisons maintenant.

**Contexte de difficulté numérique** Dans le cas actuel (fortes non linéarités imposées par le changement de phase, pour un modèle à 803ddl 2D), la POD réalisée sur le champ de température obtenu par la méthode de référence nécessite 5 modes pour décrire à 99,99% la solution et 9 modes pour 99,999%. Cela nous montre clairement une montée de la difficulté.

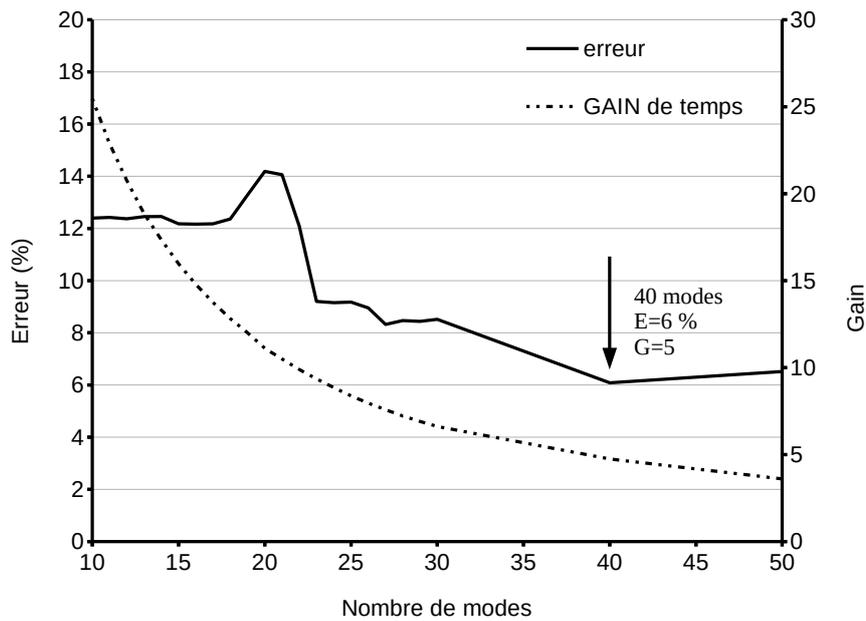


FIGURE 3.8 – Agrandissement des tracés de l’erreur et du gain en fonction du nombre de modes pour la méthode PGD par rapport à la méthode de référence pour le modèle 2D à 803ddl

Il est bien évident qu’il faudra plus de modes PGD pour décrire la solution non linéaire avec changement de phase que dans la partie précédente qui était sans changement de phase.

**Combien de modes conserver ?** Comme précisé précédemment, le critère de sortie n’est pas très révélateur de la bonne convergence de la solution, de telle manière que nous sommes, pour le moment, obligés de ”sortir manuellement du calcul”. Cela présente toutefois l’avantage qu’en ayant précalculé la solution via la méthode de référence, nous connaissons l’erreur pour chaque mode ajouté.

Nous présentons sur la figure suivante (Figure 3.8) l’évolution de l’erreur définie en partie 2 (Equation 2.50), tout comme le gain (Equation 2.51) associé en fonction du nombre d’enrichissements. Plusieurs éléments sont visibles.

Tout d’abord, l’erreur décroît avec le nombre de modes et se stabilise au delà de 40 modes à 6%. L’erreur ne décroît pas de manière monotone. Enfin, pour 5 modes et moins, l’erreur est très élevée (>25%).

Concernant le gain de la PGD par rapport à la méthode de référence, pour un mode, il est égal à plus de 400 (mais pour une erreur de 35%)... Ensuite, le gain semble suivre une hyperbole décroissante (fonction de l’inverse du nombre de modes) pour rejoindre les petites valeurs. Toutefois, de part l’échelle très grande imposée par les gains élevés avec moins de 10 modes, nous ne voyions pas que l’erreur se stabilisait à environ 6%. Il faut donc retirer les 10 premiers modes (Figure 3.8) et ainsi laisser apparaître l’erreur pour un nombre de modes plus grand.

D’une part, nous constatons que le gain est de 5 avec 40 modes là où l’erreur est la plus faible (6%). D’autre part, le gain continue de chuter jusque 50 modes, alors que l’erreur se stabilise.

Nous avons noté que l’erreur minimum se trouvait pour 40 modes ( $e = 6\%$  ;  $G = 5$ ). Il paraît nécessaire de tracer l’évolution de la température du point sonde au cours du temps afin de la visualiser (Figure 3.9) et de la comparer avec la méthode de référence.

Nous pouvons là encore noter plusieurs observations (Figure 3.9). Tout d’abord, l’allure générale des deux courbes est similaire. Avant la température de liquidus, nous constatons que la PGD suit correctement la méthode de référence. Cela fait écho aux bons résultats de la partie 2 (Figure 2.6) qui ne traitait que de non linéarités matériaux, sans libération de chaleur latente. Il nous faut détailler plus finement

la zone très perturbée de l'intervalle de solidification. Pour ce faire, nous allons expliciter une série de données notamment aux températures de liquidus, eutectique et solidus (Figure 3.9 et Tableau 5). Le changement de phase est plutôt correctement décrit, en effet, nous notons une différence de l'ordre de 15°C pour le liquidus, ce qui équivaut à un écart  $e$  de "seulement" 2,4%. L'écart est ici évalué sur la formulation de l'écart scalaire (Equation 3.18) :

$$e = \max_t \left( \frac{\|T_{ref} - T_{PGD}\|_{L_2}}{\|T_{ref}\|_{L_2}} \right) * 100 \quad (3.18)$$

Pour les deux autres températures de changement de phase, l'écart est inférieur à 1%. Ce qui est acceptable. Au delà de la zone de changement de phase, la description est moins bonne car présentant un écart de 7,6%. Notons que d'un point de vue industriel, les défauts se produisent durant l'intervalle de solidification, autour de la température eutectique. Lorsque la pièce est à moins de 500°C, elle est totalement solide, il ne se passera plus rien.

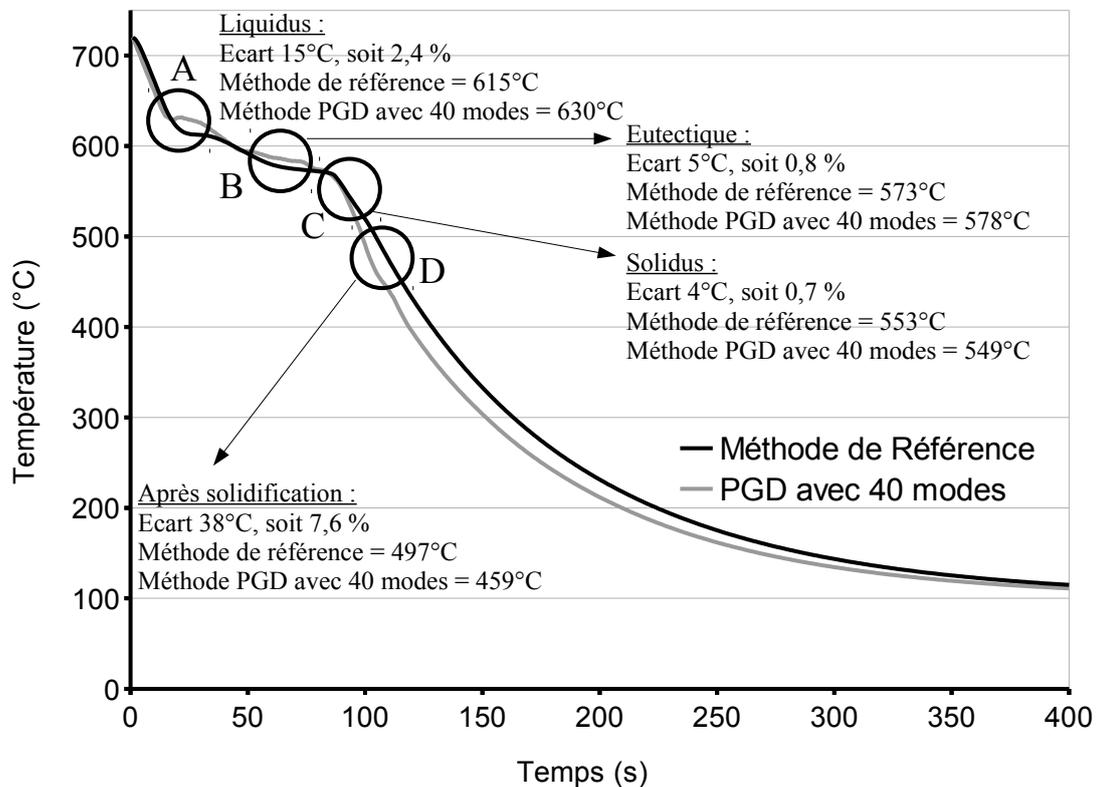


FIGURE 3.9 – Annotations et comparaison des tracés de l'évolution de la température au cours du temps au point sonde, pour la méthode PGD et la méthode de référence afin de faire apparaître les écarts de température sur l'intervalle de solidification et en dehors

Ces résultats chiffrés encourageants ne doivent cependant pas faire oublier que l'erreur globale sur l'ensemble du champ solution est de l'ordre de 6%.

Il est intéressant de constater ici que le modèle 2D fonctionne assez correctement alors même que le modèle 1D ne fonctionnait pas.

Nous conservons toutefois une erreur de 6% (à 40 modes), ce qui reste élevé. Le gain de 5 est cependant intéressant. Reprenons notre raisonnement d'analyse du profiler pour en connaître les raisons.

	T°C Réf (°C)	T°C PGD (°C)	Différence (°C)	Erreur (%)
Liquidus	615	630	15	2,4
Eutectique	573	578	5	0,8
Solidus	553	549	4	0,7
Maximum	497	459	38	7,6

TABLE 5 – Récapitulatif des écarts observés entre la courbe PGD avec 40 modes et la méthode de référence

	PGD	$c_{p\ app}$	Gain
Nombre d'enrichissements	14		
Nombre moyen de points fixes/enrichissement	14		
Nombre de système par point fixe	2 (R et S)		
Nombre de pas de temps calculés		2149	
Nombre moyen d'itérations NR/pdt		4,4	
Nombre de systèmes à résoudre	392	9455	24
Temps de calcul (s)	655	10 369	16
Erreur par rapport à la référence	8%		

TABLE 6 – Tableau algorithmique comparatif afin d'établir le nombre des systèmes à résoudre pour chacune des méthodes

### 3.6 Analyse du code et origine des gains de la méthode PGD

De la même manière qu'en partie 2, nous pouvons afficher les résultats du profiler pour la simulation précédente en 2D avec chaleur latente.

#### 3.6.1 Analyse du "PROFILER"

**Optimisation du code** Tout comme précédemment, la majorité du temps passé dans le calcul de référence se trouve dans l'assemblage des matrices élémentaires (~8000 s) comparé à la résolution des systèmes (~70s).

**Nombre de pas de temps calculés** Le profiler nous indique que la méthode PGD calcule 400 pas de temps, (ce qui est normal puisque la discrétisation a priori du temps est faite via un maillage 1D pour 400ddl temporels), contre 2149, pour la méthode de référence qui bénéficie d'un pas de temps adaptatif. Nous observons là une différence avec la partie 2 dont la méthode de référence ne nécessitait pas de raffinement du maillage temporel.

A chaque pas de temps calculé est associé une boucle Newton-Raphson...

**Détermination du nombre de systèmes à résoudre** Le profiler nous informe que pour la PGD, une moyenne de 14 itérations point fixe est nécessaire par enrichissement (à raison de 2 systèmes à résoudre par point fixe (R et S) avec S négligeable (voir partie 2)).

Pour la PGD, une moyenne de 4,4 itérations Newton-Raphson est observée par pas de temps. Dès lors, nous pouvons présenter le tableau suivant :

Au regard du nombre de systèmes linéaires à résoudre, la PGD en présente 24 fois moins. La résolution de S est négligeable devant celle de R, nous arrivons alors à un gain théorique de 48 !

Le gain de la méthode PGD est fonction de la très bonne convergence des itérations point fixe (gagne d'enrichissements efficaces), alors que la méthode de référence nécessite de très petits pas de temps pour assurer la convergence.

Nous observons un gain de temps réel de 16 qui est du au temps perdu dans les assemblages de matrices. Un codage sur un code C ou FORTRAN rendrait cette étape beaucoup plus efficace et offrirait un gain au delà de 16, pouvant atteindre théoriquement 48.

### 3.7 Conclusion partielle :

Nous constatons que la méthode PGD avec formulation en capacité calorifique apparente offre pour 40 modes un gain 5 fois supérieur à celui de la méthode de référence pour une erreur de 6%. Localement, autour du point sonde, nous constatons que la PGD décrit avec plus ou moins de succès l'évolution de la température. Nous savons que les difficultés de convergence et la qualité du résultat obtenu dépendent ici de la propriété matériau de capacité calorifique apparente (et en particulier des deux pics (Figure 3.1)). Par ailleurs, nous pouvons garder en mémoire la difficulté de la PGD à prendre en compte les fortes discontinuités dues aux conditions aux limites. Nous comprenons maintenant que les gains de la méthode PGD sont fonction du nombre de systèmes à résoudre.

Aussi, nous pouvons émettre une hypothèse qui consiste à ce que la stabilisation de l'erreur à 6 % est due à la formulation de l'équation de la chaleur que nous utilisons (écrite en température avec  $c_{p,app}$ ). Nous souhaitons nous tourner vers l'équation de la chaleur en enthalpie et y appliquer la méthode PGD.

### 3.8 Méthodes enthalpiques

La méthode enthalpique consiste à rechercher la valeur de la capacité calorifique apparente sur la base de la courbe d'enthalpie en fonction de la température. Cette méthode fut améliorée<sup>44</sup> par [Pham, 1985, Pham, 1986] et nommée alors "the three level enthalpy method", sur la base des travaux menés en 1946 par [Eyres et al., 1946] puis par [Rose, 1960, Butler and Kerr, 1962]. A la base, cette méthode visait à modéliser la conduction de chaleur pour des propriétés matériaux dépendantes de la température. La méthode a été évaluée par [Bell and Wood, 1983] d'abord sur un exemple 1D avec solution analytique [Carslaw and Jaeger, 1959] et a montré de bons résultats, puis sur un exemple 2D avec solution analytique et montre d'une part que des adaptations du code devaient être réalisées et d'autre part que cette méthode présentait encore en 1983 des défis à relever en terme d'évaluation de la capacité calorifique et de la convergence du modèle.

L'évaluation de la capacité calorifique apparente a posé et pose encore aujourd'hui de nombreuses questions, en particulier de part la forte non linéarité due à la chaleur latente de fusion et aux précautions nécessaires relatives au champ initial (qui doit être suffisamment régulier) et stationnaire. Il a donc été souvent question, durant les années 70 et 80, d'évaluer le terme de capacité calorifique au plus juste. Deux types de méthodes ont été identifiées pour cette évaluation : la première par la moyenne spatiale, la seconde par la moyenne temporelle.

Dans le cas d'un alliage, la solidification est étalée sur une plage de température, appelée l' "intervalle de solidification" (Figures 3.10 et 3.11) [Dantzig and Rappaz, 2009]. Dans cet intervalle de solidification se trouvent mélangées la phase solide et la phase liquide.

Dans le cas d'un alliage, cette libération d'énergie peut être modélisée sous plusieurs formes, de telle manière que le saut d'enthalpie simplifié suit une droite inclinée (qui traduit des propriétés matériaux constantes pour chaque domaine, solide, pâteux et liquide) (Figure 3.10), ou alors de façon plus complexe comme proposé par le logiciel thermodynamique JMatPro (Figure 3.11).

---

44. Notamment par l'usage d'une "lumped capacitance matrix" qui permet l'obtention de meilleurs résultats. [Pham, 1986]

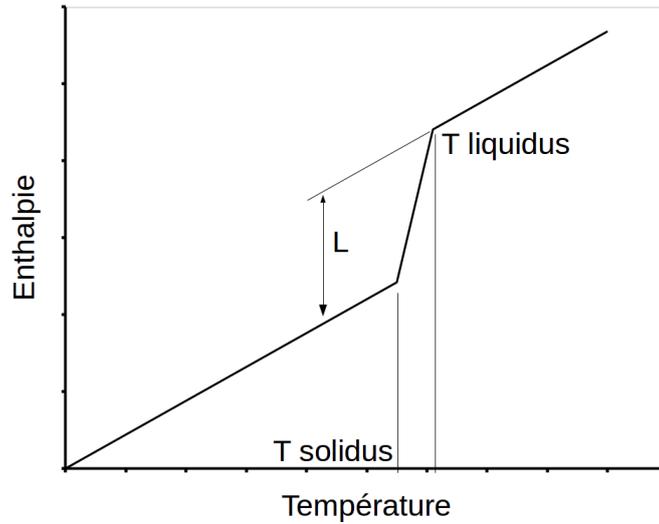


FIGURE 3.10 – Tracé schématique de l’enthalpie en fonction de la température pour un alliage à propriétés matériaux constantes par morceaux (Source : [Dantzig and Rappaz, 2009])

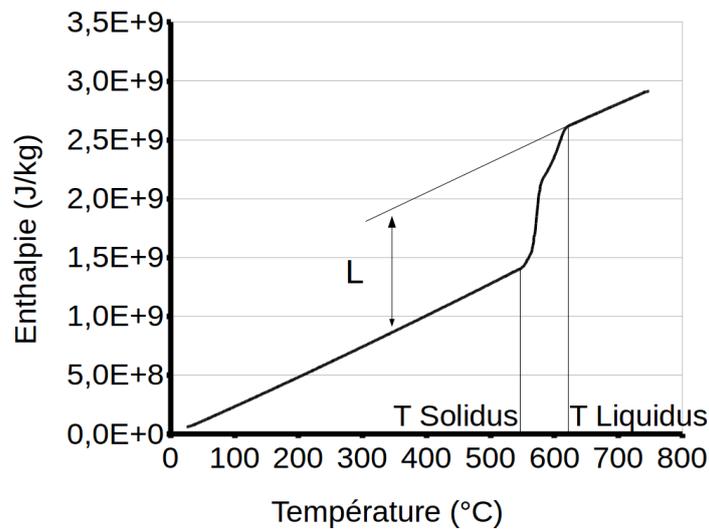


FIGURE 3.11 – Tracé de l’enthalpie en fonction de la température pour un alliage AlSi7Mg (Source : [JMatPro, 2014])

D’un point de vue théorique, il est possible de moyenner la formulation en espace ou en temps, c’est précisément ces deux modèles que nous allons détailler immédiatement.

### 3.8.1 Moyenne spatiale

Sur la base de l’expression de la différentielle de l’enthalpie  $dH = \rho c_{p \text{ app}} dT$ , il est possible d’effectuer une différentiation par rapport à l’espace. Ce qui donne  $\frac{\partial H}{\partial x} = \rho c_{p \text{ app}} \frac{\partial T}{\partial x}$ . En isolant la capacité calorifique, on obtient :

$$\frac{\left\| \frac{\partial H}{\partial x} \right\|}{\left\| \frac{\partial T}{\partial x} \right\|} = \rho c_{p \text{ app}} \quad (3.19)$$

Ce qui est tout simplement un rapport de gradient spatial, l’un d’enthalpie, l’autre de température.

Ce rapport est le fondement des méthodes de type moyenne spatiale. A partir de là, plusieurs auteurs ont proposé des expressions.

[Comini et al., 1974, Morgan et al., 1978] ont proposés :

$$\rho c_{p \text{ app}} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial H}{\partial y} \right) \quad (3.20)$$

[Lemmon, 1979] a proposé<sup>45</sup> :

$$\rho c_{p \text{ app}} = \sqrt{\frac{(\frac{\partial H}{\partial x})^2}{(\frac{\partial T}{\partial x})^2} + \frac{(\frac{\partial H}{\partial y})^2}{(\frac{\partial T}{\partial y})^2}} \quad (3.21)$$

[Del Giudice et al., 1978] proposa pour un modèle 2D des dérivées spatiales croisées :

$$\rho c_{p \text{ app}} = \sqrt{\frac{(\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y})}{(\frac{\partial T}{\partial x})^2} + \frac{(\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial y})}{(\frac{\partial T}{\partial x})^2}} \quad (3.22)$$

[Rolph and Bathe, 1982] fait toutefois remarquer que le pas de temps doit être suffisamment petit pour ne pas manquer le changement de phase. C'est à dire qu'il doit être plus petit que le temps nécessaire au changement de phase (temps pour passer du liquidus au solidus). Par conséquent, ces méthodes ne peuvent pas être employées pour des changements de phase isothermes.

[G. Comini and Saro., 1989, Comini et al., 1990] à la fin des années 1980 va un pas plus loin en proposant un schéma implicite centré :

$$\rho c_{p \text{ app}} = \frac{H^{n+1} - H^{n-1}}{T^{n+1} - T^{n-1}} \quad (3.23)$$

Il s'agit là d'une formulation de la capacité calorifique que nous retrouverons très prochainement dans la méthode enthalpique actuelle.

En regard de la moyenne spatiale, une moyenne temporelle peut être utilisé.

### 3.8.2 Moyenne temporelle

[Pham, 1995] défend l'idée que la moyenne temporelle est plus physique que celle spatiale, dans la mesure où si l'on divise l'équation mixte de la chaleur en enthalpie-température (Equation 2.1) par l'équation en température (Equation 2.2), nous obtenons une moyenne temporelle :

$$\frac{\frac{\partial H}{\partial t} = \dots}{\rho c_{p \text{ app}} \frac{\partial T}{\partial t} = \dots} \Rightarrow \rho c_{p \text{ app}} = \frac{\left\| \frac{\partial H}{\partial t} \right\|}{\left\| \frac{\partial T}{\partial t} \right\|} \quad (3.24)$$

De cette manière, la convergence vers la bonne solution est garantie, ce qui n'est pas le cas pour la moyenne spatiale. De manière générale, même si le schéma temporel semble plus efficace que le schéma spatial, il est moins répandu. Par ailleurs, de même que les moyennes spatiales, les moyennes temporelles ne peuvent pas être employées pour les corps purs d'après les auteurs

[Pham, 1995, Tamma and Namburu, 1990, C.R. and Voller, 1993].

Après cette introduction, intéressons nous à la méthode enthalpique comme proposée actuellement.

### 3.8.3 Algorithme de la méthode enthalpique

Dans la proposition "the three level enthalpy method" [Pham, 1995] évalue de la manière suivante la capacité calorifique apparente (Algorithme 4) :

45. Notons que cette expression a encore été utilisée par [Venkatesan et al., 2005]. Ce qui prouve l'utilité de ces approximations.

---

**Algorithme 4** Algorithme de la méthode enthalpie

---

**Boucle** en temps

A partir d'un pas de temps  $t^n$ , une température  $T(t^{n+\zeta})$  est évaluée par une extrapolation, et par suite  $k(T(t^{n+\zeta}))$

A partir de l'équation 2.1,  $h^{n+\zeta}$  est résolue par l'équation mixte de la chaleur

**Evaluation** de la capacité calorifique apparente comme  $c_{p\text{ app}} = \frac{h^{n+\zeta} - h^n}{T^{n+\zeta} - T^n}$

A partir de l'équation 2.2,  $T(t^{n+1})$  est calculé (équation de la chaleur en T)

**Si** bonne convergence alors sortie de l'évaluation

**Si** non ré-évaluation de la capacité calorifique apparente

---

---

**Algorithme 5** Algorithme de la méthode "Temperature Recovery Method"

---

**Boucle** en temps

A partir d'un pas de temps  $t^n$ , une température  $T(t^{n+1})$  est évaluée par une extrapolation, et par suite  $k(T(t^{n+1}))$

**Evaluation** à partir de l'équation 2.1 de  $h^{n+1}$  est résolu avec  $T(t^{n+1})$  par l'équation mixte de la chaleur

A partir de la figure 3.11,  $T^{n+1}$  est mise à jour

**Si** bonne convergence alors sortie de l'évaluation

**Si** non ré-évaluation de  $h^{n+1}$

---

Une alternative à cette méthode appelée "Temperature Recovery Method" (Algorithme 5), développée par [Tszeng et al., 1989, Dantzig and Rappaz, 2009] consiste à découpler la non linéarité d'avec la libération de chaleur latente. Ainsi, dans un schéma temporel implicite, le pas de temps suivant est évalué sans chaleur latente. Une fois ce terme trouvé, il est corrigé d'un incrément de chaleur latente, calculé à partir de la différence de température entre les deux pas de temps.

Nous constatons que la recherche du champ solution via l'équation de la chaleur, exprimée en enthalpie et en température a fait l'objet de nombreuses recherches.

Une autre méthode enthalpique, plus récente prend racine chez [Desbiolles et al., 1987, Magenes et al., 1987, Paolini et al., 1988] à la fin des années 1980. Elle a inspiré [Nedjar, 2002] au début des années 2000, sur la base de laquelle Feulvarch a proposé une méthode complémentaire que nous allons détailler [Feulvarch and Bergheau, 2007, Feulvarch et al., 2009, Feulvarch et al., 2011, Feulvarch et al., 2012, Feulvarch, 012a]. A notre tour, nous réaliserons une étape supplémentaire dans cette direction.

### 3.9 Méthode enthalpique, de Desbiolles à Feulvarch

L'équation mixte en enthalpie et température (Equation 2.1), présente deux inconnues. Elle est résolue via une méthode itérative alternée où l'enthalpie est fixée pour trouver la température, puis, connaissant la température, l'enthalpie est résolue. Nous allons développer ici deux alternatives à cette méthode.

Il est possible d'écrire une relation liant l'enthalpie et sa bijection comme suit où  $\tilde{T}(h)$  est issue des propriétés matériaux et où  $\tilde{T}(h)$  est la fonction inverse de l'enthalpie :

$$h(\mathbf{x}, t) = \tilde{h}(T(\mathbf{x}, t)) \iff T(\mathbf{x}, t) = \tilde{h}^{-1}(h(\mathbf{x}, t)) = \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t)) \quad (3.25)$$

En 1987, Desbiolles [Desbiolles et al., 1987] a traité l'équation de la chaleur par la méthode des Eléments Finis, appliqués pour un alliage, avec une solidification eutectique isotherme (soit un alliage binaire). Il s'est particulièrement intéressé à modéliser l'interface moule-alliage. Les propriétés matériaux de l'alliage étaient sous forme d'une courbe d'enthalpie en fonction de la température et d'un tableau pour la conductivité en fonction de la température avec quatre points de mesures. L'auteur avait donc

une équation mixte (Equation 2.1) et une relation de comportement enthalpie-température. Desbiolles a observé que la fonction enthalpie  $\tilde{h}(T)$  (Figure 3.12 gauche) était croissante et définie en tout point, de telle manière qu'il était possible de prendre sa fonction réciproque :  $T = \tilde{T}(h) = \tilde{h}^{-1}(h)$  (Figure 3.12 droite).

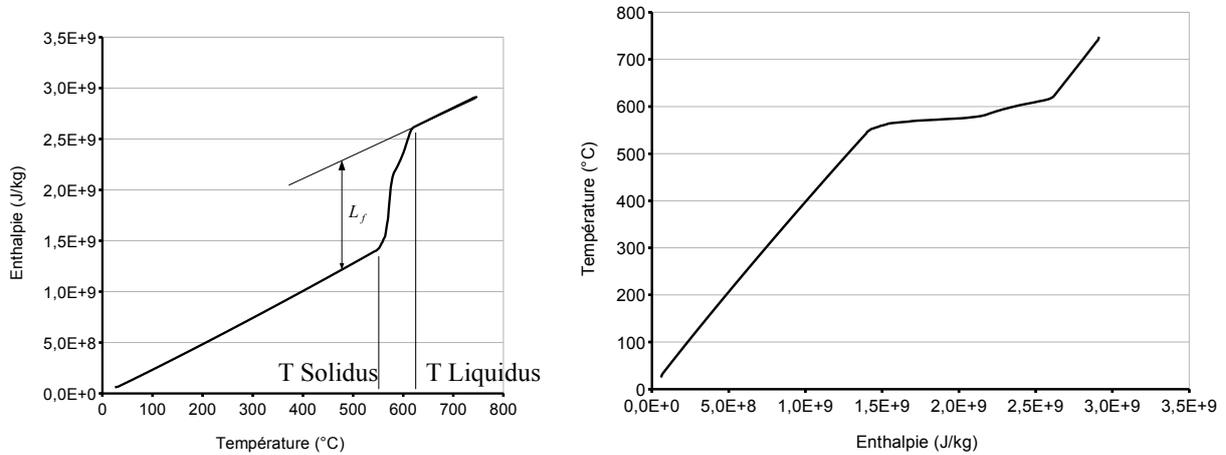


FIGURE 3.12 – Tracés de l’enthalpie en fonction de la température, régularisés par la méthode MLS [Breitkopf et al., 2005] (à gauche) et de sa bijection (à droite), pour un alliage AlSi7Mg

A cet instant, il y a trois manières de traiter le système obtenu :

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot [k(T(\mathbf{x}, t)) \nabla T(\mathbf{x}, t)] = 0 \\ T = \tilde{T}(h) \end{cases} \quad (3.26)$$

La première méthode (historique), détaillée précédemment consiste à utiliser des méthodes de moyennations spatiale ou temporelle.

### 3.9.1 Méthode proposée par Desbiolles

Une deuxième méthode, plus récente consiste à substituer la température de la première équation par son expression donnée comme loi de comportement par la seconde (Equation 3.26), où l’inconnue est  $h(\mathbf{x}, t)$  et la relation de comportement  $\tilde{T}$  est connue [Desbiolles et al., 1987]. Il est alors nécessaire de convertir les propriétés matériaux, notamment la conductivité en enthalpie :  $\hat{k}(h)$  (Equation 3.30).

$$\rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot [\hat{k}(h(\mathbf{x}, t)) \nabla \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t))] = 0 \quad (3.27)$$

C’est cette démarche que nous allons approfondir afin de faire la jonction entre la méthode de Desbiolles et celle de Feulvarch.

L’auteur [Desbiolles et al., 1987] se place dans le cadre de l’étude de la solidification d’un alliage dans un moule. Ainsi, l’ensemble à deux équations et deux inconnues (Equation 3.26) modélise l’alliage en cours de refroidissement, alors que l’équation simplifiée de la chaleur en température modélise le transport de chaleur dans le moule. En terme de propriétés matériaux, l’alliage est caractérisé par l’évolution de l’enthalpie en fonction de la température<sup>46</sup> avec une propriété de conductivité thermique définie en fonction de la température par un tableau de quatre points. Au cours de ce papier, une proposition est faite de ”remplacer T par  $\tilde{T}(h)$ ”, ceci après avoir observé que la fonction qui à T associe  $h(t)$

46. Il s’agit d’un alliage présentant un saut d’enthalpie à la température eutectique, puis une évolution quasi-linéaire jusqu’à la température de T liquidus. Cette propriété matériau est considérée comme étant un AlSi7Mg, le même que celui de notre étude. Toutefois, l’allure des propriétés que nous utilisons pour ce même matériau est très différente.

est continue et croissante sur le domaine, il est possible de prendre la réciproque : la fonction  $\tilde{T}$ . Et ainsi de résoudre la première équation du système avec une substitution de  $T$  par sa fonction  $\tilde{T}$ . Il suffit dès lors de résoudre cette nouvelle équation (Equation 3.27)

Ceci est précisément le fil rouge de notre travail. Nous sommes allés un pas plus loin en utilisant des propriétés matériaux provenant directement de l'industrie et en comparant cette méthode aux méthodes traditionnelles de modélisation, ce qui ne fut jamais fait jusqu'à présent. Egalement, nous allons détailler un peu mieux le cheminement pour arriver à cette équation en enthalpie seule (Equation 3.27) en partant du travail réalisé par [Nedjar, 2002, Feulvarch and Bergheau, 2007].

Enfin, la troisième méthode consiste à résoudre le système de deux équations et deux inconnues (Equation 3.26) par la méthode de Newton-Raphson, comme l'ont fait [Feulvarch and Bergheau, 2007, Feulvarch et al., 2009, Nedjar, 2002]. Cette méthode sera détaillée ci-après.

### 3.9.2 Méthode de Feulvarch

Sur cette base, nous pouvons constater qu'il existe plusieurs méthodes pour prendre en compte la libération de la chaleur latente de fusion. Certaines sur la base de l'équation de la chaleur exprimée en enthalpie, d'autres exprimées en température. Notre but est d'utiliser l'équation en enthalpie et en particulier le travail d'Eric Feulvarch pour adapter la formulation.

La méthode, présentée précédemment nécessite une adaptation afin de n'avoir qu'une équation et qu'une inconnue. En effet, par la méthode PGD, il n'a encore jamais été réalisé d'avoir deux champs de solutions modaux reliés par une loi de comportement. Ce point fera partie des perspectives.

La discrétisation EF de la relation de comportement  $\tilde{T}(h)$  nécessite une attention particulière, de même que sa dérivée [Despret, 2014, Dulong, 2014].

La méthode de Feulvarch consiste en la résolution simultanée par la méthode de Newton Raphson de deux équations à deux inconnues dont la seconde équation est une loi de comportement reliant les deux inconnues (Equation 3.26). Ce système est résolu à l'aide de la méthode de Newton-Raphson [Feulvarch and Bergheau, 2007, Feulvarch et al., 2009, Feulvarch et al., 2011, Feulvarch et al., 2012].

La méthode comporte deux avantages. Tout d'abord, la loi de comportement  $\tilde{T}$  qui relie l'enthalpie à la température est supposée connue, elle sera utilisée seulement au niveau élémentaire dans la méthode des éléments finis. Nedjar, sur les bases de Manges et Paolini, ajouta une étape supplémentaire en considérant que la courbe d'enthalpie est bijective [Magenes et al., 1987, Paolini et al., 1988, Nedjar, 2002]. La dérivée de la courbe d'enthalpie tend vers l'infini lors du changement de phase, alors que sa bijection tend vers zéro. Ainsi, au lieu d'être confronté à des dérivées (flèches en pointillées Figure 3.13) tendant vers l'infini de la fonction enthalpie, nous aurons des dérivées nulles.

Ensuite, du fait que la dérivée de l'enthalpie ne tende jamais vers l'infini, cette méthode présente l'avantage de rejeter la non linéarité dans le terme stationnaire de la première équation du système (Equation 3.26). Enfin, la résolution de ce système à deux équations permet une certaine "souplesse" dans la résolution ce qui offre une bonne convergence. D'où les bons résultats affichés par Feulvarch que nous retrouvons également. Egalement Feulvarch a conservé l'équation en température pour la raison qu'il souhaitait modéliser la recalescence sur la base de la méthode cinétique du changement de phase [Avrami, 1939]<sup>47</sup>.

Nous arrivons maintenant à la proposition que nous réalisons d'aller un pas plus loin.

### 3.10 Proposition de Méthode Feulvarch Modifiée (MFM)

Nous allons adapter une combinaison des deux méthodes proposées ci-avant avec des propriétés matériaux non linéaires issues de l'industrie. L'avantage de cette méthode appelée Méthode Feulvarch Modifiée (MFM) est d'une part qu'il n'y a qu'une formulation variationnelle faible à considérer, la fonction reliant l'enthalpie à la température est considérée comme une relation de comportement (comme nous pouvons en trouver en mécanique du solide). Comme cette méthode repose sur la bijection de la

---

47. Mais également dans les papiers du même auteur [Avrami, 1940, Avrami, 1941].

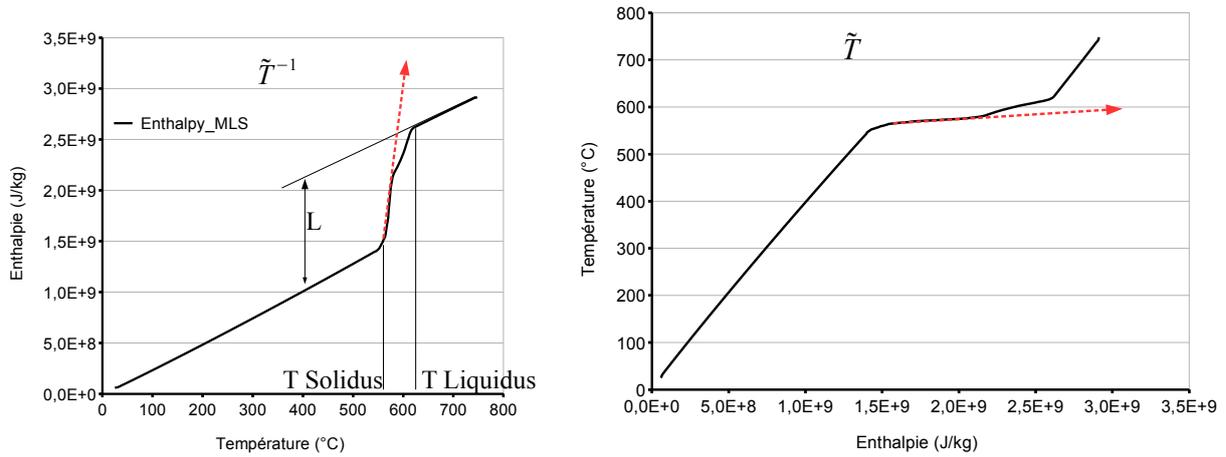


FIGURE 3.13 – Illustration de l’influence de la bijection de l’enthalpie sur le calcul de la matrice tangente à la température de changement de phase, dans le cas habituel (à gauche) la tangente tend vers l’infini alors que dans le cas de sa bijection (à droite), celle-ci tend vers 0

courbe d’enthalpie  $\tilde{h}(T)$ , afin de s’assurer la bonne continuité et dérivabilité de la fonction enthalpie, nous allons employer la méthode des moindres carrés mobiles (MLS), comme développée dans l’article [Breitkopf et al., 2005]. En prenant la bijection de la courbe enthalpie-température (Figure 3.12), on obtient la fonction que nous appellerons  $\tilde{T}$ .

Le changement de phase qui nous concerne est celui d’un alliage, qui solidifie sur un intervalle thermique, cela limite fortement ce type de problèmes de sauts. La courbe de bijection  $\tilde{T}$  ainsi obtenue est donc continue (nécessaire pour la discrétisation élément finis) et dérivable (nécessaire pour le calcul de matrice tangente), elle est donc de Classe  $C^1$ . Cela peut être garanti par l’emploi de la méthode MLS.

Nous pouvons constater qu’en 1987 Desbiolles et al. avaient déjà fait cette démarche et qu’ils avaient également utilisé un alliage se solidifiant sur un intervalle de température avec une conductivité dépendante de la température. Cela est en effet proche de ce que nous avançons ici, cependant l’objectif de l’auteur était de modéliser la résistance thermique d’une interface liquide-moule via un couplage thermique. Par ailleurs, depuis 1987, cette technique de substitution n’a jamais été réemployée et est très peu citée. Également, il est important de souligner la destination d’une telle démarche dans notre cas. Il ne s’agit pas pour nous d’établir une nouvelle formulation, mais bien d’aboutir à une résolution par la méthode PGD, ce qui n’a jamais été réalisé sur une équation strictement en enthalpie.

### 3.10.1 Formulation variationnelle et discrétisation

A partir du système d’équation (Equation 3.26), nous substituons la seconde équation qui est la relation de comportement dans la première. Cela nous donne une seule et unique équation (Equation 3.28). Cette équation est définie sur le domaine spatio-temporel  $\Omega \times [0, t_f]$  avec  $\Omega$  le domaine spatial et  $[0, t_f]$  le domaine temporel,  $t_f$  est le temps final. Les conditions aux bords et aux limites sont exprimées ici. Il est nécessaire de les exprimer en enthalpie<sup>48</sup>.

$$\rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot [\hat{k}(h(\mathbf{x}, t)) \nabla \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t))] \quad (3.28)$$

48. Cela peut poser des difficultés dans le cas de conditions fortement non linéaires, par exemple dans le cas du nucléaire où un fluide solidifie sur un intervalle de température très petit, de l’ordre de 10°C, mais avec une chaleur latente de fusion très importante. Ceci avec des conditions aux limites convectives, radiatives et conductives fortement non linéaires.

$$\begin{aligned}
-\hat{k}(h(\mathbf{x}, t)) \nabla \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t)) \mathbf{n} &= h_c(\tilde{T}(h(\mathbf{x}, t)) - T_{\text{ext}}) \forall \mathbf{x} \in \Gamma_C, \forall t \\
h(\mathbf{x}, t) &= \tilde{T}^{-1}(T_D(\mathbf{x}, t)) \text{ pour } \mathbf{x} \in \Gamma_D, \forall t \\
h(\mathbf{x}, 0) &= \tilde{T}^{-1}(T_0(\mathbf{x})) \text{ à } t = 0s
\end{aligned} \tag{3.29}$$

$h_c$  est le coefficient convectif appliqué sous forme d'une condition de Robin sur le bord  $\Gamma_C$ ,  $T_{\text{ext}}$  est la température du milieu éloigné de  $\Omega$ ,  $T_D$  est la température appliquée sous forme de Dirichlet sur le bord  $\Gamma_D$  avec  $\Gamma = \Gamma_C \cup \Gamma_D$ .  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal à la surface considérée.

### 3.10.2 Formulation forte

L'équation est en enthalpie (Equation 3.28), il faut donc exprimer la conductivité thermique comme  $k(h)$ , soit :

$$k(T) = k(\tilde{T}(h)) = \hat{k}(h) \tag{3.30}$$

Dans le but d'alléger la notation, nous considérerons à l'avenir que  $h = h(\mathbf{x}, t)$ , également  $T = T(\mathbf{x}, t)$ .

### 3.10.3 Formulation faible

De la même manière que les formulations développées dans la partie précédente, la formulation présente deux étapes. La première est la multiplication par une fonction poids  $h^*$ , la seconde est l'intégration spatiale de l'équation sur le domaine  $\Omega$ . Ce qui, après application du théorème de Green-Ostrogradski et en considérant les flux convectifs et imposés, ainsi que les températures imposées, nous donne :

$$\rho \int_{\Omega} \dot{h} h^* dV = - \int_{\Omega} \hat{k}(h) \nabla \tilde{T}(h) \nabla h^* dV - \int_{\Gamma_C} h_c(\tilde{T}(h) - T_{\text{ext}}) h^* dS \tag{3.31}$$

### 3.10.4 Discrétisation spatiale

La méthode standard des éléments finis (MEF) permet de discrétiser le champ recherché  $h(\mathbf{x}, t)$ , avec les fonctions de formes  $N(\mathbf{x})$  appliquées aux nœuds. De part le principe de Galerkin, la fonction test suit le même principe, soit :

$$h(\mathbf{x}, t) = \sum_i N_i(\mathbf{x}) h_i(t) = \mathbf{N}^T \mathbf{h} \tag{3.32}$$

$$h^* = \mathbf{N}^T \mathbf{h}^*$$

avec

$$h_i(t) = h(\mathbf{x}_i, t)$$

$\mathbf{x}_i$  est la coordonnée du nœud  $i$ . Cela signifie que nous acceptons implicitement l'hypothèse de continuité de la fonction enthalpie. Cela est bien le cas dans la mesure où d'une part nous travaillons avec un alliage qui se solidifie sur une plage de température et d'autre part où la courbe  $\tilde{T}(h)$  a été régularisée par la méthode MLS [Breitkopf et al., 2005] pour devenir de classe  $C^1$ .

**Discrétisation de la fonction  $\tilde{T}(h)$**  Tout comme pour la fonction enthalpie  $h(\mathbf{x}, t)$ , le champ de température  $T(\mathbf{x}, t)$  peut être approximé par la méthode des éléments finis de la façon suivante :

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_j N_j(\mathbf{x}) T_j(t) \tag{3.33}$$

De part le fait que les champs  $T(\mathbf{x}, t)$  et  $\tilde{T}(h(\mathbf{x}, t))$  sont égaux, nous obtenons que :

$$T(\mathbf{x}, t) = \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t)) = \tilde{T}\left(\sum_i N_i(\mathbf{x})h_i(t)\right) \quad (3.34)$$

Nous devons cependant garder à l'esprit que le comportement de la fonction  $\tilde{T}(h)$  est non linéaire, par conséquent, la somme ne peut pas être extraite. Nous considérons alors que :

$$T_j(t) = T(\mathbf{x}_j, t) = \tilde{T}(h(\mathbf{x}_j, t)) = \tilde{T}\left(\sum_i N_i(\mathbf{x}_j)h_i(t)\right) = \tilde{T}(h_j(t)) \quad (3.35)$$

avec  $N_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$  de part l'hypothèse de base des éléments finis. Enfin, nous pouvons exprimer  $\tilde{T}(h)$  comme :

$$\tilde{T}(h) = \sum_j N_j \tilde{T}(h_j) = \mathbf{N}^T \tilde{\mathbf{T}}(h) \quad (3.36)$$

**Discrétisation de  $\nabla(\tilde{T}(h))$**  De la même manière que précédemment,  $\nabla(\tilde{T}(h))$  est obtenu :

$$\nabla(\tilde{T}(h)) = \nabla\left(\sum_i N_i \tilde{T}(h_i)\right) = [\nabla \mathbf{N}]^T \tilde{\mathbf{T}}(h) \quad (3.37)$$

avec

$$\tilde{T} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

$$\begin{pmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_n \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{T}(h_1) \\ \vdots \\ \tilde{T}(h_n) \end{pmatrix}$$

Nous pouvons dès lors définir les matrices usuelles de masse  $[\mathbf{M}]$  et de conductivité  $[\mathbf{K}]$  :

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}]_{ij} &= \rho \int_{\Omega} [N_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x})] dV \\ [\mathbf{K}]_{ij}(t) &= \int_{\Omega} \hat{k}(h(\mathbf{x}, t)) [\nabla N_i(\mathbf{x})]^T \nabla N_j(\mathbf{x}) dV + \int_{\Gamma_c} h_c N_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x}) dS \\ F_i &= \int_{\Gamma_c} h_c T_{ext} N_i(\mathbf{x}) dS \end{aligned} \quad (3.38)$$

Nous pouvons également discrétiser le champ de conductivité  $\hat{k}(h)$  comme suit :

$$\hat{k}(h) = \sum_l \hat{k}(h_l) N_l = \mathbf{N}^T \hat{\mathbf{k}}(h)$$

Il nous faut introduire une matrice d'ordre 3  $[\mathbf{Z}]$ , qui nous sera utile dans l'expression ci-dessous :

$$\begin{aligned} [\mathbf{K}]_{ij}(h) &= \sum_l \hat{k}(h_l) \int_{\Omega} N_l(\mathbf{x}) [\nabla N_i(\mathbf{x})]^T \nabla N_j(\mathbf{x}) dV + h_c \int_{\Gamma_c} N_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x}) dS \\ &= \sum_l \hat{k}(h_l) [\mathbf{Z}]_{ij}^l + h_c \int_{\Gamma_c} N_i(\mathbf{x})N_j(\mathbf{x}) dS \end{aligned} \quad (3.39)$$

Ceci de telle manière que la formulation faible peut être écrite comme suit :

$$[\mathbf{M}]\dot{h} + [\mathbf{K}(h)]\tilde{\mathbf{T}}(h) = \mathbf{F} \quad (3.40)$$

### 3.10.5 Discrétisation temporelle

L'étape suivante est naturellement la discrétisation temporelle qui est obtenue par l'usage d'un schéma d'Euler implicite :  $\mathbf{h} = \frac{\mathbf{h}^{n+1} - \mathbf{h}^n}{\delta t}$ , ceci pour le pas de temps  $\delta t = t^{n+1} - t^n$ . Cela donne l'équation suivante :

$$[\mathbf{M}]\mathbf{h}^{n+1} + \delta t[\mathbf{K}(\mathbf{h}^{n+1})]\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{h}^{n+1}) = \tilde{\mathbf{F}}$$

avec

$$\tilde{\mathbf{F}} = \delta t\mathbf{F} + [\mathbf{M}]\mathbf{h}^n$$

Notons que le terme de droite  $\tilde{\mathbf{F}}$  est indépendant de l'inconnue  $\mathbf{h}^{n+1}$ . A partir de cet instant, nous allons utiliser la notation  $\mathbf{h}$ , sans exposant pour désigner l'inconnue  $\mathbf{h}^{n+1}$ .

### 3.10.6 Linéarisation par la méthode de Newton Raphson (MNR)

L'équation 3.40 est linéarisée par la méthode NR. Nous commençons par écrire son résidu  $\mathbf{r}$  :

$$\mathbf{r}(\mathbf{h}) = \tilde{\mathbf{F}} - [\mathbf{M}]\mathbf{h} - \delta t[\mathbf{K}(\mathbf{h})]\tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{h})$$

Son développement de Taylor à l'ordre 1 nous donne l'équation linéarisée suivante avec un incrément  $\delta\mathbf{h} = \mathbf{h}_{k+1} - \mathbf{h}_k$  :

$$-\frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{h}}_{/\mathbf{h}_k} \delta\mathbf{h} = \mathbf{r}(\mathbf{h}_k) \quad (3.41)$$

Le développement du résidu donne :

$$-\frac{d\mathbf{r}}{d\mathbf{h}} \delta\mathbf{h} = \sum_j \delta h_j \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial h_j} = \sum_j \{[\mathbf{M}]_{*j} \delta h_j + \delta t \hat{k}'(h_j) \delta h_j [\mathbf{Z}]^j \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{h}) + \delta t [\mathbf{K}(\mathbf{h})]_{*j} \tilde{\mathbf{T}}'(h_j) \delta h_j\} = 0$$

Finalement, la matrice tangente est écrite :

$$[\mathbf{A}_T(\mathbf{h})]_{*j} = [\mathbf{M}]_{*j} + \delta t \hat{k}'(h_j) [\mathbf{Z}]^j \tilde{\mathbf{T}}(\mathbf{h}) + \delta t [\mathbf{K}(\mathbf{h})]_{*j} \tilde{\mathbf{T}}'(h_j)$$

L'incrément d'enthalpie est identifié en résolvant l'équation 3.41. Afin de pouvoir inverser la matrice tangente  $[\mathbf{A}_T]$ , nous devons nous assurer qu'elle ne sera jamais nulle. Pour ce faire, la bijection de la fonction enthalpie-température nous montre que la dérivée de la fonction  $\tilde{\mathbf{T}}(h)$  est nulle autour de la température de l'eutectique. Toutefois, ce point ne soulève pas de problème car la matrice tangente est composée de la matrice masse  $[\mathbf{M}]$  qui est toujours positive. Par conséquent, aucun problème numérique n'est causé par la dérivation.

## 3.11 Résultats et comparaisons des méthodes implicites formulées en MFM et $C_{p,app}$ appliquées à un modèle 2D

De la même manière que jusqu'à présent, les méthodes seront appliquées à un modèle 2D d'éprouvette à retassures (Figure 2.4) déjà utilisé précédemment.

**Température en fonction du temps** Pour un MTSA (Maximum Time Step Allowed) de 1s, nous pouvons tracer l'évolution de la température au cours du temps. Nous constatons qu'au point de mesure, les deux courbes sont particulièrement en adéquation. Notamment, la zone de solidification est décrite de façon analogue.

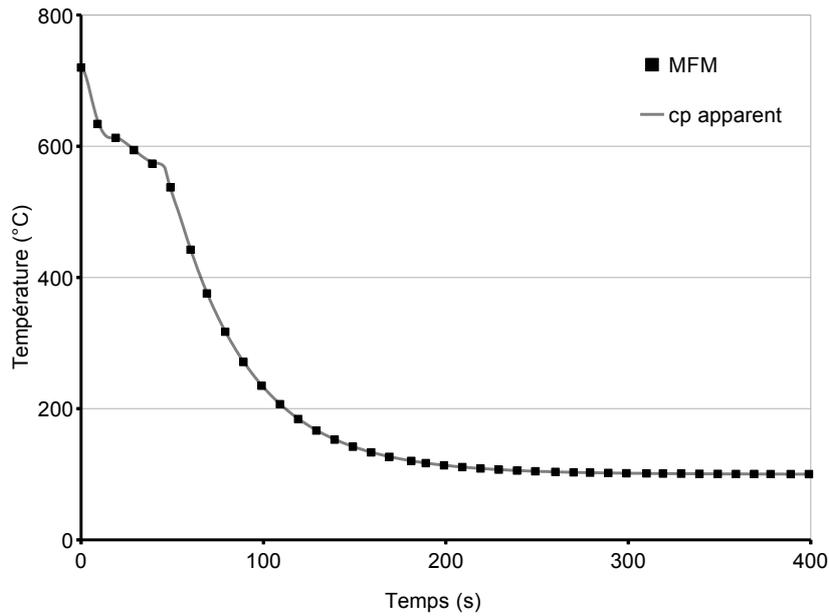


FIGURE 3.14 – Tracés de l'évolution de la température en fonction du temps pour les méthodes MFM et  $c_{p\text{ app}}$ , pour un  $MTSA=1s$

**Pas de temps cumulés** Le pas de temps cumulé est intéressant pour observer la progression du calcul et le nombre de pas de temps qu'il a fallu calculer. En particulier, il est toujours intéressant de comparer les premiers pas de temps d'une méthode.

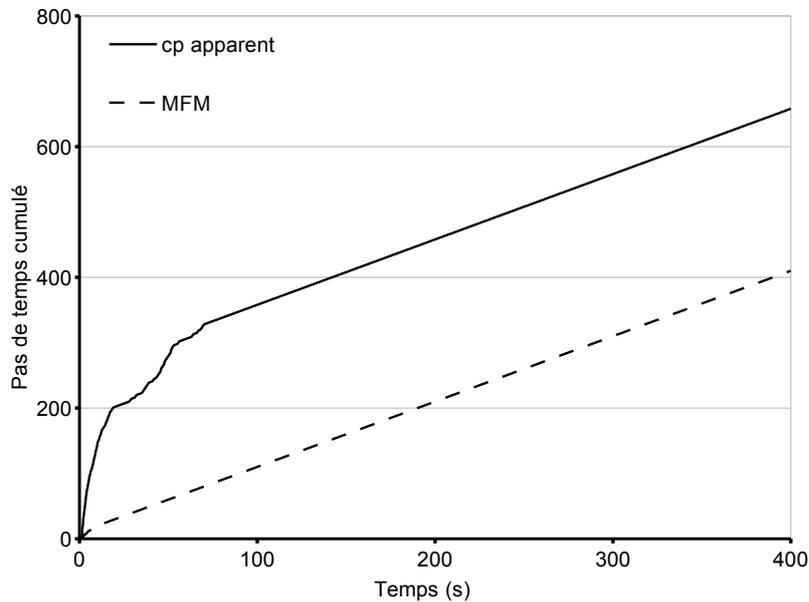


FIGURE 3.15 – Tracés des pas de temps cumulés au cours du temps de simulation pour les méthodes MFM et  $c_{p\text{ app}}$

D'une part, le pas de temps cumulé (Figure 3.15) montre que la méthode MFM est directe. Elle ne réduit jamais le pas de temps et traite une simulation de 400s, avec un  $MTSA = 1s$  en 400 pas. Ce qui n'est pas le cas de la méthode  $c_{p\text{ app}}$  qui au début de la simulation perd beaucoup de temps à réduire le pas pour capter la phase de solidification.

D'autre part, nous observons que le gain présente un rapport de 2 à 5 selon le  $MTSA$ .

Dans le cadre de la comparaison des méthodes avec capacité calorifique apparente et MFM, nous ignorons laquelle des deux méthodes est la plus proche de la vérité. Ces deux méthodes sont numériquement assez proche, suffisamment pour que nous utilisions un critère de "disparité" et non plus d' "erreur" comme précédemment<sup>49</sup>. Aussi, parce qu'il nous est nécessaire d'avoir un point de comparaison, nous avons choisi la méthode  $c_{p\ app}$  avec un pas de temps maximum MTSA égal à 0,1s. Ce pas de temps petit nous laisse penser que la convergence se fera vers la bonne solution.

**Gain et dispersion** Dans la mesure où ces deux méthodes font appel à une linéarisation par la méthode de Newton-Raphson, nous pouvons comparer le nombre d'itérations. Le gain est alors défini comme le rapport du nombre d'itérations Newton-raphson de la méthode  $c_{p\ app}$  sur le nombre d'itérations de la méthode MFM.

Ce critère est plus objectif que d'utiliser le temps de calcul qui est toujours sujet à optimisation du code, mais aussi au nombre de processeurs dédiés<sup>50</sup>.

Maintenant, le critère de disparité est exprimé comme

$$d = \max_t \left( \frac{\|T_{c_{p\ app}-0,1s} - T\|_{L_2}}{\|T_{c_{p\ app}-0,1s}\|_{L_2}} \right) * 100 \quad (3.42)$$

En d'autres termes, nous considérons comme référence la méthode  $c_{p\ app}$  avec un MTSA=0,1s et comparons l'écart à un champ de température T.

MTSA (s)	Gain MFM/ $c_{p\ app}$	Disparité $d(c_{p\ app})$ (%)	Disparité $d(\text{MFM})$ (%)
0,1	1,4	N/A (référence)	2,2
0,5	1,7	0,4	2,1
1	1,9	0,8	2,1
5	4,2	2,4	1,5
10	4,7	1,2	1,1
50	N/A	19,9	3,1

TABLE 7 – Tableau des gains et disparité pour différents MTSA

Au regard du tableau précédent (Tableau 7), nous constatons que les gains progressent de 1,4 fois à près de 5 au fur et à mesure de l'augmentation du MTSA. La méthode MFM fonctionne plus rapidement que la méthode  $c_{p\ app}$ . En regard, la disparité de la méthode  $c_{p\ app}$  est assez faible et celle de la méthode MFM présente un maximum à 2,2% ce qui est très acceptable en terme de méthode numérique. La disparité de la méthode MFM diminue avec l'augmentation du MTSA. Ce qui est plutôt inattendu mais tout à fait possible.

Toutefois, la dernière ligne du tableau pose question en ce que notamment la disparité de la méthode  $c_{p\ app}$  est grande comparée à celle produite par la méthode MFM. Il semble qu'il faille tracer cette dernière courbe.

49. Jusqu'à présent, nous avons utilisé la méthode avec  $c_{p\ app}$  comme référence. En effet, nous sommes bien conscients que la méthode PGD, de part l'approximation modale et la séparation de variable, peut créer un certain degré de doute, alors que la première méthode a été validée. Maintenant que nous comparons deux méthodes assez similaires, nous ne pouvons plus désigner une méthode comme "référence" plutôt que l'autre, car nous ne savons pas laquelle des deux est la plus proche de la vérité.

50. Notons que dans le cas précédemment développé de la comparaison entre la méthode PGD et la méthode  $c_{p\ app}$ , ce critère de gain n'est pas possible car il n'y a pas d'itération Newton-Raphson, mais un point fixe.

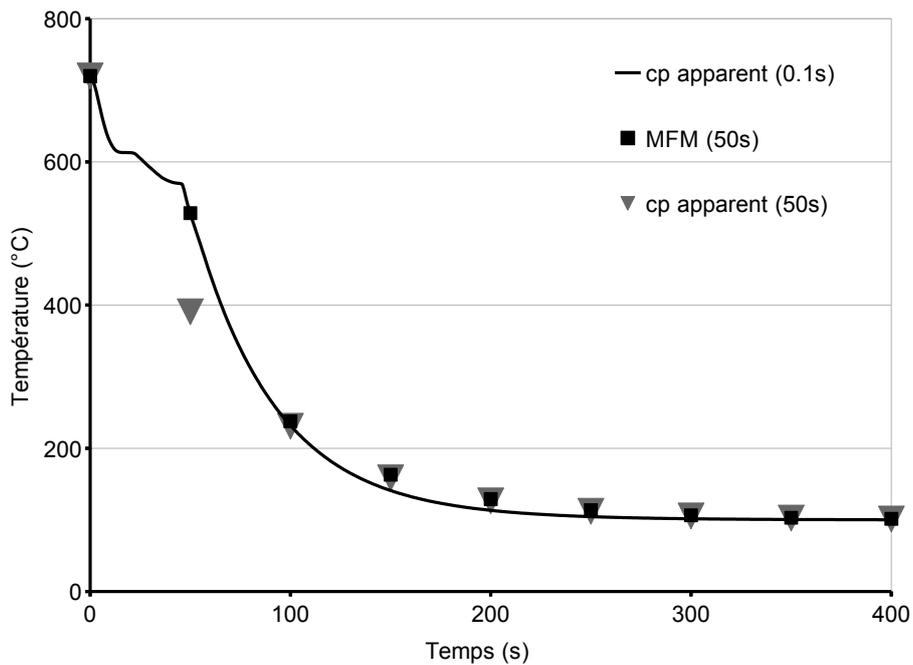


FIGURE 3.16 – Tracés des évolutions de la température avec un  $MTSA=50s$  pour la méthode MFM et celle avec  $c_{p\ app}$ , ceci en comparaison de la méthode avec  $c_{p\ app}$  et  $MTSA=0,1s$

**Large pas de temps** Ce graphe (Figure 3.16) est particulièrement intéressant à étudier car il met en relief la non conservation de l'énergie dans la méthode de référence. En effet, nous nous trouvons ici dans le cas de grands pas de temps. Ce qui implique pour le point que l'on étudie que le premier pas de temps est initial et le second à 50s est déjà au delà de la solidification. Rappelons que l'équation de référence repose sur une capacité apparente pour prendre en compte la libération d'énergie, alors que la méthode MFM est basée sur l'enthalpie (qui contient intrinsèquement la chaleur latente). En d'autres termes, dans le cas de référence, les propriétés employées sont passées de avant la solidification à après, sans que la chaleur latente n'ait été libérée, alors que pour un même pas de temps l'enthalpie est capable de prendre en compte la libération d'énergie, même si aucun pas de temps ne se trouve dans l'intervalle de solidification.

D'un point de vue global, dans l'éprouvette, nous pouvons penser qu'à 50s toutes les parties de la pièce n'auront pas encore solidifié et qu'une prise en compte locale de l'énergie libérée à cet endroit se fera via la diffusion thermique. Toujours est-il que le thermocouple virtuel se trouve là précisément "au dernier point de solidification". Lorsque celui-ci est solide, de facto, toutes les autres parties de la pièce le sont aussi. Il y a donc bien -non conservation- de l'énergie dans le cas de référence<sup>51</sup>.

Après avoir montré l'efficacité de la méthode MFM, même pour les grands pas de temps, nous arrivons à la dernière phase de notre développement qui consiste à résoudre la formulation de l'équation de la chaleur écrite sous forme MFM via la méthode PGD.

### 3.12 Méthode Feulvarch Modifiée et PGD

Nous arrivons ici à une étape importante de notre démarche, à savoir, appliquer la résolution PGD non plus à l'équation de la chaleur écrite en température, mais écrite strictement en enthalpie. Nous avons émis l'hypothèse que la difficulté provenait de la formulation qui obligeait à considérer une capacité calorifique "très pointue". Nous avons donc cherché à écrire l'équation de la chaleur exclusivement en enthalpie (nommée MFM), via la méthode développée par E. Feulvarch et basée sur les travaux de Desbiolles. Nous avons constaté que la méthode MFM donne de bons résultats. Nous souhaitons

51. Habituellement, le pas de temps adaptatif ramène les grands pas de temps à de plus petits, ce qui permet une conservation de l'énergie. Ici le pas à 50s a convergé directement...

appliquer la résolution par PGD à la formulation MFM. Ainsi, sur la base de l'équation MFM à une équation et une inconnue en enthalpie (Equation 3.28), nous allons expliciter sa discrétisation en éléments finis.

Reprenons l'équation de base

$$\rho \frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot [\hat{k}(h(\mathbf{x}, t)) \nabla \tilde{T}(h(\mathbf{x}, t))] \quad (3.43)$$

Nous pouvons maintenant exprimer la formulation variationnelle faible de cette expression :

$$\rho \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \dot{h} h^* dV dt = \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \hat{k} \nabla(\tilde{T}(h)) \nabla(h^*) dV dt - \int_{\Gamma_c} h_C (\tilde{T}(h) - T_\infty) h^* dS$$

Egalement, nous considérons que  $h^* \in \mathcal{T}_{adm}^0$  sur  $\Gamma_D$ .

Nous pouvons dès lors exprimer le résidu  $\mathbf{r}$  :

$$\mathbf{r} = \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \dot{h} h^* dV dt + \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \hat{k} \nabla(\tilde{T}(h)) \nabla(h^*) dV dt + \int_{\Gamma_c} h_C (\tilde{T}(h) - T_\infty) h^* dS$$

### 3.12.1 Discrétisation Éléments Finis

Attention, à partir de cet instant nous effectuons une restriction que nous n'avons pas encore faite jusqu'à présent. Nous considérerons une conductivité thermique  $k$  constante. Ceci afin de simplifier l'écriture des formulations. La prise en compte de  $k(T)$  sera réalisée en dehors de cette thèse.

Nous utiliserons les discrétisations suivantes :

$$\dot{\mathbf{h}} = \underline{\mathbf{N}}^T \mathbf{h} \frac{\partial \underline{\mathbf{P}}}{\partial t}; \mathbf{h}^* = \underline{\mathbf{N}}^T \mathbf{h}^*; \tilde{\mathbf{T}}(h) = \underline{\mathbf{N}}^T \underline{\mathbf{G}} \underline{\mathbf{P}}; \nabla \tilde{\mathbf{T}}(h) = \nabla(\underline{\mathbf{N}}^T) \underline{\mathbf{G}} \underline{\mathbf{P}}; \nabla^T \tilde{\mathbf{T}}(h) = \underline{\mathbf{P}}^T \underline{\mathbf{G}}^T \nabla \underline{\mathbf{N}}; \mathbf{h}^* = \mathbf{e}_i^T \cdot \mathbf{e}_j$$

sur cette base, réécrivons

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T \mathbf{h} \frac{\partial \underline{\mathbf{P}}}{\partial t} \underline{\mathbf{P}}_j dV dt + k \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \nabla \underline{\mathbf{N}}_i^T \cdot \nabla \underline{\mathbf{N}}^T \underline{\mathbf{G}} \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{P}}_j dV dt \\ &\quad + h_C \left[ \int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T \underline{\mathbf{G}} \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{P}}_j dS dt - \int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} T_\infty \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{P}}_j dS dt \right] \end{aligned}$$

de cette manière, il devient apparent qu'une séparation des équations en temps et en espace devient possible.

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \int_{\Omega_e} \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T dV \mathbf{h} \int_{\Omega_t} \frac{\partial \underline{\mathbf{P}}}{\partial t} \underline{\mathbf{P}}_j dt + \int_{\Omega_e} k \nabla \underline{\mathbf{N}}_i^T \cdot \nabla \underline{\mathbf{N}}^T dV \underline{\mathbf{G}} \int_{\Omega_t} \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{P}}_j dt \\ &\quad + \int_{\Gamma_c} h_C \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T dS \underline{\mathbf{G}} \int_{\Omega_t} \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{P}}_j dt - \int_{\Gamma_c} h_C T_\infty \underline{\mathbf{N}}_i^T dS \int_{\Omega_t} \underline{\mathbf{P}}_j dt \end{aligned}$$

En posant les matrices suivantes, il nous sera possible de condenser l'écriture

$$\underline{\mathbf{M}} = \int_{\Omega_e} \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T d; \underline{\mathbf{K}}_k = \int_{\Omega_e} k \nabla \underline{\mathbf{N}}_i^T \cdot \nabla \underline{\mathbf{N}}^T dV; \underline{\mathbf{K}}_c = \int_{\Gamma_c} h_C \underline{\mathbf{N}} \underline{\mathbf{N}}^T dS;$$

$$\underline{\mathbf{P}} = \int_{\Omega_t} \frac{\partial \underline{\mathbf{P}}}{\partial t} \underline{\mathbf{P}}_j dt; \underline{\mathbf{Q}} = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{P}}_j dt;$$

$$\underline{\mathbf{b}} = \int_{\Gamma_c} h_C T_\infty \underline{\mathbf{N}}_i^T dS; \underline{\mathbf{f}}_n = \int_{\Gamma_N} \underline{\mathbf{N}}_i^T \underline{\mathbf{N}}^T \varphi_N dS;$$

$\underline{d}^T = \int_{\Omega t} \underline{P}_j dt;$   
il devient

$$\mathbf{r} = \mathbf{MHP} + (\mathbf{K}_c + \mathbf{K}_k)\mathbf{G}(\mathbf{H})\mathbf{Q} + (\underline{f}_n - \underline{b})\underline{d}^T$$

on pose  $\mathbf{K} = (\mathbf{K}_c + \mathbf{K}_k)$

$$\mathbf{r} = \mathbf{MHP} + \mathbf{KG}(\mathbf{H})\mathbf{Q} + (\underline{f}_n - \underline{b})\underline{d}^T \quad (3.44)$$

Dès lors, nous pouvons écrire le résidu (Equation 3.44) suivant une gestion incrémentale de la non linéarité comme suit :

$$\mathbf{r} = \mathbf{MH}^{m+1}\mathbf{P} + \mathbf{KG}(\mathbf{H}^m)\mathbf{Q} + (\underline{f}_n - \underline{b})\underline{d}^T = 0 \quad (3.45)$$

soit

$$\mathbf{MH}^{m+1}\mathbf{P} = (\underline{b} - \underline{f}_n)\underline{d}^T - \mathbf{KG}(\mathbf{H}^m)\mathbf{Q} \quad (3.46)$$

Nous avons alors l'expression de l'enthalpie non linéaire gérée de manière incrémentale.

Une alternative, non testée dans ce manuscrit consiste en la linéarisation de la non linéarité matériau par la méthode de Newton-Raphson.

### 3.12.2 Linéarisation par la méthode Newton-Raphson

il faut maintenant dériver l'expression du résidu par rapport à la matrice H

Décomposons le résidu en deux parties  $\mathbf{A} = \mathbf{MHP}$

$$\mathbf{A}_{i,j} = \sum_{k,l} \mathbf{M}_{ik} \mathbf{H}_{kl} \mathbf{P}_{lj}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}_{ij}}{\partial \mathbf{H}_{mn}} \delta \mathbf{H}_{mn} = \left( \sum_{k,l} \mathbf{M}_{ik} \frac{\partial \mathbf{H}_{kl}}{\partial \mathbf{H}_{mn}} \mathbf{P}_{lj} \right) \cdot \delta \mathbf{H}_{mn}$$

$$\mathbf{M}_{im} \mathbf{P}_{nj} \delta \mathbf{H}_{mn} = \mathbf{M}_{im} \delta \mathbf{H}_{mn} \mathbf{P}_{nj} = \mathbf{M}_i \cdot \delta \mathbf{HP}_{.j}$$

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{KG}(\mathbf{H})\mathbf{Q} \text{ soit } \tilde{\mathbf{A}}_{i,j} = \sum_{k,l} \mathbf{K}_{ik} \mathbf{G}_{kl} \mathbf{Q}_{lj}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{A}}_{ij}}{\partial \mathbf{H}_{mn}} \delta \mathbf{H}_{mn} = \left( \sum_{k,l} \mathbf{K}_{ik} \frac{\partial \mathbf{G}_{kl}}{\partial \mathbf{H}_{mn}} \mathbf{Q}_{lj} \right) \cdot \delta \mathbf{H}_{mn} = (\mathbf{K}_{im} \mathbf{G}'_{mn} \mathbf{Q}_{nj}) \cdot \delta \mathbf{H}_{mn}$$

soit en posant  $\mathbf{B}_{mn} = \mathbf{G}'_{mn} \cdot \delta \mathbf{H}_{mn}$  on a

$$\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{BQ}_{.j}$$

soit finalement :

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{H}} \delta \mathbf{H}_{mn} = \mathbf{M} \delta \mathbf{HP} + \mathbf{KBQ}$$

on a donc la matrice tangente égale au résidu :

$$\mathbf{A}_T = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{H}} \delta \mathbf{H}_{mn} = \mathbf{M} \delta \mathbf{HP} + \mathbf{KBQ} = \mathbf{r} = \mathbf{MHP} + \mathbf{KG}(\mathbf{H})\mathbf{Q} + (\underline{f}_n - \underline{b})\underline{d}^T$$

Si maintenant, nous décidons de résoudre cette équation par la méthode PGD alors nous devons exprimer :

$$\delta H = \phi \mathbf{a}^T + \underline{R} \underline{S}^T$$

Nous pouvons exprimer la matrice tangente comme

$$\mathbf{A}_T = \mathbf{M} \phi \mathbf{a}^T \mathbf{P} + \mathbf{M} \underline{R} \underline{S}^T \mathbf{P} + \mathbf{K} \mathbf{G} \cdot * (\phi \mathbf{a}^T) \mathbf{Q} + \mathbf{K} \mathbf{G} \cdot * (\underline{R} \underline{S}^T) \mathbf{Q} = \mathbf{r}$$

on a donc à résoudre l'équation en R et en S suivante :

$$\mathbf{A}_T = \mathbf{M} \underline{R} \underline{S}^T \mathbf{P} + \mathbf{K} \mathbf{G} \cdot * (\underline{R} \underline{S}^T) \mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{r}}$$

Nous choisissons de résoudre par la méthode du point fixe. Pour ce faire, il faut d'abord projeter sur le vecteur S.

Projection sur le vecteur S pour trouver R

$$\mathbf{M}_{im} \underline{R}_m \underline{S}_n^T \mathbf{P}_{nn} \mathbf{S}_j + \mathbf{K}_{im} \underline{R}_m \mathbf{G}'_{mn} \underline{S}_n \mathbf{Q}_{nj} \mathbf{S}_j = \tilde{\mathbf{r}} \underline{S} = \underline{\mathbf{b}}^1$$

$$[(\underline{S}^T \mathbf{P} \underline{S}) \mathbf{M} + \mathbf{A}^1] \underline{R} = \underline{\mathbf{b}}^1 \quad (3.47)$$

avec  $\mathbf{A}^1 \underline{R} = \sum_m \mathbf{A}_{im}^1 \underline{R}_m = \sum_m \mathbf{K}_{im} \underline{c}_m \underline{R}_m$  où  $\underline{c}_m = \mathbf{G}'((\underline{Q} \underline{S}) \cdot * \underline{S})$  et  $\mathbf{A}^1 = \mathbf{K} \cdot * \text{diag}(\underline{c})$

Nous obtenons ici la première équation qui donne l'inconnue R.

Projection sur le vecteur R pour trouver S

$$(\underline{R}_i^T \mathbf{M}_{mm} \underline{R}_i) \underline{S}_j^T \mathbf{P}_{nj} + \underline{R}_i \mathbf{K}_{im} \underline{R}_m \mathbf{G}'_{mn} \underline{S}_n \mathbf{Q}_{nj} = \underline{R}^T \widetilde{\mathbf{R} \mathbf{E} \mathbf{S}} = \underline{\mathbf{b}}^2 \quad (3.48)$$

$$[(\underline{R}^T \mathbf{M} \underline{R}) \mathbf{P} + \mathbf{A}^2] \underline{S} = \underline{\mathbf{b}}^2$$

avec  $\mathbf{A}^2 \underline{S} = \sum_n \mathbf{A}_{in}^2 \underline{S}_n = \sum_n \mathbf{Q}_{in}^T \underline{c}_n \underline{S}_n$  où  $\underline{c}_n = \mathbf{G}'^T((\mathbf{K}^T \underline{R}) \cdot * \underline{R})$  et  $\mathbf{A}^2 = \mathbf{Q}^T \cdot * \text{diag}(\underline{c})$

Nous avons maintenant la seconde équation qui donne l'inconnue S.

De la même manière que précédemment, cette méthode permet l'obtention des deux inconnues R et S par la résolution successive alternée des équations en R et en S (Equations 3.47 et 3.48).

### 3.13 Résultats et comparaison des méthodes PGD avec formulation MFM et de référence appliquées à un modèle 1D

Nous utilisons ici le modèle présenté au début de cette partie (Figure 3.2). De la même manière que précédemment, nous avons deux moyens de procéder pour assouplir le modèle qui présente deux discontinuités (régularisation de la courbe de la capacité calorifique et croissance progressive de celle-ci).

Dans le cas de propriétés matériaux constantes par morceaux (Tableau 4) la méthode PGD avec formulation MFM ne converge pas. Même si une croissance progressive est appliquée (tout comme avec la formulation en capacité calorifique apparente). Si nous employons maintenant une capacité calorifique régularisée (Figure 3.7), cela donne, de part la définition de l'enthalpie (Equation 1.15) la figure de l'enthalpie régularisée ci-dessous (Figure 3.17).

Cette régularisation permet de rendre la fonction  $\tilde{T}(h)$  dérivable.

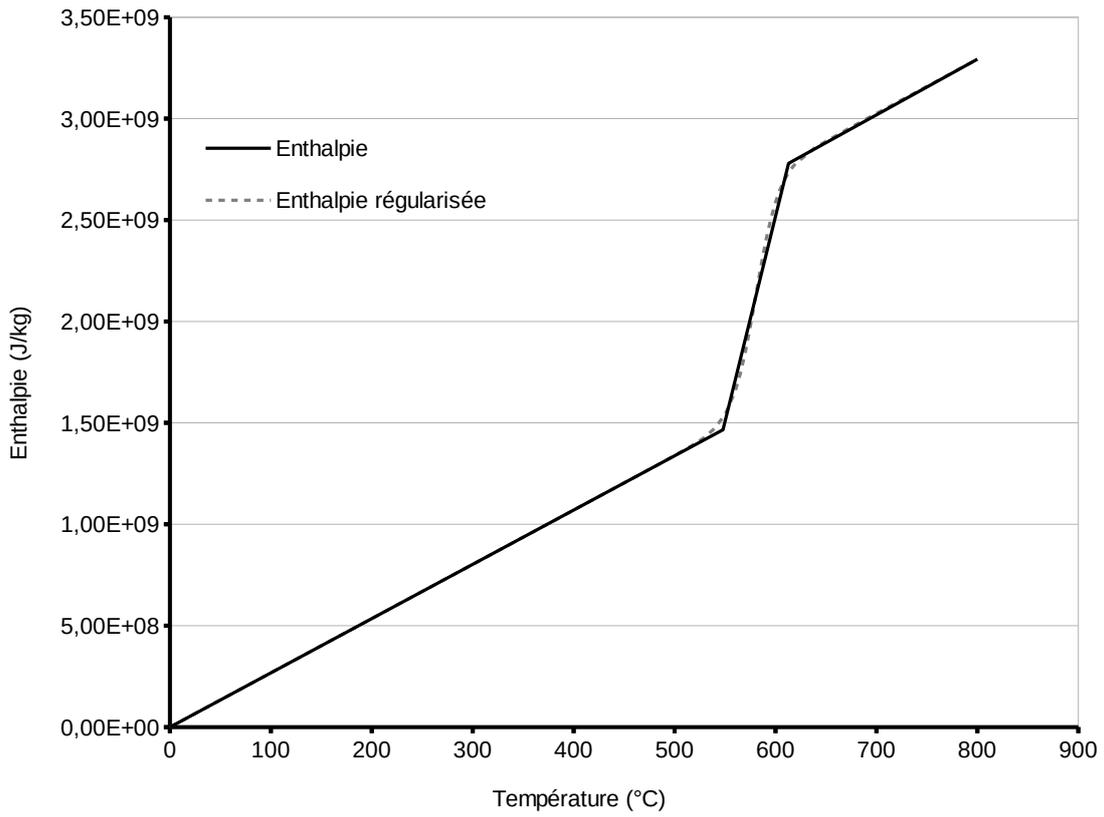


FIGURE 3.17 – Enthalpie et enthalpie régularisée

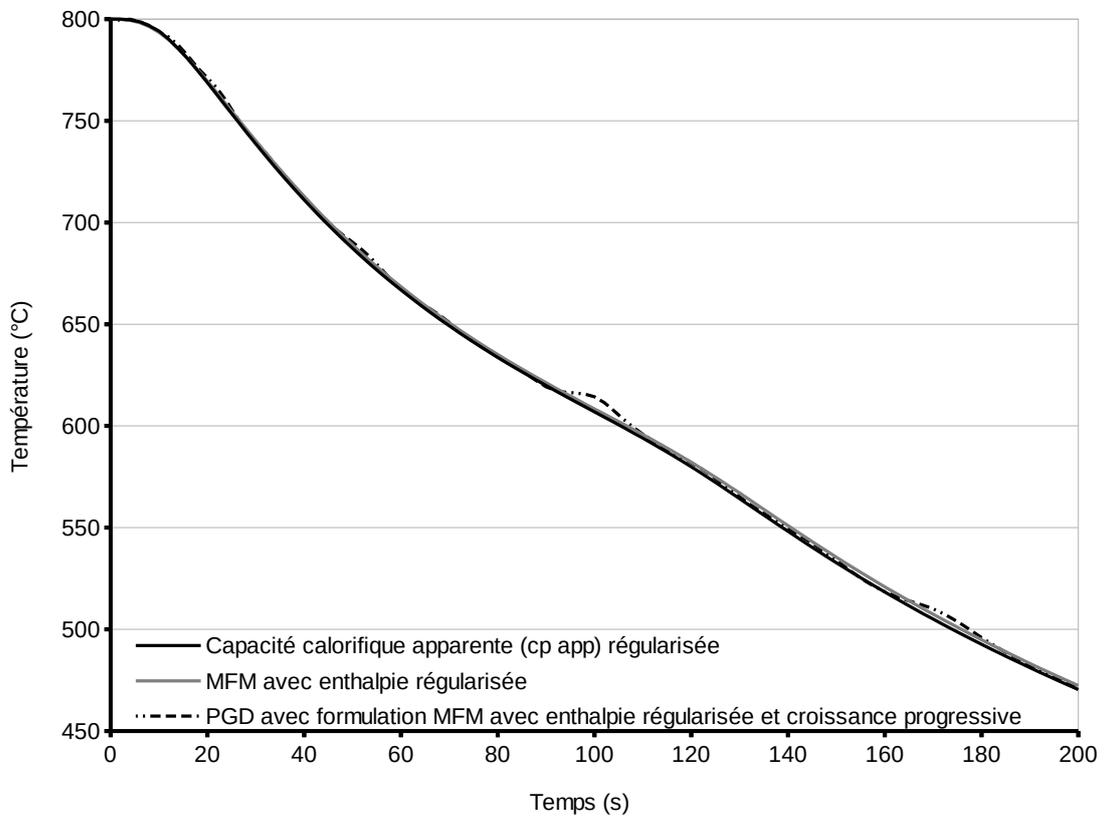


FIGURE 3.18 – Evolution temporelle de la température

Il est nécessaire d'appliquer une croissance progressive de la non linéarité pour obtenir un résultat avec la méthode PGD avec formulation MFM (courbe en tirets et pointilles) qui converge vers la bonne solution (Figure 3.18).

Rappelons ici que le cas exactement similaire (Figure 3.7), avec la PGD avec formulation  $c_{p\text{ app}}$  n'avait pas convergé vers la bonne solution ! La présente formulation offre donc un avantage net en étant capable d'accepter une forte discontinuité aux conditions aux limites (sans avoir à l'assouplir).

Concernant le temps de calcul, la PGD est alourdi par les 10 incréments nécessaire au passage de cette non linéarité, contrairement à la méthode de référence qui converge plus facilement, de telle sorte que la méthode PGD prend plus de temps que la méthode de référence.

Notons par ailleurs que nous retrouvons une même convergence des méthodes  $c_{p\text{ app}}$  (courbe noire) et MFM (courbe grise).

La suite logique serait d'appliquer cette méthode au modèle 2D, beaucoup moins discontinu (ce qui offre une perspective positive au regard de la méthode PGD avec formulation  $c_{p\text{ app}}$  qui ne converge pas sur notre modèle 1D mais qui offre un gain de 5 pour une erreur de 6% sur le modèle 2D. Cependant, cela sera réalisé en dehors de ce manuscrit.

### 3.14 Prise de recul sur la méthode enthalpique

Le champ d'enthalpie est discontinu, nous le savons au regard du tracé de l'enthalpie en fonction de la température (Figure 3.11). Le champ de température, quant à lui, est continu, pour la raison que la conductivité thermique conduit la chaleur continument.

Dès lors, si nous observons le champ d'enthalpie et le champ de température pour un même point sonde, par exemple sur un résultat 2D (803ddl) avec chaleur latente (résolution MFM (Figure 3.14)). Nous avons le champ d'enthalpie comme solution et nous interpolons la température suivant la propriété matériau (Figure 3.11), nous obtenons le diagramme suivant (Figure 3.19) qui superpose deux champs, la température et l'enthalpie.

Deux observations sont frappantes. La première concerne la partie de la courbe avant un temps de 50s. Nous observons que les deux évolutions sont plus ou moins chahutées et que globalement, l'enthalpie évolue de manière un peu plus linéaire que la température. Si nous réfléchissons en terme de modes qui pourraient décrire ces deux morceaux de courbes, la température présente un décrochage à environ 20s, qui n'est pas visible sur la courbe d'enthalpie. Donc, nous pouvons nous attendre à moins de modes pour l'enthalpie.

Cependant, regardons l'évolution des courbes à partir de 50s. Nous observons dans les deux cas un décrochage fort vers le bas, cependant, dans le cas de l'enthalpie, celui-ci est vertical, il y a discontinuité. Dans le cas de la température, la pente n'est pas verticale, elle est fortement inclinée mais continue. Nous pouvons nous attendre à ce que l'évolution de l'enthalpie nécessite beaucoup plus de modes pour être décrite que celle de la température.

Au delà des 100s, l'évolution est assez classique.

Cette discontinuité pose des questions en terme d'approximation des éléments finis car ces derniers ne sont pas adaptés pour la prendre en compte. En effet, une hypothèse fondamentale des éléments finis est l' "hypothèse de continuité du champ". Pour l'enthalpie nous observons les limites de la modélisation par la méthode FEM. Il faudrait alors s'orienter vers la méthode XFEM, initialement développée pour la simulation de fissures et les discontinuités fortes.

Ceci offre une interprétation pour expliquer la difficulté de convergence de la PGD avec MFM.

### 3.15 Conclusion du chapitre

Nous avons montré dans ce chapitre que la manière de prendre en compte des non linéarités matériaux détaillée en partie 2, via une discrétisation spatio-temporelle, est fonctionnelle également dans le cas de fortes non linéarités dues au changement de phase. D'une part, nous l'avons appliqué à l'équation de la chaleur en température seule et avons constaté qu'il serait peut être judicieux de nous tourner vers une autre formulation, notamment en enthalpie. La formulation enthalpique a déjà fait l'objet de recherches

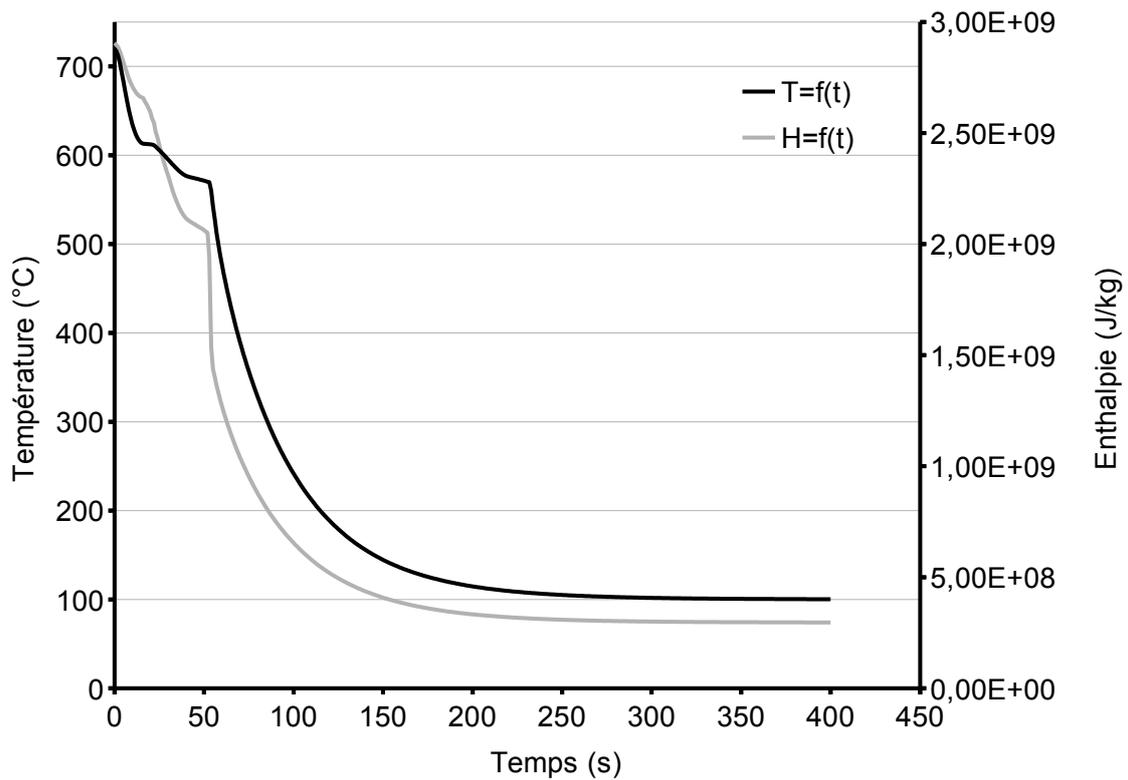


FIGURE 3.19 – Evolution de la température et de l’enthalpie pour 803ddl avec libération de chaleur latente

mais jamais appliquée à la PGD. Dès lors, il a été nécessaire pour nous de réécrire la formulation pour ne faire apparaître qu’une équation à une inconnue en enthalpie. Cette formulation a été testée par rapport à la méthode de référence et s’est montrée efficace offrant des gains de 5. Sur cette base, une résolution PGD a été réalisée.

La méthode PGD avec formulation MFM accepte des non linéarités plus fortes qu’avec la formulation en  $c_{p\text{ app}}$ . En effet, elle offre une solution correcte au modèle 1D avec forte discontinuité aux conditions limites, ce qui n’est pas le cas avec l’autre formulation.

### Points clés du chapitre

- Application de la méthode de résolution PGD à l’équation de la chaleur avec solidification en température
- Reformulation enthalpique de la méthode développée par E. Feulvarch en vue de ne fait apparaître qu’une équation à une inconnue
- Résolution de cette équation écrite uniquement en enthalpie par la méthode PGD dans le cas 1D avec croissance progressive de la non linéarité matériaux et obtention de bons résultats
- Mise en avant de la discontinuité du champ d’enthalpie par rapport au champ de température



# Travaux expérimentaux

## Quatrième partie

# Travaux expérimentaux

En parallèle des ces développements industriels, un questionnement récurrent sur la qualité de propriétés matériaux a été mené. En effet, nous savons combien les propriétés matériaux sont nécessaires au succès d'une simulation. Il est cependant constaté régulièrement des différences entre la simulation et la mesure réalisée sur le terrain. De telle manière qu'il a été observé que lors que la simulation est en accord avec l'expérience en un certain point d'une pièce, elle est en désaccord pour un autre point. Ce qui laisse à penser que la libération de chaleur latente doit se faire différemment en différents points de la pièce. Cette libération est fonction de la dérivée de la fraction solide. Aussi, une étude a été menée sur cette dernière afin de faire émerger des problématiques nouvelles de recherches, plus tournées vers l'expérimentation.

## 4 Travaux expérimentaux

### 4.1 Objectifs

Dans le cadre de cette thèse, un séjour dans un laboratoire partenaire, spécialisé en métallurgie a été organisé à l'initiative de l'entreprise Montupet. Le laboratoire Metal Processing Institute (MPI) de l'Université Worcester Polytechnic Institute (WPI), Massachusetts, Etats-Unis, dirigé par le Pr. Diran Apelian, a accueilli une partie des recherches de cette thèse durant deux séjours, le premier de 4 mois, le second de un mois. Ceci dans le but de réaliser des mesures expérimentales des propriétés matériaux, en particulier l'évolution de la fraction solide en fonction de la température pour différentes vitesses de refroidissement. En effet, il a été constaté industriellement que les courbes d'analyses thermiques enregistrées sur des culasses ne présentaient pas les mêmes températures de liquidus, solidus et eutectique selon le lieu d'enregistrement [TOMOPIC, ]. Par ailleurs, des écarts de températures entre les prédictions de la simulation et les mesures expérimentales montrent que des améliorations restent possibles en terme de prévision des températures de solidification. Pour preuve, le graphe ci-dessous (Figure 4.1) qui montre des écarts significatifs entre l'expérimental et la simulation sur logiciel commerciaux. L'expérimentation que nous allons réaliser n'est pas basée sur une culasse mais sur un échantillon plus petit.

Nous constatons sur le graphe ci-dessus (Figure 4.1) que les écarts entre simulation (logiciel Quik-cast) et mesures expérimentales semble cohérents lorsque le refroidissement est lent (au niveau de la masselotte), alors qu'un écart de l'ordre de 20°C se creuse pour des refroidissements rapides (proche de la semelle du moule).

Cette observation, répétée sur de nombreux modèles nous amène à nous questionner sur la justification de cet écart qui pourrait trouver son origine dans la vitesse de refroidissement.

Dans un procédé de type gravitaire, il existe un gradient thermique entre la partie inférieure du moule (semelle) et la partie supérieure (masselotte). Un refroidissement dirigé est donc réalisé depuis la semelle vers la masselotte. Ceci entraîne que une vitesse de refroidissement de la partie semelle plus élevée que la partie masselotte.

D'après la figure 4.1, nous observons des pentes à l'origine différentes pour les deux points (le refroidissement lent est de l'ordre de 0.30°C/s alors que le refroidissement rapide est de l'ordre de 2.4°C/s). Un lien peut être établi entre vitesse de refroidissement et températures de changement de phase liquidus, eutectique, solidus. Si les précédentes températures varient en fonction de la vitesse de refroidissement, il doit être de même pour la courbe de fraction solide en fonction de la température. Or, dans tous les modèles numériques développés précédemment, nous avons mis en évidence l'importance de la courbe de fraction solide (et plus précisément sa dérivée thermique) pour moduler la libération de chaleur latente.

Dès lors, les objectifs des expérimentations menées outre-atlantique étaient à différents niveaux :

0) Réalisation d'une expérimentation permettant d'acquérir une courbe d'analyse thermique pour différentes vitesses de refroidissement.

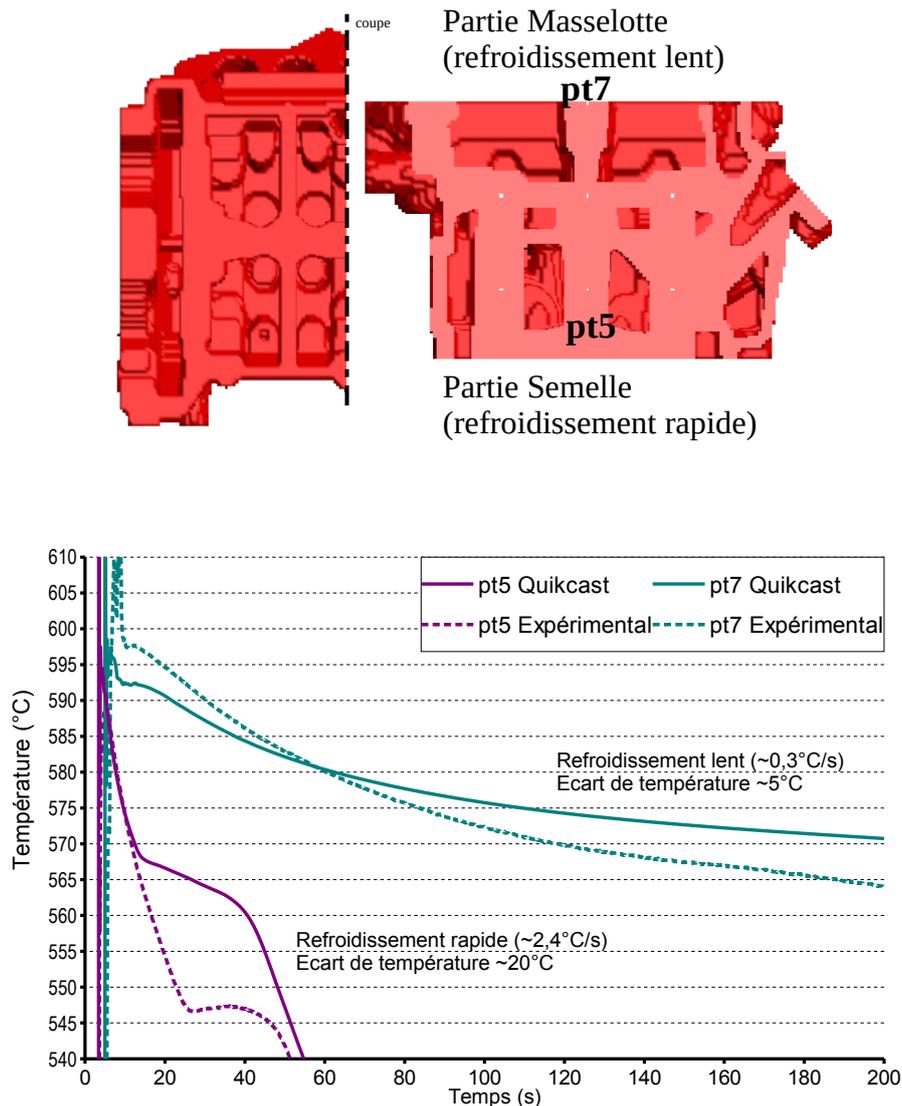


FIGURE 4.1 – Analyse thermique sur une culasse pour un alliage à base Al-Cu (Source : Montupet SA projet Tomopic)

1) Evaluation des températures liquidus, eutectique et solidus de l'alliage AlSi7Mg à partir d'analyses thermiques pour différentes vitesses de refroidissement.

2) Mise en évidence de la relation entre ces températures et la vitesse de refroidissement (notée  $\dot{T}$ ). La vitesse de refroidissement influence-t-elle ces températures ? (Si la température eutectique est diminuée lorsque la vitesse de refroidissement augmente, cela implique une modification de la courbe de fraction solide, avant et après cette température eutectique.)

3) Extraction des courbes de fraction solide à partir des courbes de refroidissement. Il existe des méthodes mathématiques qui font le lien entre la première dérivée et l'évolution de la fraction solide.

4) Trempe de certains échantillons, refroidis à différentes vitesses, durant l'intervalle de solidification, observation de la structure métallurgique figée pour en déduire la proportion de phase à l'état liquide et solide lors de la trempe.

En vue de réaliser ces objectifs, un dispositif expérimental ainsi qu'une méthodologie a été mise en place. Le doctorant Yangyang Fan du laboratoire WPI-MPI a guidé les réflexions pour établir cette expérimentation, m'offrant de précieux conseils tout en me laissant la liberté de la conception.

## 4.2 Dispositif expérimental et méthodologie

**Dispositif expérimental** Le schéma suivant (Figure 4.2) présente un four (1) cylindrique, alimenté électriquement, utilisé pour chauffer les échantillons placés à l'état solide dans un creuset (2). D'un diamètre extérieur de 45cm, le four présente deux entrées opposées. L'entrée supérieure d'un diamètre de 200mm et l'entrée inférieure d'un diamètre de 100mm. Le diamètre extérieur est de 400mm. Le four est placé sur une plaque (3) carrée en acier qui présente un trou (4) en son centre d'un diamètre de 15cm. Ce dernier est co-axial avec l'axe du cylindre. La plaque repose sur un bac (5) rempli d'eau (6). Deux isolants (7) amovibles, le premier, placé sur la partie supérieure du four est composé d'une part de deux morceaux rectangulaires, de taille de coté supérieure au rayon du four, placés côte à côte et de part et d'autre des fils de maintien du creuset. Le tout, doublé d'un film réfléchissant. Le second isolant, placé entre le four et la plaque est composé seulement du film réfléchissant. Une potence (8) est placée à côté du four, sur la plaque. Sur cette dernière sont accrochés deux fils d'acier qui maintiennent en place le creuset au milieu du four. Le creuset, cylindrique de diamètre 45mm pour une hauteur de 50mm, contient de l'alliage (9), d'abord solide puis à l'état liquide. La pointe d'un thermocouple (10) de type K Omega (Earth probe, de diamètre 3,2mm et de gauge inconnue, avec température maximale de 1070°C) est placée dans l'alliage liquide, sans potéyage sur sa pointe et longueur ni doigt de gant, et est reliée à un système informatique (11) d'enregistrement. Trois ventilateurs (non représentés) sont orientés vers l'entrée du four.

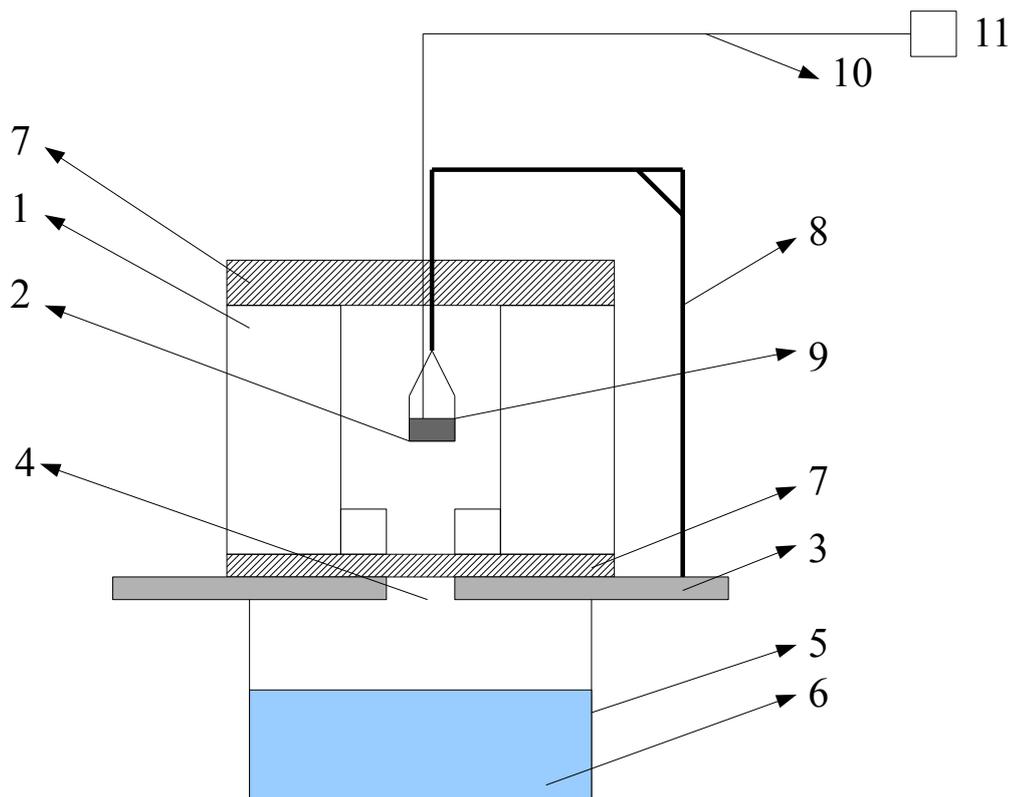


FIGURE 4.2 – Schéma du dispositif expérimental mis en place afin de mesurer la température au cours du refroidissement et de permettre une trempe de l'échantillon si cela est souhaité

Les images suivantes représentent le dispositif expérimental d'abord mis en place à titre de test, puis effectivement réalisé.



FIGURE 4.3 – Tests de mise en place du dispositif et premières mesures



FIGURE 4.4 – Photographie du dispositif expérimental effectivement utilisé en cours de chauffe



FIGURE 4.5 – Photographie du dispositif expérimental effectivement utilisé avec dispositif d’acquisition

**Méthodologie - Courbes de refroidissement** Un échantillon d’alliage solide AlSi7Mg est mis en place dans le creuset à l’état solide, ainsi que le thermocouple. Les isolants sont mis en place. L’alimentation électrique est branchée et la montée en température démarre. A 650°C, au dessus de la température de liquidus, l’échantillon est fondu et le thermocouple est correctement replacé au centre du creuset, ce qui permet d’homogénéiser la température, cependant, aucun brassage n’est réalisé pour homogénéiser l’alliage liquide (des éléments denses peuvent décanter au fond du creuset). A 700°C, l’enregistrement thermique commence, les isolants sont retirés ou non selon le refroidissement souhaité et l’alimentation électrique est coupée.

Sur la base de ce dispositif, plusieurs vitesses de refroidissement du four sont possibles :

1. Un refroidissement très lent peut être réalisé en laissant intact les isolants aux deux ouvertures. Le four est isolé de son environnement, on considèrera ce refroidissement comme étant un refroidissement "lent" du four.
2. Un deuxième type de refroidissement est possible, il consiste à retirer les isolants, ce qui permet une convection naturelle de la chaleur et ainsi une baisse plus rapide de la température de l’échantillon. Nous considèrerons un refroidissement "en convection naturelle" du four.
3. Enfin, une troisième méthode consiste à ajouter des ventilateurs autour du four de sorte à créer une extraction de l’air dans et autour d’un four, le refroidissement est donc encore plus rapide. Nous considèrerons un refroidissement "en convection forcé" du four.

Le refroidissement maximum atteint est de 1°C/s, ce qui est finalement peu. Sur une culasse, le refroidissement se produit entre 0,5°C/s et 3°C/s. Il serait possible d’améliorer cette vitesse en guidant mieux

N° de l'échantillon	Type de refroidissement	Température de trempe (°C)	Masse (g)
1	forcé	575	21
2	forcé	605	50
3	forcé	600	47
4	forcé	580	25
5	naturelle	610	51
6	naturelle	570	26
7	naturelle	603	48
8	lent	585	43
9	naturelle	610	48
10	naturelle	570	47
11	forcé	585	45
12	lent	572	50
13	forcé	610	44
14	naturelle	580	27
15	forcé	590	27

TABLE 8 – Récapitulatif des types de refroidissement, des températures de trempe ainsi que des masses des échantillons

le flux d'air dans la fournaise de manière à le faire circuler de façon laminaire. La conception d'une seconde expérimentation est en cours de telle manière à mieux contrôler la vitesse de refroidissement mais également de tripler la vitesse maximale.

Les échantillons ont tous été soumis au cycle suivant : montée en température, refroidissement complet (courbes d'analyse thermique), puis montée en température et trempe.

La quantité d'alliage a varié pour chaque expériences, ceci de part la découpe des échantillons. Le tableau ci-dessous (Tableau 8) synthétise les masses des échantillons trempés recueillis.

En terme de masse, nous observons deux types d'échantillons, d'une part des légers (5 échantillons, masse moyenne =25,2g , écart type =2,49g) et d'autre part les lourds (10 échantillons, masse moyenne =47,3g , écart type =2,66g). Il s'agit là d'un point d'amélioration que de considérer une seule et même masse d'échantillon, cela ne semble toutefois pas avoir causé de différence significatives.

Il est à noter par ailleurs, que des échantillons refroidis continûment doivent être conservés pour en analyser la microségrégation ainsi que la concentration de soluté dans les dendrites.

**Méthodologie - Trempe** Avec ce type de four à deux ouvertures, 15 échantillons trempés ont été réalisés dans l'intervalle de solidification. Ceci dans l'objectif de figer la microstructure et procéder à une analyse par image pour quantifier la phase liquide. Les deux ouvertures ont permis une trempe à une certaine température. Cette analyse sera effectuée en dehors de cette thèse car très chronophage.

La méthodologie de la trempe a consisté à suivre la baisse de la température sur l'ordinateur jouxtant l'expérimentation. 5°C avant la température de trempe souhaitée, les isolants sont rapidement retirés (selon le type de refroidissement) puis, tout en regardant l'écran, 1°C avant la température désirée, le creuset est lâché dans l'eau. Le temps de chute est inférieur à une seconde. Il est à noter que plus la température était proche de l'eutectique et plus le décrochage était difficile du thermocouple. En effet, nous ne pouvions pas laisser prisonnier le thermocouple dans l'échantillon, sous peine d'utiliser plus de 15 thermocouples, juste pour les trempes. C'est à dire que le thermocouple est resté fixé à la potence, il continuait donc d'enregistrer la température de l'intérieur du four et non pas celle de l'échantillon entré dans l'eau. L'enregistrement après le lâché a été stoppé et n'a pas été utilisé. Une voie d'amélioration consisterait à avoir plusieurs thermocouples disponibles ou bien d'utiliser un doigt de gant qui permettra soit de tremper le thermocouple avec l'échantillon, soit de le retirer et de ne laisse que le doigt de gant dans l'échantillon.

De la même manière que précédemment, le four est refroidi selon différentes vitesses, parmi les 3 précédentes, et sont trempés dans l'intervalle de solidification.

L'intérêt de cette trempe est le traitement des images métallographiques (réalisées hors de cette thèse), nous pouvons présenter ici des idées de méthodes de traitement des images.

**Analyse d'image** Le logiciel ImageJ semble présenter une aptitude, payante, au traitement d'images métallographiques. Nous n'avons pas utilisé ce logiciel dans cette thèse. Aussi, nous proposons ci-après quelques idées de traitement possibles. Les méthodes ci-après n'ont pas encore été développées.

**Analyse d'image : méthode 1** La démarche d'exploitation de images micrométallographiques obtenues pourrait être la suivante, basé sur le logiciel Matlab par exemple :

1. Identification des dendrites formée antérieurement à la trempe sur une image noir et blanc (Figure 4.6) ;
2. Contourage fermé de ces dendrites, dans un premier temps manuel (Figure 4.7). Une routine de sélection des zones pourra être développée.
3. Remplacement de ces dendrites par une couleur autre que blanc ou noir, par exemple le rouge (Figure 4.8) ;
4. Comptage des pixels blanc et noirs ;
5. Rapport entre les pixels précédemment compté et le nombre total de pixel de l'image.

Les dendrites formées avant le trempage sont bien visible. Elles sont grandes et bien dessinées car régulièrement formées. Les dendrites formées pendant/après la trempage sont beaucoup plus fines, sans forme bien visibles car créées brutalement.

Sur cette base, une importation de l'image dans Matlab [Mat, 2013] permettra via une courte routine d'évaluer le nombre de pixels rouges. Ce nombre sera rapporté au nombre de pixels de l'image ( $826 \times 1169$  pixels). Nous obtiendrons ainsi la fraction solide à l'instant de la trempe.

Compte tenu de l'hétérogénéité globale du refroidissement de l'échantillon (les bords sont refroidis plus vite que le cœur), il faudra d'une part :

- faire plusieurs images d'une même tranche (environ 5) ;
- couper plusieurs tranches d'un même échantillon (environ 3).

Ceci dans le but d'avoir une valeur moyenne sur l'ensemble de l'échantillon, en vue d'une fiabilité du résultat.

En terme de quantité de données, si nous prenons 5 photographies par tranche et 3 tranches par échantillon, sachant que nous avons 15 échantillons, cela nous amène à traiter  $15 \times 15$  images soit 225. Il est certain qu'une méthode automatique de détection des dendrites est nécessaire.

**Analyse d'image : méthode 2** Compte tenu du temps de traitement et du nombre d'image à analyser, il s'agit maintenant de détecter automatiquement l'aire des dendrites déjà formées avant la trempe. Pour ce faire, le nombre de pixels rouges et noirs compris dans un carré sera évalué. Comme la zone liquide lors de la trempe présente également des points rouges, il nous faudra mettre un seuil sur les points noirs au dessous duquel nous décidons s'il s'agit d'une dendrite formée avant la trempe.

Dans la mesure où les dendrites formées avant et après trempage sont bien distinctes, ce seuil devrait être facile à déterminer. Il y aura donc deux paramètres à régler : la taille du côté du carré ET le seuil de comptage. En terme de taille du carré de comptage, nous pouvons astucieusement penser au DAS, qui est la distance entre deux bras de dendrite. Sur la figure ci-dessous (Figure 4.9), nous observons que le plus petit carré, sensiblement de la taille d'un bras secondaire de dendrite est adapté à la mesure. Dans la mesure où cette évaluation serait automatisée, il serait possible de prendre la taille d'un côté comme égale au DAS/2. Cela permettrait d'éviter le bruit issu des bords des bras secondaires (visible en noir autour des dendrites formées avant la trempe).

En terme de seuil de comptage, au plus celui-ci sera élevé et au moins la fraction solide finalement évaluée sera faible. Pour calibrer ce seuil, il faudrait compter attentivement le nombre de pixels noirs

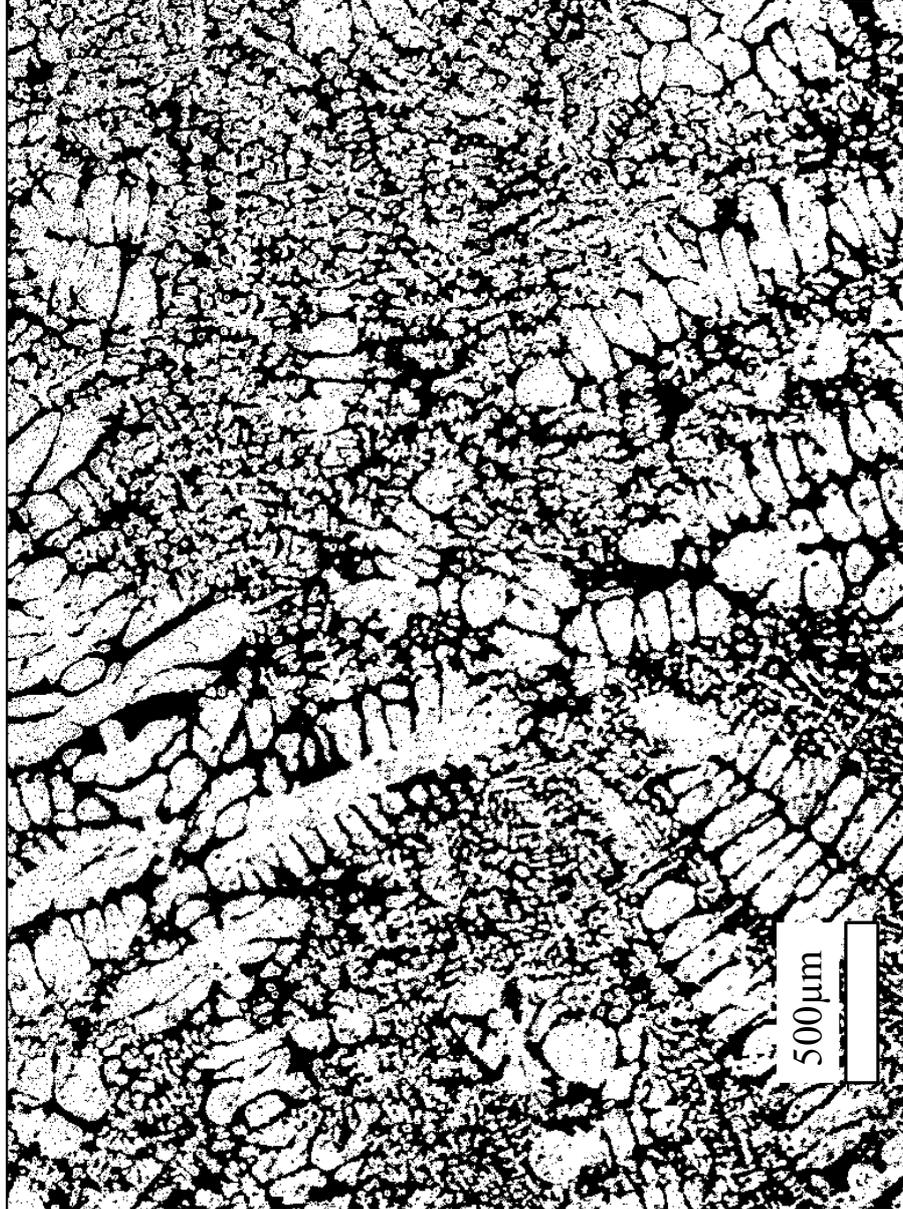


FIGURE 4.6 – Photographie noir et blanc d'un échantillon trempé. Observation des dendrites formées avant la trempe (grandes dendrites blanches) et de celles formées pendant (très petites dendrites regroupées entre les grandes).



FIGURE 4.7 – Contourage des dendrites formées avant la trempe

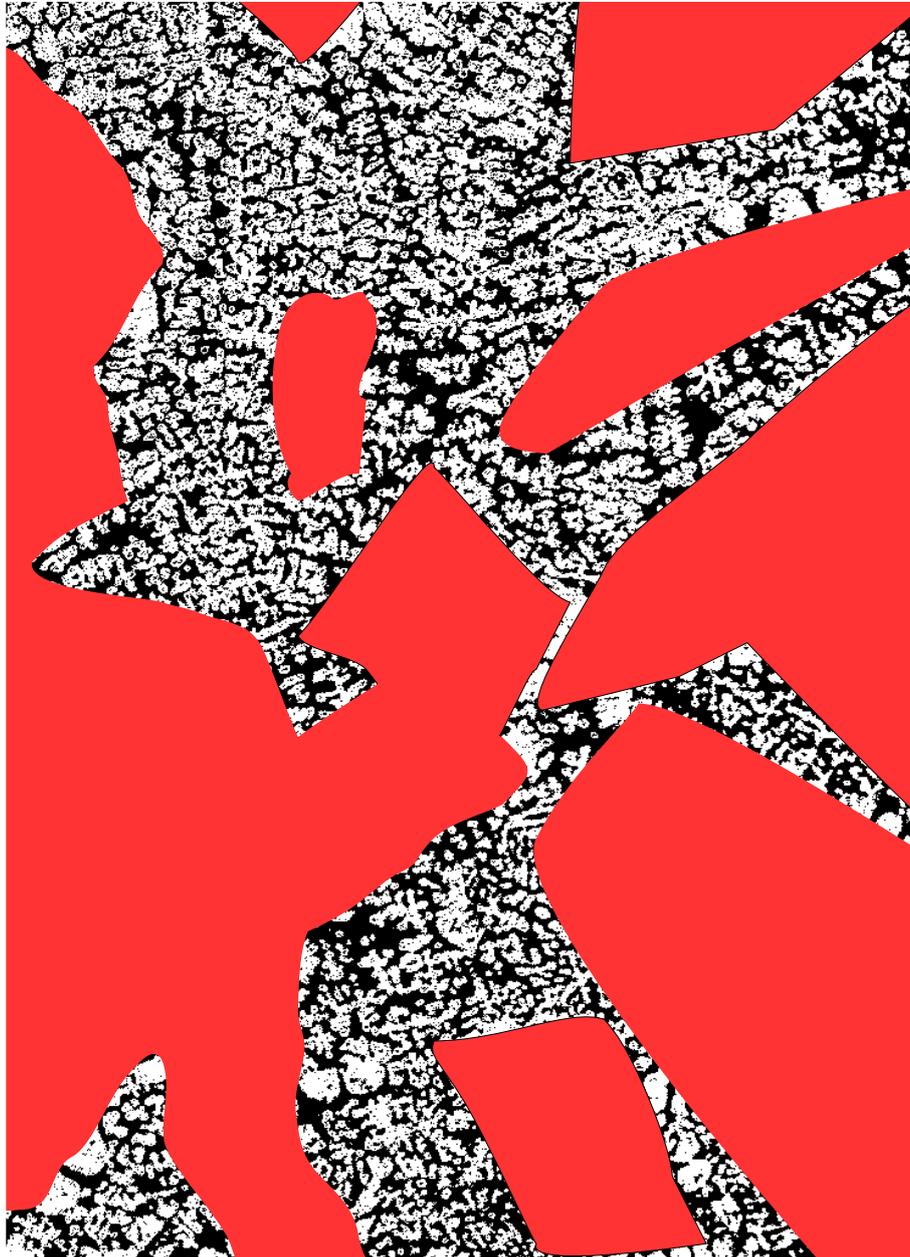


FIGURE 4.8 – Coloration du contourage afin de faciliter le calcul des surfaces (seules les dendrites formées pendant la trempe sont encore visibles)

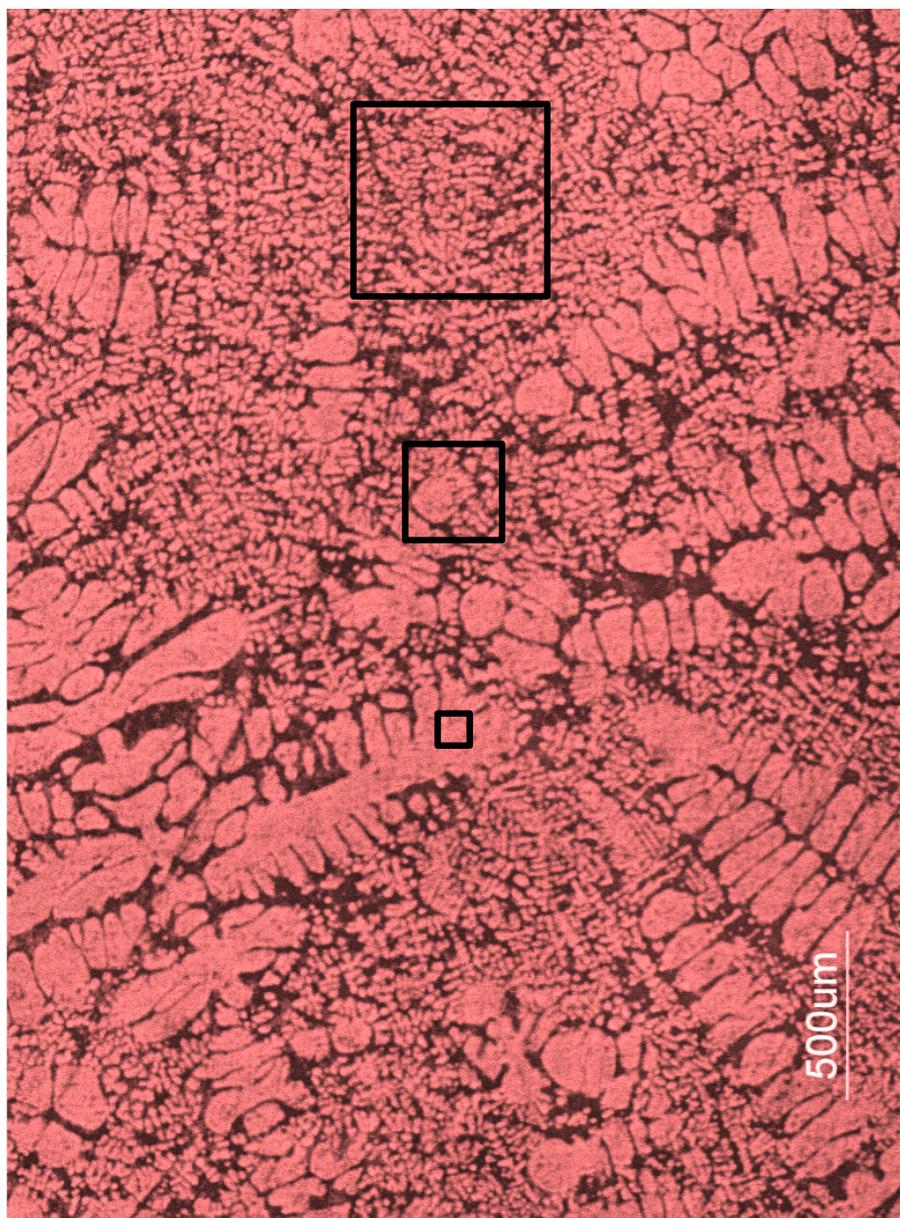


FIGURE 4.9 – Illustration du choix de la taille de la surface de mesure pour une identification automatique des dendrites

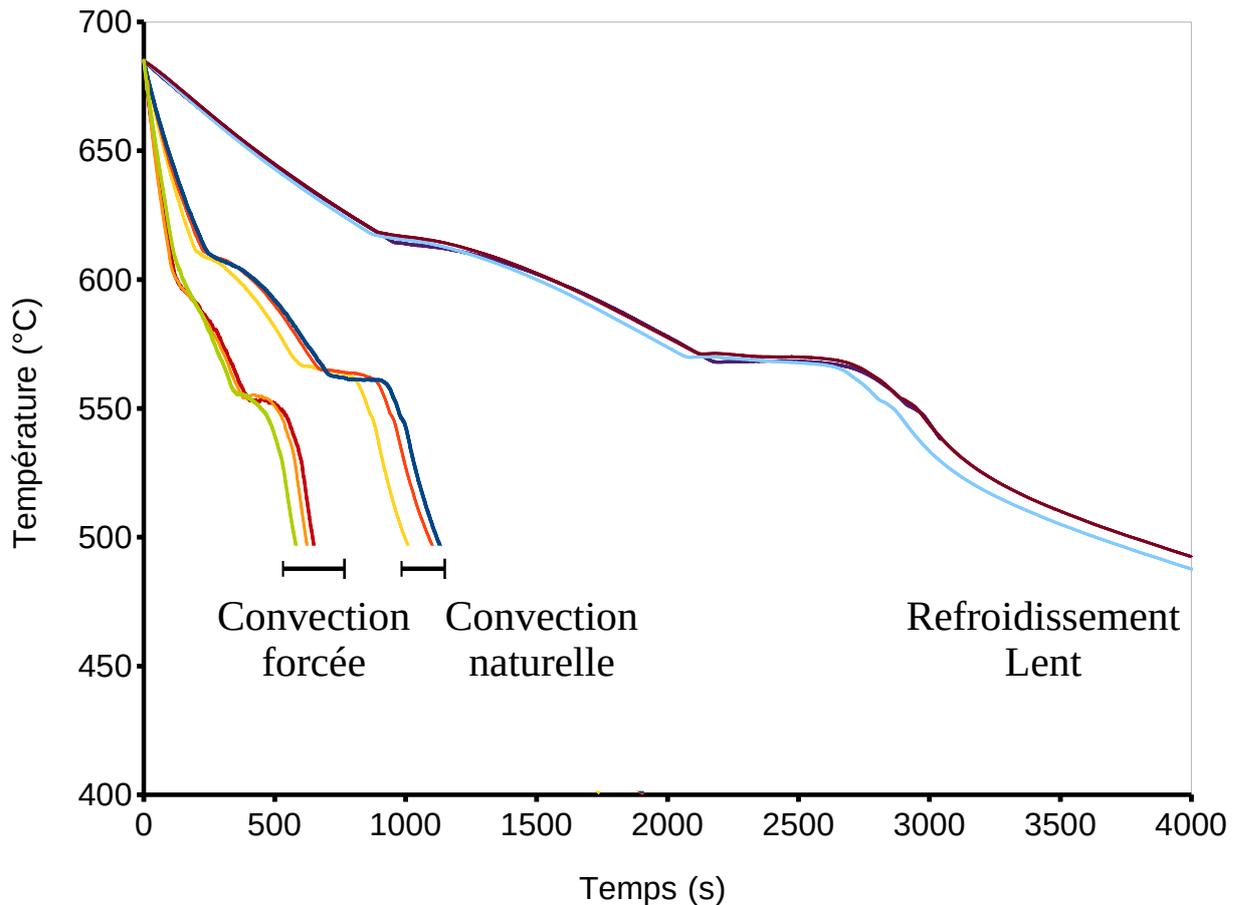


FIGURE 4.10 – Courbes de refroidissement expérimentales pour différentes vitesses de refroidissement

dans une dendrite, évaluer la surface de la dendrite de manière à obtenir une valeur moyenne par unité de surface. Cette dernière pourra permettre de déterminer une valeur de seuil cohérente.

Le comptage s'effectue comme suit :

1. Réglage de la taille du carré et du seuil ;
2. Sur l'ensemble de l'image, le carré est déplacé ;
3. Pour chaque carré, le nombre de points rouges est évalué, s'il est au dessus du seuil alors l'aire considérée est : Dendrite formée avant trempe ; si non : Dendrite formée après trempe ;
4. Le rapport des aires avant trempe sur aire totale est effectué pour obtenir la fraction solide à l'instant de trempe.

Cette démarche fera l'objet de travaux ultérieurs, en dehors de la thèse.

## 4.3 Courbes de refroidissement

### 4.3.1 Résultats bruts

Les différentes courbes de refroidissement obtenues sont présentées (Figure 4.10). Celles-ci indiquent l'évolution de la température au cours du temps pour les échantillons. Il est clairement possible de distinguer les différents types de refroidissement. Le refroidissement à l'équilibre a une pente très faible et demande beaucoup de temps pour se solidifier. Alors que les deux refroidissements, « naturel » et « forcé » sont bien plus rapides et brutaux.

De plus, nous observons que la décroissance de la température ne se fait pas de manière linéaire. Il est possible de distinguer trois points d'inflexion, des paliers stables et même des remontées de températures.

Ceux-ci traduisent des évènements métallurgiques dont nous souhaitons déterminer avec précision les températures auxquelles ils se produisent, en particulier, la température de liquidus, eutectique et de solidus et même la température de recalescence. Cette évaluation est possible via la dérivée temporelle première (Figure 4.11).

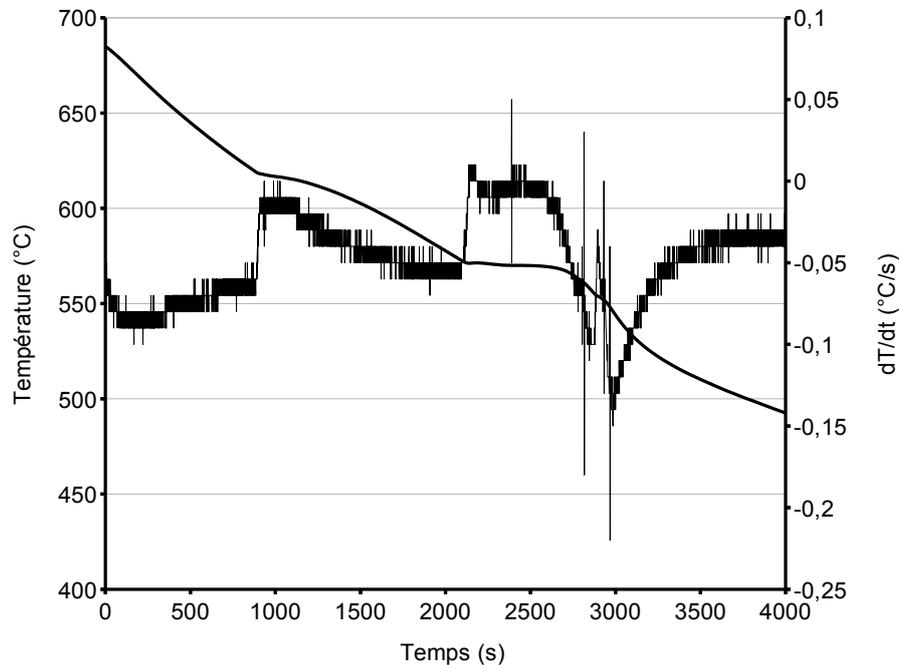


FIGURE 4.11 – Dérivée temporelle première d'une courbe de refroidissement

Bien évidemment, pour déterminer avec précision ces températures, l'œil ne suffit pas, ni même un zoom sur la courbe. Il est nécessaire de passer par la dérivée temporelle première. Tout point d'inflexion de la courbe de refroidissement se traduira par un changement de pente de sa première dérivée. Tout comme l'intervalle de temps de la surfusion/recalcescence se produit, par le passage de la dérivée en valeurs positives.

La fréquence d'enregistrement du capteur est à 10Hz. Cela implique que souvent, lors de l'enregistrement, la température enregistrée entre deux mesures varie très peu, voire est égale. La dérivée oscille et crée un fort bruit qui rend difficile l'évaluation des changements de pentes et donc des températures recherchées. Une première méthode consisterait à retirer quatre points sur cinq, cependant, nous perdriions de l'information. Il nous faut employer des méthodes de traitement du signal.

#### 4.3.2 Traitement du signal

Deux méthodes de traitement du signal ont été employées afin de faire apparaitre distinctement les informations recherchées [Breitkopf et al., 2005] :

1) Moyennes mobiles : à un instant  $t$ , la température  $T(t)$  est définie comme la moyenne des valeurs d'une fenêtre centrée sur cet instant. Cela se traduit mathématiquement par :

$$T(t) = \frac{1}{(2k+1)} \sum_{i=t-k}^{t+k} T(t_i) \quad (4.1)$$

Ceci sur une fenêtre d'un nombre de points  $[-k_1, +k_1]$  autour du point considéré  $t$ . Pour chaque instant, la nouvelle valeur de température calculée est placée en substitution de l'ancienne dans un nouveau vecteur dédié. Cela permet de lisser la courbe selon la taille de la fenêtre.

2) Moindre carrés mobiles : à partir du champ précédemment créé, une interpolation polynomiale de degré 2, qui minimise pour chaque point la distance à la courbe, est réalisée sur  $N$  températures appartenant à une fenêtre d'un nombre de points  $[-k_2, +k_2]$ .

Ces deux méthodes, codées sous Matlab permettent d'obtenir une meilleure qualité de signal, sans perdre d'information. C'est précisément ce dernier point qui présente un réel avantage car tous les points enregistrés contribuent également à la courbe finale.

Nous sommes maintenant en mesure de présenter des courbes et dérivées premières traitées.

### 4.3.3 Résultats traités

Nous observons sur les figures ci-dessous une meilleure qualité de la courbe, elle deviennent exploitables. Nous pouvons dès lors tracer la température et sa dérivée temporelle pour chacune des vitesses de refroidissement. Chacune des courbes présentées (Figure 4.10) a été filtrée par la méthode précédemment indiquée.

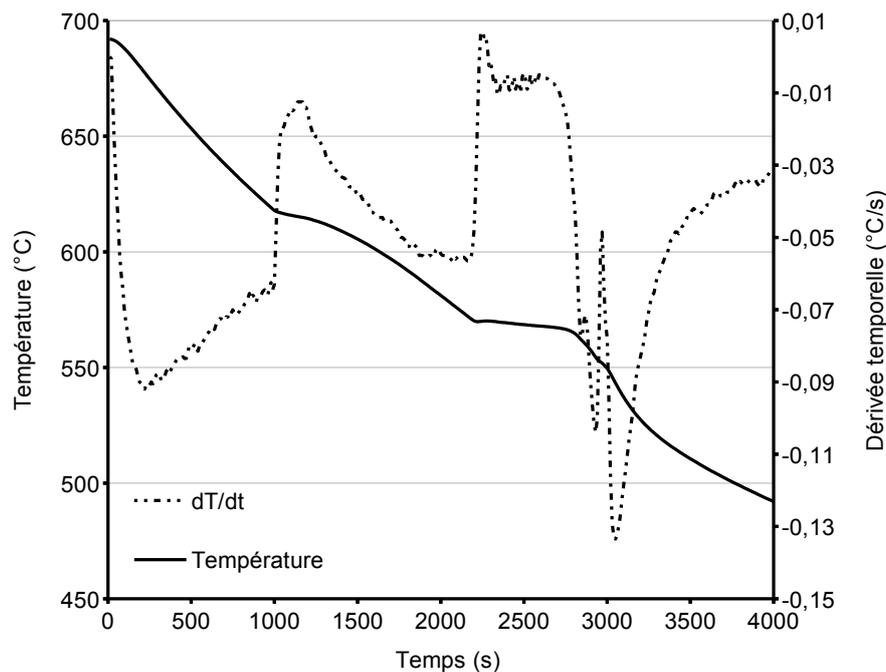


FIGURE 4.12 – Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en refroidissement lent du four

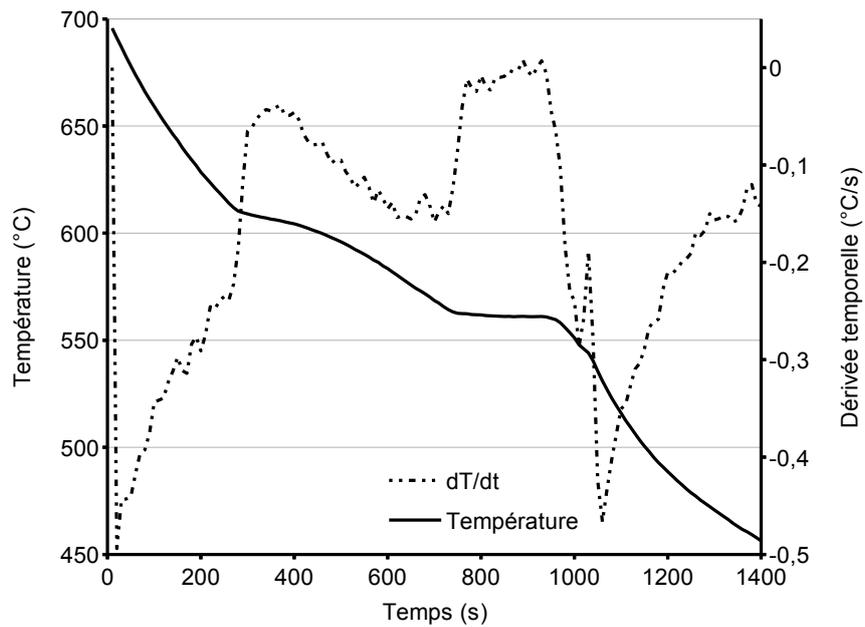


FIGURE 4.13 – Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en convection naturelle

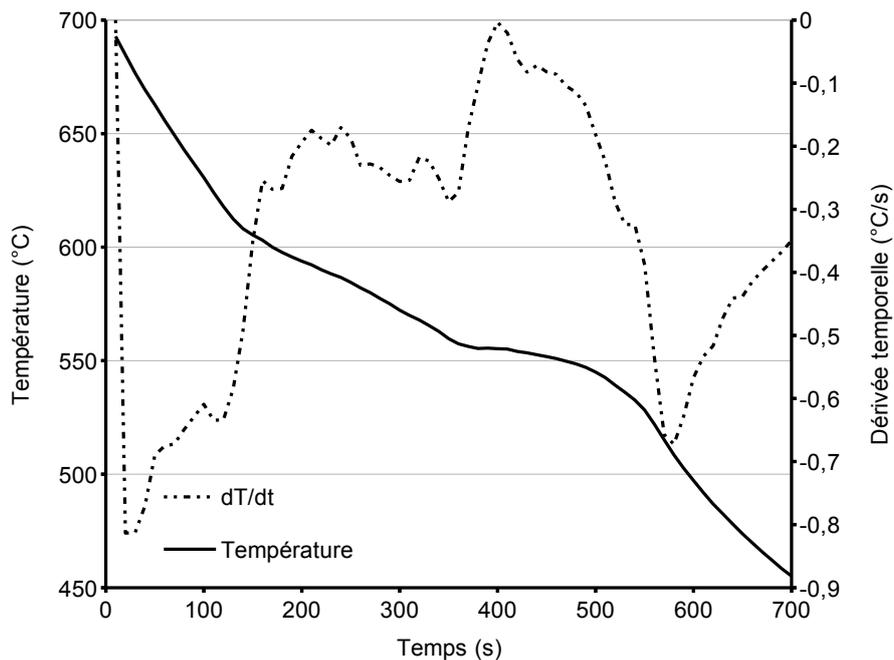


FIGURE 4.14 – Courbes de refroidissement et sa dérivée thermique en convection forcée

Sur la base de ces courbes, réalisées pour chacun des enregistrements, il est possible d'identifier les températures caractéristiques de liquidus, eutectique et solidus, ceci en fonction de la vitesse de refroidissement.

#### 4.4 Evolution des températures de liquidus, eutectique et solidus

Rappelons que notre objectif est d'évaluer l'effet de la vitesse de refroidissement sur la courbe de fraction solide donc à fortiori sur les températures importantes telles que le liquidus (début de la so-

lidification), l'eutectique (début de la croissance compétitive entre la phase alpha de l'aluminium et l'eutectique) et le solidus (fin de la solidification).

Avant le liquidus (Figure 4.10), nous observons une courbe de refroidissement assez linéaire. Nous définissons comme vitesse de refroidissement le coefficient directeur de la droite de régression linéaire de la courbe entre le début du refroidissement et le liquidus.

Le graphe ci-après présente l'évolution des températures importantes en fonction des types de refroidissement.

Type de refroidissement	T Liquidus	T Eutectique	T Solidus	Vitesse de refroidissement (°C/s)
convection forcée	609	560	544	0,50
convection forcée	604	555	532	0,66
convection forcée	603	554	541	0,78
convection forcée	600	553	534	0,75
convection naturelle	610	561	545	0,31
convection naturelle	610	564	547	0,33
convection naturelle	610	564	546	0,38
lent	618	570	554	0,06
lent	617	568	553	0,06
lent	614	570	551	0,07

TABLE 9 – Températures de changement de phase et vitesses de refroidissement pour différents types de refroidissements

Rappelons que ces valeurs sont issues de courbes de refroidissement dont le signal a été traité. Ceci nous permet de déterminer plus précisément les temps auxquels les sauts se produisent. En ayant l'instant du saut, nous pouvons lire la température à laquelle cela se produit.

Les nuages de points supérieur médian et inférieur représentent respectivement les températures de liquidus, eutectique et solidus. Les lignes horizontales foncées représentent les températures importantes utilisées dans les logiciels commerciaux de simulation de fonderie, pour l'alliage étudié AlSi7Mg.

Avec une vitesse maximale de moins de 1°C/s, nous ne couvrons pas le spectre total des vitesses de refroidissement enregistrées pour une culasse. Nous ne couvrons que le premier tiers. En effet, la gamme des vitesses de refroidissement d'une culasse va de 0,1°C/s à 3°C/S. Il est donc nécessaire d'engager une nouvelle campagne de mesures pour atteindre ces vitesses.

Type de refroidissement	Vitesse moyenne de refroidissement	nombre de valeurs
lent	-0,06°C/s	4
convection naturelle	-0,34°C/s	3
convection forcée	-0,67°C/s	3

TABLE 10 – Tableau des vitesses moyennes de refroidissement et du nombre de mesures effectuées

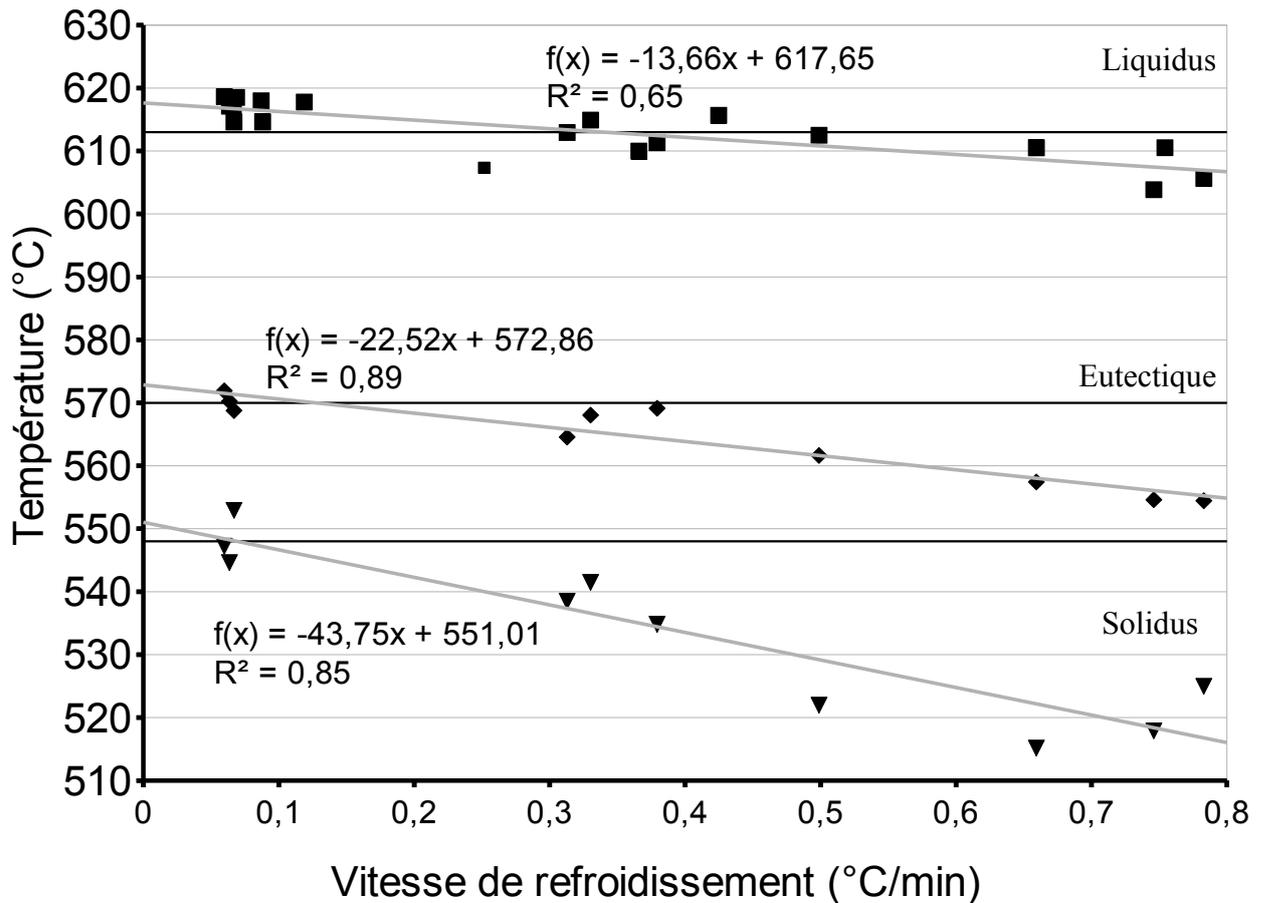


FIGURE 4.15 – Evolution des températures de changement de phases en fonction de la vitesse de refroidissement (les traits horizontaux représentent les températures données par JMatPro)

Il est à noter que les points de liquidus sont plus nombreux que les points d'eutectique ou de solidus. Ceci s'explique par le fait qu'aux enregistrements effectués par des refroidissements complets (10) s'ajoutent ceux issus des échantillons trempés (où seul apparait le liquidus).

Nous constatons que les trois droites de régression sont décroissantes. Ce qui implique que chacune des température liquidus, eutectique et solidus :

1. a été affectée par la vitesse de refroidissement ;
2. diminue avec l'augmentation de vitesse ;
3. a un écart qui se creuse par rapport à la valeur utilisée dans les logiciels commerciaux.

Nous constatons également que pour les trois températures, les données issues du logiciel de thermodynamique JMatPro correspondent assez bien à de faibles vitesses de refroidissement, en particulier dans le cas de la température eutectique et du solidus.

Si nous faisons un agrandissement autour de chacune de ces températures, nous observons une incertitude de lecture. En effet, à quel moment considérer la température de liquidus ou d'eutectique ? A la base ou au sommet du saut (4.16) ? La littérature offre des interprétations différentes de telle manière que nous déciderons de faire apparaître les deux extrêmes par des bornes supérieures et inférieures et prendrons le point moyen comme valeur. Les base et sommet sont matérialisés par des barres d'incertitude de lecture (Figure 4.17).

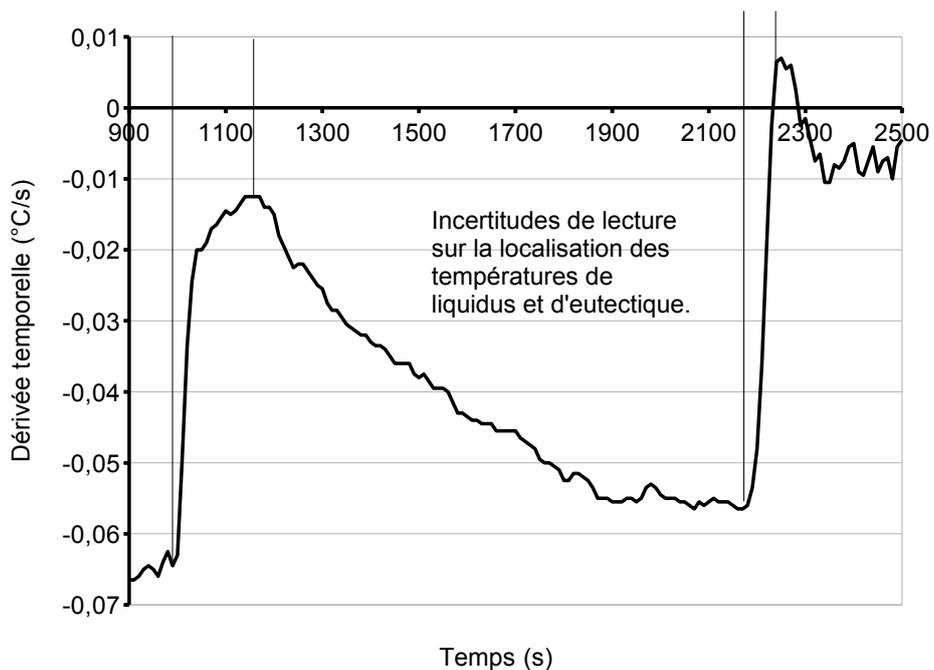


FIGURE 4.16 – Détermination d’une incertitude de lecture des températures de Liquidus et d’Eutectique d’après la dérivée thermique première, selon que l’on considère la base ou le sommet du saut.

Nous observons sur la figure ci-dessous (Figure 4.17), que pour la température de liquidus, la ligne noire, qui représente la valeur utilisée par Montupet, correspond plutôt à une vitesse de refroidissement de l’ordre de 0.20°C/min.

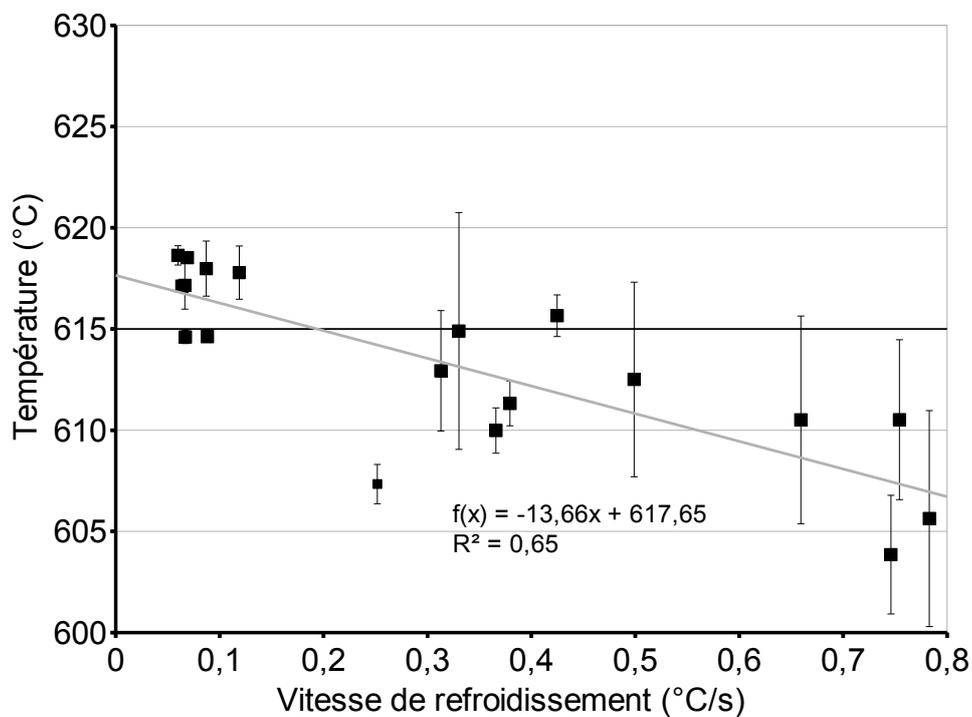


FIGURE 4.17 – Agrandissement pour la température liquidus de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement

Concernant la température eutectique, nous constatons que la valeur issue du logiciel commercial est proche d'un refroidissement lent (Figure 4.18).

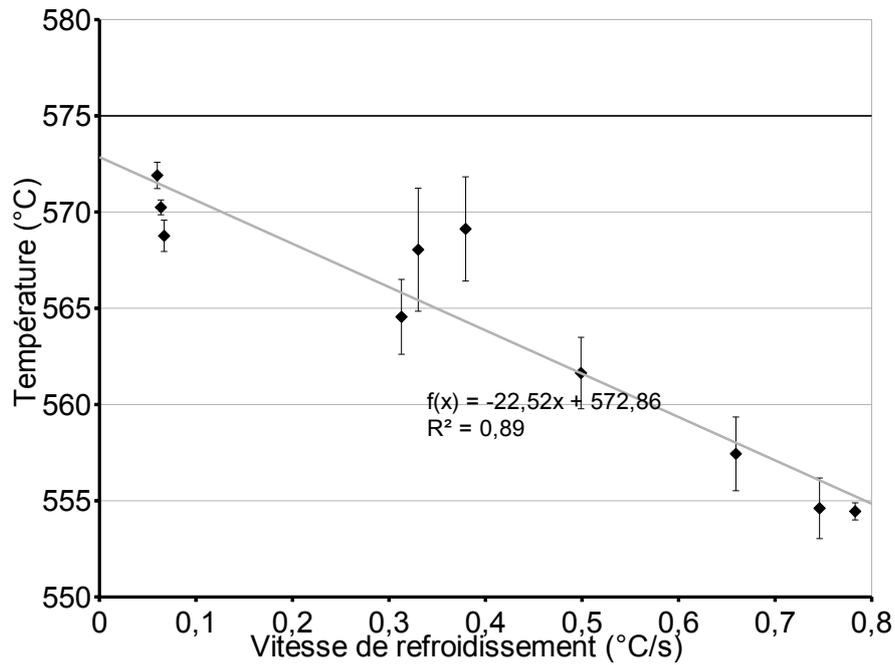


FIGURE 4.18 – Agrandissement pour la température eutectique de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement

Il en est de même pour la température de solidus qui est en accord avec les basses vitesses (Figure 4.19).

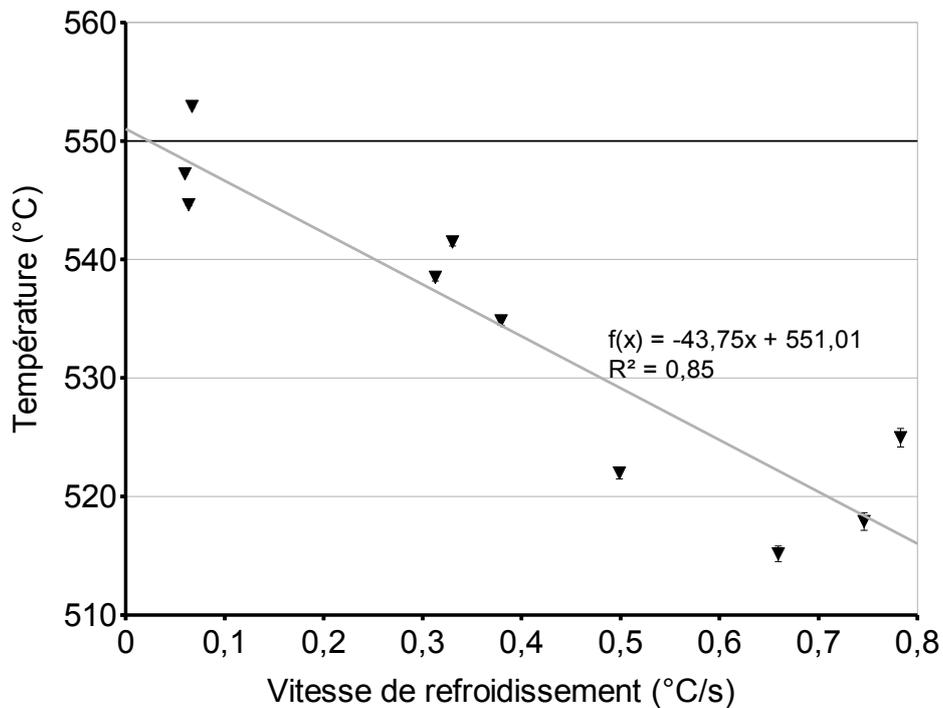


FIGURE 4.19 – Agrandissement pour la température solidus de son évolution en fonction de la vitesse de refroidissement (les barres d'incertitudes sont petites)

Température	Coefficient directeur (s)	Ordonnée à l'origine (°C)	Coefficient de régression
Liquidus	-14	617	0,65
Eutectique	-23	572	0,89
Solidus	-44	551	0,85

TABLE 11 – Synthèse des valeurs des droites de régression linéaire

Fe %	Si %	Cu %	Zn %	Mg %	Mn %	Ti %	Sb %	Al = 92.0219 %
0.0801	7.1731	0.0021	0.0070	0.3485	0.0030	0.2863	0.0000	Contrôle de nuance AS7G : NOK
Sr %	Na %	Ca %	P %	Ni %	Pb %	Sn %	Cr %	Ti = 0.286337 % > 0.200000
0.0247	0.0001	0.0004	0.0011	0.0046	0.0004	0.0006	0.0018	Sr = 0.024701 % > 0.005000
Co %	Zr %	Ag %	Be %	B %	V %	Li %	Bi %	B = 0.030927 % > 0.030000
0.0003	0.0017	0.0001	0.0001	0.0309	0.0126	0.0001	0.0001	P = 0.001057 % > 0.001000

TABLE 12 – Analyse chimique d'un échantillon trempé, alliage AlSi7Mg

Pour les températures d'eutectique et de solidus, nous observons que le logiciel commercial est plutôt en accord avec des vitesses de refroidissement de type équilibre, c'est à dire très faibles.

Le tableau ci-dessus synthétise l'ensemble des paramètres des droites de régression linéaire obtenues pour chacune des températures de solidification (Tableau 11). Ceci nous montre que le liquidus est moins affecté que le solidus par la vitesse de refroidissement. On assiste à un élargissement de l'intervalle de solidification ainsi qu'à une translation globale des courbes de  $f_s$  vers des températures plus basses lorsque la vitesse augmente. Il est néanmoins à noter que les ordonnées à l'origine sont vraiment en phase avec les données obtenues de JMatPro (615°C, 575°C, 550°C). Cette dernière remarque laisse à penser que la courbe proposée par JMatPro est basée pour une vitesse de refroidissement nulle.

Ceci répond à une partie de notre question initiale qui était de savoir si la courbe de fraction solide variait en fonction de la vitesse de refroidissement. Il semble que oui car les trois températures remarquables sont affectées par la vitesse de refroidissement, donc a fortiori, la courbe de fraction solide.

Il apparait d'après ces expérimentations que la courbe de fraction solide est fonction de deux paramètres : la température et sa vitesse. La courbe de fraction solide devrait alors être représentée comme une fonction de deux paramètres (Tet  $\dot{T}$ ) soit une surface.

**Analyse chimique** Une étude spectrographique, menée sur un échantillon trempé, est présentée ci-dessous. Tous les échantillons doivent avoir la même composition. Cette analyse laisse apparaître qu'il s'agit bien d'un aluminium de type AlSi7Mg. Toutefois, nous pouvons noter un excès en Titane et en Strontium par rapport à ce qui est utilisé habituellement chez Montupet. Ces éléments sont des additifs visant à affiner le grain et à modifier la croissance de l'eutectique respectivement. Cet excès aurait pu être détecté si une analyse avait été réalisée à la réception des matériaux. A ce propos, les auteurs Robertson et al. indiquent, lors du dernier congrès TMS 2015, que le strontium tend à impacter la température eutectique à la baisse lorsque la vitesse de refroidissement diminue [Robertson, 2015].

Nous devons garder ce point à l'esprit afin d'être très rigoureux dans les expériences à venir.

Nous allons maintenant chercher à établir les courbes de fraction solide en fonction de la température, ceci à partir des courbes de refroidissement.

#### 4.5 Extrapolation de la courbe de fraction solide

Les méthodes proposées ci-après estiment le taux de libération de chaleur. En considérant qu'une même quantité de chaleur est libérée pour un même incrément de fraction solide, nous pouvons mettre directement en relation le taux de libération de chaleur et la fraction solide. Il est à noter que cette hypothèse est utilisée par Thermocalc (il suffit de tracer l'enthalpie en fonction de la fraction solide et d'observer une relation linéaire), mais rien n'indique qu'elle soit réellement juste. Nous prendrons cette

hypothèse comme correcte, mais elle peut s'avérer peu précise si plusieurs phases se forment en même temps ( $\Delta L(\text{total}) = \Delta f_{\alpha} L_{\alpha} + \Delta f_{\beta} L_{\beta}$ )

Comme nous l'avons vu dans les parties numériques 2 et 3, le terme source présent dans l'équation de la chaleur fait appel à la dérivée temporelle de la fraction solide. De même, la capacité calorifique effective fait appel à la dérivée de la fraction solide par rapport à la température. Il y a donc une proximité certaine entre la fraction solide et l'équation de la chaleur. Plus précisément, les deux dérivées évoquées précédemment modulent la libération de la chaleur latente de fusion. La température est le témoin du refroidissement mais également de la libération de chaleur latente, il est naturel de pouvoir obtenir l'évolution de la fraction solide via la courbe de refroidissement thermique. Il existe plusieurs méthodes qui reposent sur différentes hypothèses et qui nécessitent différents moyens d'acquisitions (nombre de thermocouples, échantillons trempés). Une méthode que nous évoquerons très rapidement est la méthode de Fourier qui emploie deux thermocouples. Dans notre expérimentation, un seul thermocouple a été employé de part la petite taille des échantillons. Cette méthode est donc non réalisable. Une autre méthode, qui ne nécessite qu'un thermocouple est la méthode dite d'équilibre de chaleur de Newton.

#### 4.5.1 Newton Heat balance (1 thermocouple)

La méthode Newton Heat Balance (NHB)

[Cruz et al., 2006, Dobrzanski et al., 2006, Chen and Stefanescu, 1984]

vise à évaluer la courbe de fraction solide en fonction de la température  $f_s(T)$  sur la base de courbes de refroidissement  $T(t)$ . En effet, cette dernière comprend intrinsèquement la libération d'énergie de chaleur latente par l'augmentation de chaleur libérée dans le système, donc de la température.

**Hypothèses** Cette méthode repose néanmoins sur des hypothèses pour être valide :

1. Le nombre de Biot doit être inférieur à 0,1<sup>52</sup>. Cette première hypothèse est vérifiée dans notre cas. Cette hypothèse sous-entend que la température est uniforme dans l'échantillon.
2. La masse volumique et la capacité calorifique sont constantes. Cela va à l'encontre de la démarche de cette thèse qui vise à utiliser des propriétés matériaux non linéaires. Cette deuxième hypothèse nous obligera à prendre des précautions dans l'utilisation des courbes de fraction solide.
3. La perte de chaleur s'effectue majoritairement par convection. Dans notre expérience, c'est précisément le cas. Cette dernière hypothèse est validée.

Il faut donc retenir que cette méthode ne peut pas nous fournir une évaluation de la fraction solide très rigoureuse, de part la deuxième hypothèse. Nous ignorons l'influence de paramètres matériaux dans l'évaluation de la fraction solide par cette méthode.

**Méthode** La méthode NHB se base sur la dérivée temporelle de la courbe d'analyse thermique. Il s'agit d'évaluer l'évolution du rapport des aires en fonction de la température. L'aire considérée est mesurée entre la dérivée et une ligne de base (BL). L'évaluation est la suivante :

$$f_s(T) = \frac{\text{Aire à } t \text{ donnée}}{\text{Aire totale}} = \frac{\int_{t_{\text{liq}}}^t \left[ \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial T_{\text{BL}}}{\partial t} \right] dt}{\int_{t_{\text{liq}}}^{t_{\text{tot}}} \left[ \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial T_{\text{BL}}}{\partial t} \right] dt} \quad (4.3)$$

---

52. Pour rappel le nombre de Biot est le rapport du coefficient convectif multiplié par la longueur caractéristique sur le coefficient de conduction thermique.

$$\text{Bi} = \frac{h_c * L_{\text{caract}}}{k} \quad (4.2)$$

avec comme longueur caractéristique le rapport du volume de l'échantillon et de sa surface. Dans le cas d'un échantillon cubique de côté 20mm, de coefficient convectif égal à 500W/m<sup>2</sup>K et la conductivité égale à 120W/mK, le nombre de Biot est de 0,013.

**Démonstration** Considérons l'équation de la chaleur exprimée en température pour deux courbes, la ligne de base et la dérivée temporelle. Nous pouvons écrire pour chacune :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k\Delta T(t) - \rho L \frac{\partial f_s(T)}{\partial t} \quad (4.4)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T_{BL}}{\partial t} = k\Delta T_{BL}(t) - 0 \quad (4.5)$$

La ligne de base (BL) est définie comme la dérivée de la courbe de refroidissement dans le cas où il n'y aurait pas de solidification. Dans notre hypothèse d'extraction constante de la chaleur, la ligne de base est une droite reliant la dérivée première à l'instant du liquidus à celle à l'instant du solidus. Aucune solidification n'est considérée, le terme source est donc nul<sup>53</sup>.

Une représentation graphique est proposée ci-après :

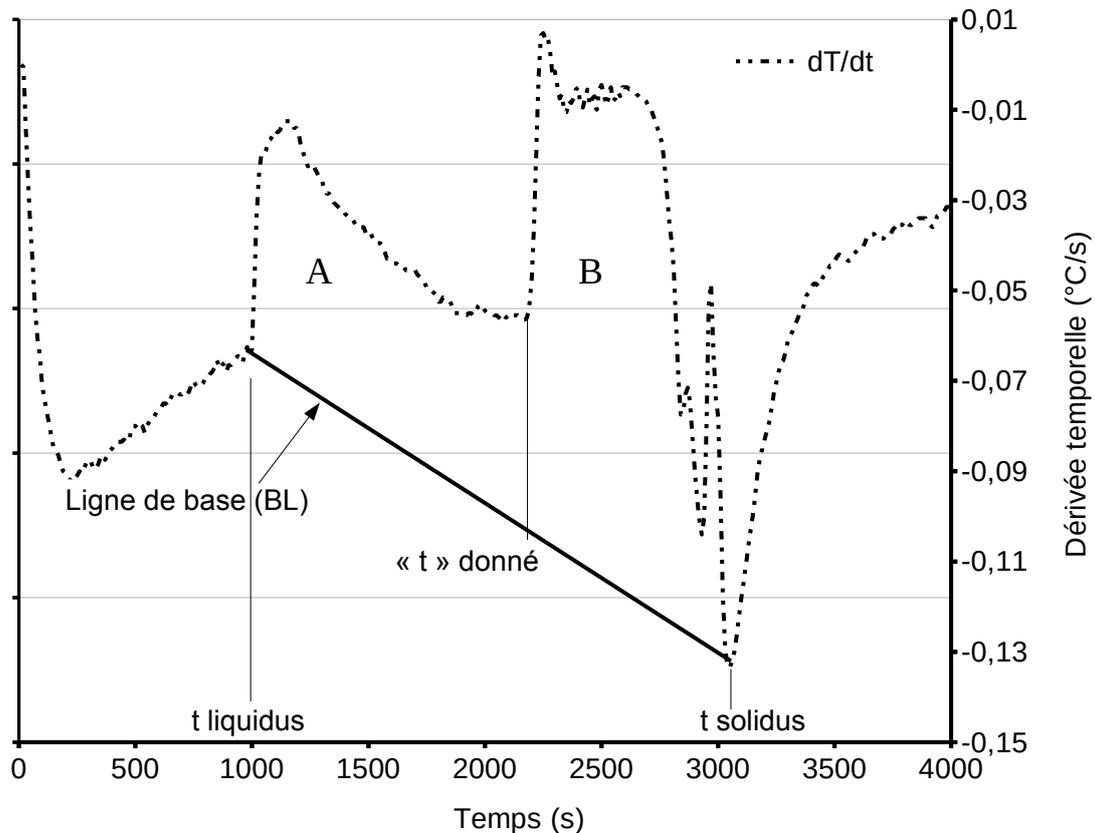


FIGURE 4.20 – Illustration de la méthode méthode Newton Heat Balance sur une dérivée première thermique

A un instant donnée  $t$ , deux aires sont distinguées, A est l'aire entre les courbes entre le début de la solidification et l'instant  $t$ . L'aire totale entre les courbes est la somme des aires A et B.

Si nous faisons la différence des deux équations précédentes, nous obtenons :

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial t} \right) = k(\Delta T(t) - \Delta T_{BL}(t)) - \rho L \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.6)$$

En prenant l'hypothèse d'un écart de chaleur échangé par conduction négligeable devant l'énergie libérée par le changement de phase, nous pouvons écrire que :

$$\frac{-c_p}{L} \left( \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial t} \right) = \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4.7)$$

53. La méthode de Gibbs est une alternative pour la détermination de la ligne de base. Elle résout une équation fonction de la concentration de soluté dans la phase liquide pour obtenir ladite ligne de base [Gibbs and Mendez, 2008].

Dans le cadre d'une courbe de refroidissement, l'équation précédente (Equation 4.7) intégrée entre l'instant  $t_{liq}$  et un instant  $t > t_{liq}$  donne :

$$\int_{t_{liq}}^t \frac{\partial f_s}{\partial \tau} d\tau = \frac{-c_p}{L} \int_{t_{liq}}^t \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial \tau} \right) d\tau = f_s(T(t)) - f_s(T_{liq}) = f_s(T(t)) - 0 \quad (4.8)$$

Dans un premier temps, si  $t = t_{sol}$  alors on obtient :

$$\frac{-c_p}{L} = \frac{1}{\int_{t_{liq}}^{t_{sol}} \left( \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial \tau} \right) d\tau} \quad (4.9)$$

Dans un second temps, en remplaçant cette constante (Equation 4.9) dans l'équation 4.8, nous obtenons :

$$f_s(T) = \frac{\int_{t_{liq}}^t \left[ \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial \tau} \right] dt}{\int_{t_{liq}}^{t_{sol}} \left[ \frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\partial T_{BL}}{\partial \tau} \right] dt} \quad (4.10)$$

Il est dès lors possible de tracer l'évolution de la fraction solide en fonction de la température via cette méthode (Figure 4.21). La fraction solide a été évaluée sur chacun des trois types de refroidissements (lent, convections naturelle et forcé). Le calcul a été réalisé sous tableur et en mesurant l'aire entre les deux courbes par la méthode des trapèzes avec un incrément de 0,5s.

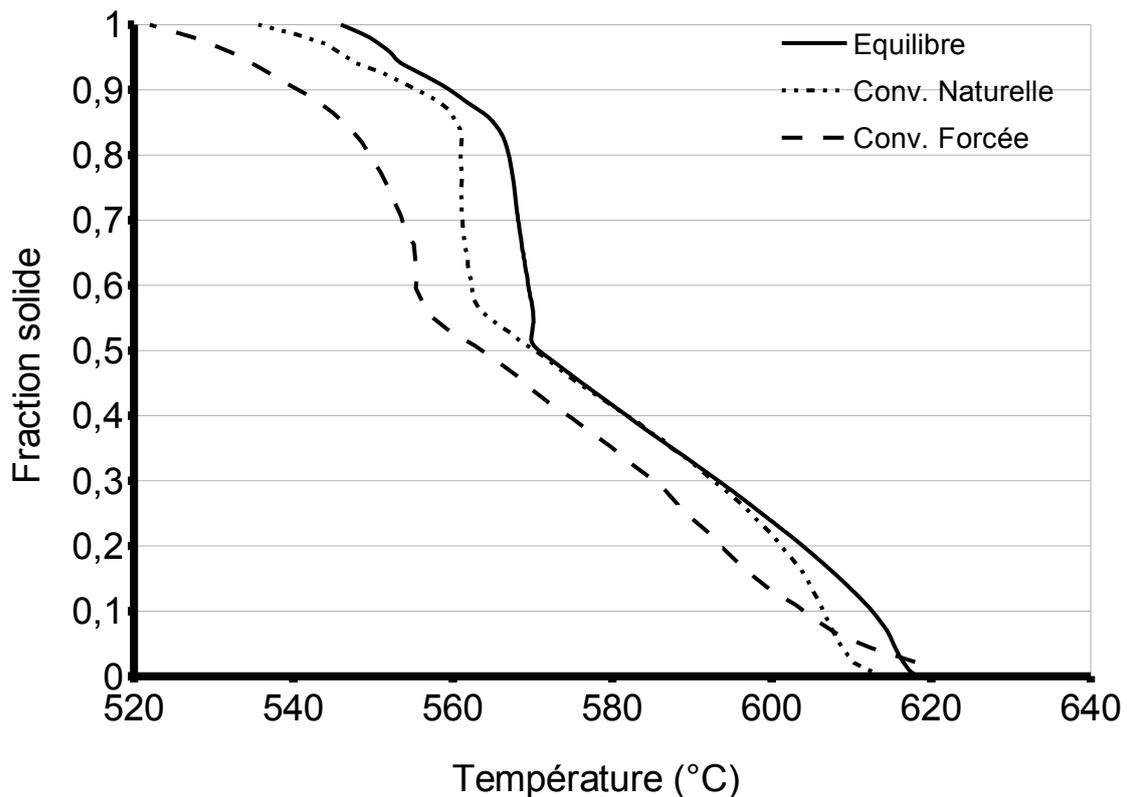


FIGURE 4.21 – Fraction solide à partir de la méthode Newton Heat Balance

Nous observons d'une part que les trois courbes ne se superposent pas. Même si elles ont un comportement sensiblement identique, les températures de liquidus, eutectique et solidus sont différentes. Cela est particulièrement visible pour la température eutectique. Pour cette dernière, deux mouvements sont observés avec l'augmentation de la vitesse de refroidissement : d'une part la température de l'eutectique

(cela a déjà été observé (Figure 4.18)), d'autre part, l'intervalle de solidification semble croître avec la vitesse.

Pour un refroidissement lent, le saut eutectique semble très vertical, et laisserait même apparaître une recalescence à la base du saut.

#### 4.5.2 Méthode de Fourier (2 thermocouples)

La méthode de Fourier, nécessite deux thermocouples afin d'obtenir une valeur du gradient spatial entre le centre de l'échantillon et le bord de l'éprouvette. A la différence du cas précédent, il est ici supposé la présence d'un gradient dans l'échantillon. Ceci est valable pour les pièces volumineuses ou pour les faibles coefficients convectifs. Ceci sous entend que le profil de température n'est pas constant mais varie entre les bord de l'échantillon (plus froid) et le cœur (plus chaud). Egalement, la perte de chaleur doit être majoritairement le fait de la conduction thermique (par exemple dans le cas d'une paroi épaisse comme un moule en sable ou en acier). Enfin, la conductivité thermique est considérée comme constante avec T.

Cette méthode présente l'avantage d'avoir une expression de la ligne de base plus fiable car basée sur les deux thermocouples, toutefois, les hypothèses sous-jacentes ne conviennent pas à notre expérience. Cette méthode n'a pas été employée [Baez et al., 2004].

#### 4.5.3 Méthodes de Stonebrook et Sicha

La méthode proposée par Stonebrook et Sicha (abréviation SS) repose sur l'idée que sans solidification, considérant un taux d'extraction de chaleur constant et une capacité calorifique constante, la courbe de refroidissement serait une droite, durant toute la solidification et dont la pente serait égale à la pente initiale [Stonebrook and Sicha, 1949].

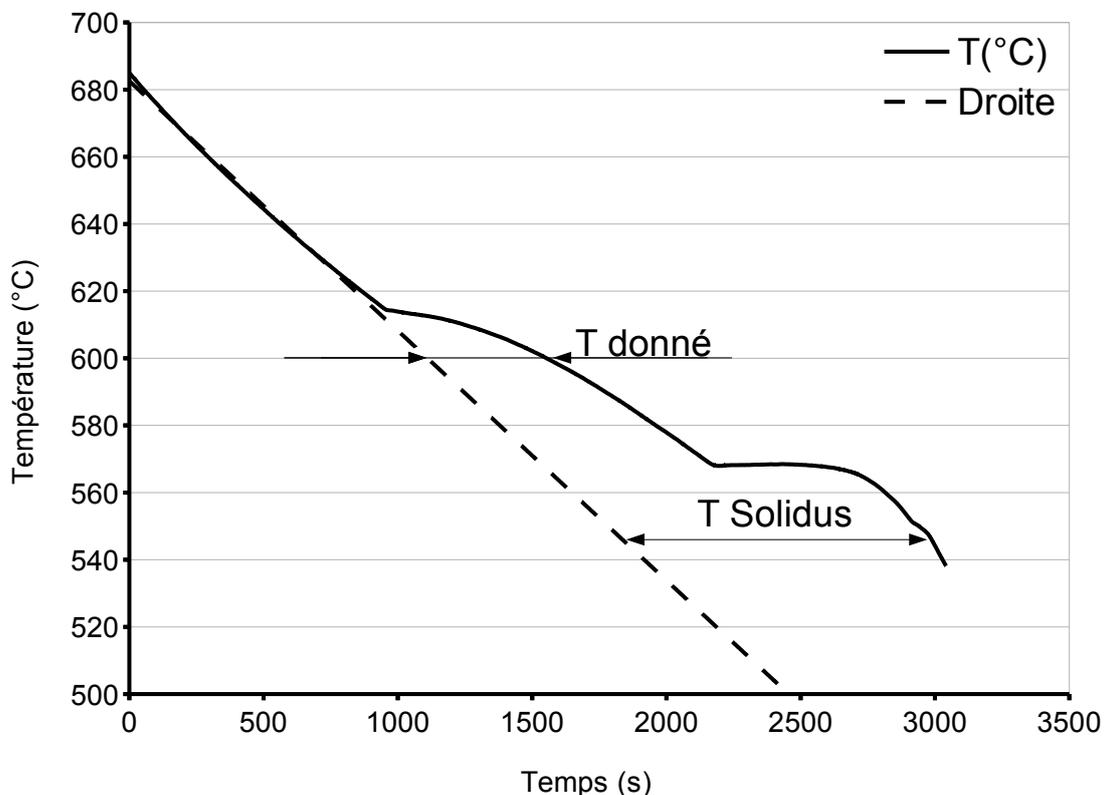


FIGURE 4.22 – Illustration de la méthode de Stonebrook et Sicha

Afin de mettre en pratique cette hypothèse, les auteurs ont asservi les résistances de chauffage à la différence des températures de l'échantillon et de l'atmosphère du four (Equation 4.11). Ainsi, en maintenant une différence entre les deux milieux, et en considérant une capacité calorifique constante, la vitesse de refroidissement est imposée constante, tout comme le taux d'extraction.

$$\dot{Q} = mc_p \dot{T} = \bar{h}_c A (T - T_{ext}) \quad (4.11)$$

$m$  est la masse,  $c_p$  la capacité calorifique,  $\dot{T}$  est la vitesse de refroidissement,  $\bar{h}_c$  est le coefficient convectif moyen,  $A$  est l'aire soumise aux échanges convectifs,  $T$  est la température dans l'échantillon et  $T_{ext}$  est la température dans le four.

Dès lors, la proportion relative de phase solide par rapport à la somme des phases liquide et solide est donnée par le rapport de l'écart temporel à  $T$  donné entre la courbe et la droite sur l'écart maximum à la température de solidus. Nous appliquons à présent cette méthode pour obtenir la courbe de fraction solide en fonction de la température, pour différentes vitesses de refroidissement (Figure 4.23).

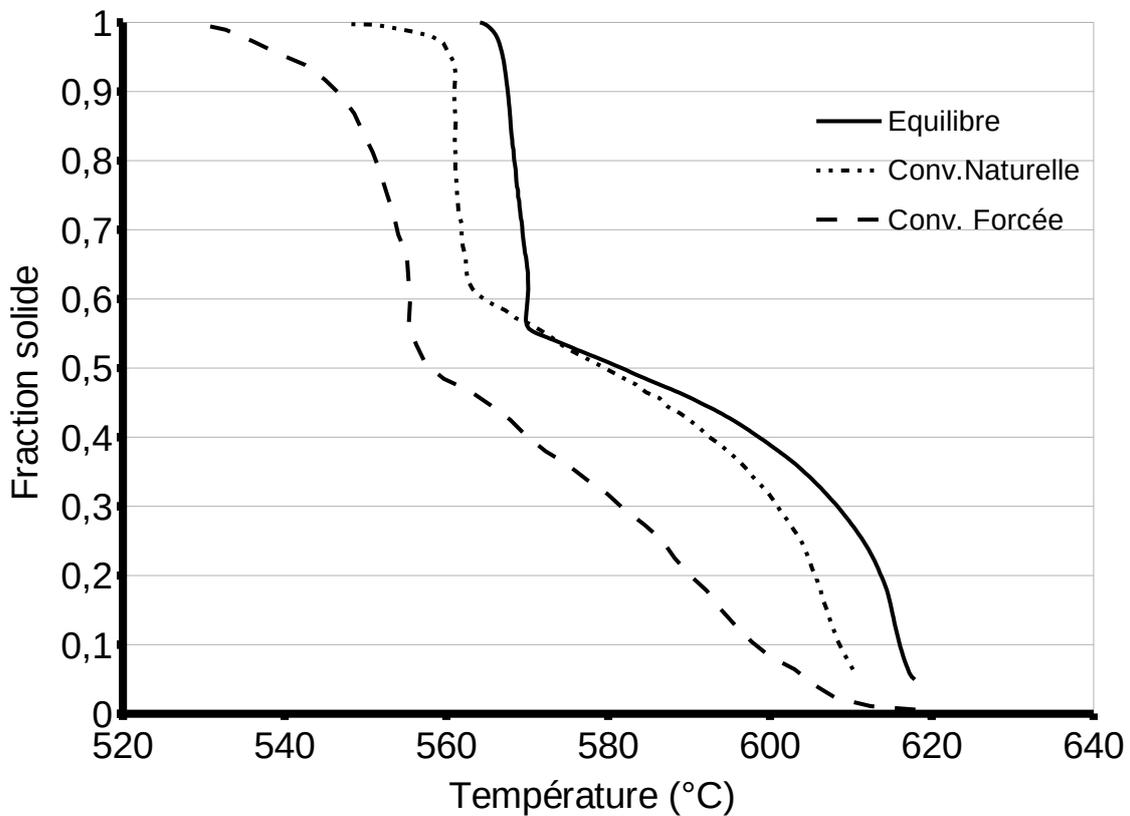


FIGURE 4.23 – Fraction solide à partir de la méthode de Stonebrook et Sicha

Malgré les hypothèses fortes nécessaires pour cette méthode, les courbes de fraction solide semblent assez similaires à celles obtenues précédemment par la méthode Newton Heat Balance, les changements de pentes sont assez similaires. Nous observons de la même manière que les courbes se décalent vers les températures plus basses selon que la vitesse de refroidissement augmente. Egalement les températures de solidification sont déplacées et en particulier la température eutectique est modifiée vers les températures plus faibles et vers une fraction solide plus grande, ce dernier point semble moins visible pour la courbe de convection forcée. Comme précédemment, dans le cas de l'équilibre, un saut à l'eutectique est visible, ainsi qu'une petite recalescence.

Une piste de développement supplémentaire, proposée à la fin des années 1970 par H. Brody [Discussion avec l'auteur] était de considérer que le taux d'extraction de la chaleur n'était pas linéaire, mais quadratique. Il faudrait alors travailler avec une courbe Température en fonction de la racine carrée du

temps. Ce qui permettait d'introduire une courbure dans la droite sans solidification (qui est observée par l'asymptote horizontale à la température ambiante). Cette interprétation n'a pas été réalisée ici mais pourrait faire l'objet de plus amples développements.

#### 4.6 Comparaison de la fraction solide

Il s'agit à présent de comparer les différentes méthodes et données en notre possession pour un alliage de type AlSi7Mg. Ceci dans le but d'observer quelle modélisation serait la plus adaptée à notre problème de dérivées thermiques (Figure 4.24) :

- modèles issus de l'expérimental : par la méthode Newton Heat Balance, par la méthode Stonebrook et Sicha ;
- modèles issus de logiciels commerciaux : Thermocalc, JMatPro et Quikcast.

Les modèles issus de l'expérimentation sont tracés en tirets et ont été détaillés séparément précédemment (Figures 4.21 et 4.23).

Enfin, les données issues de logiciels commerciaux sont tracés en traits pleins.

Seules les courbes issues de l'expérimental évolueront au cours des différents graphes, c'est à dire que toutes les autres courbes (issues des logiciels) n'existent pas en fonction de la vitesse de refroidissement et resteront fixées.

**Refroidissement du four lent** Il s'agit ici de comparer les courbes de fraction solide pour un refroidissement lent du four (Figure 4.24). Nous constatons tout d'abord que les courbes issues des logiciels correspondent assez bien aux modèles proposés par la méthode Newton Heat Balance (NHB) et Stonebrook et Sicha (SS). Cependant, pour une température supérieure à la température eutectique, le modèle SS semble s'éloigner des autres modèles.

Concernant le refroidissement lent, nous pouvons noter que pour les températures au dessus de l'eutectique, seule la méthode Stonebrook et Sicha se distingue avec une fraction solide un peu plus élevée avant l'eutectique. Toutes les autres méthodes sont très proches.

A la température eutectique, il faut toutefois noter que deux cas se distinguent : celui issues de l'expérimentation et Quikcast d'une part et celui des logiciels commerciaux JMatPro et Thermocalc d'autre part. Bien que l'origine précise des données utilisées dans le logiciel Quikcast ne soit pas connue, il semble que la fraction solide a été établie sur une origine expérimentale (avec l'ex-groupe Péchinet). Cela semble être en accord avec l'observation présente qui montre une évolution proche de la courbe NHB. Par ailleurs les deux courbes JMatPro et Thermocalc sont très similaires.

**Refroidissement en convection naturelle** Nous sommes maintenant avec un refroidissement avec convection naturelle. Nous observons que les courbes issues des méthodes NHB et SS dérivent vers des températures plus froides et se distinguent cette fois-ci pour des températures au dessous de la température eutectique (Figure 4.25). D'ailleurs, les températures eutectiques annoncées par ces deux méthodes ne sont plus en accord avec celle des logiciels. L'écart se creuse entre les courbes issues de l'expérimental et toutes les autres. Cela laisse entendre que la fraction solide est fonction de la vitesse de refroidissement. Toutefois, les courbes NHB et SS sont toujours en accord.

**Refroidissement en convection forcée** Enfin, nous traçons les courbes obtenues par les modèles de NHB et SS pour un refroidissement en convection forcée (Figure 4.26). Il s'agit là de notre vitesse de refroidissement la plus élevée (bien qu'elle ne représente qu'un tiers de la vitesse maximale de refroidissement observée sur une culasse). Ces courbes NHB et SS se détachent nettement des autres modèles, qu'ils soient analytiques ou issus de logiciels dédiés, que ce soit au dessus ou au dessous de la température eutectique. Il s'agit là vraiment d'un comportement de la fraction solide différent de ce qui est observé pour les courbes issues des logiciels.

Par ces trois précédents graphes, relatifs aux différentes vitesses de refroidissement, nous pouvons constater que, uniquement pour une transformation à l'équilibre, les méthodes NHB et SS sont bien en

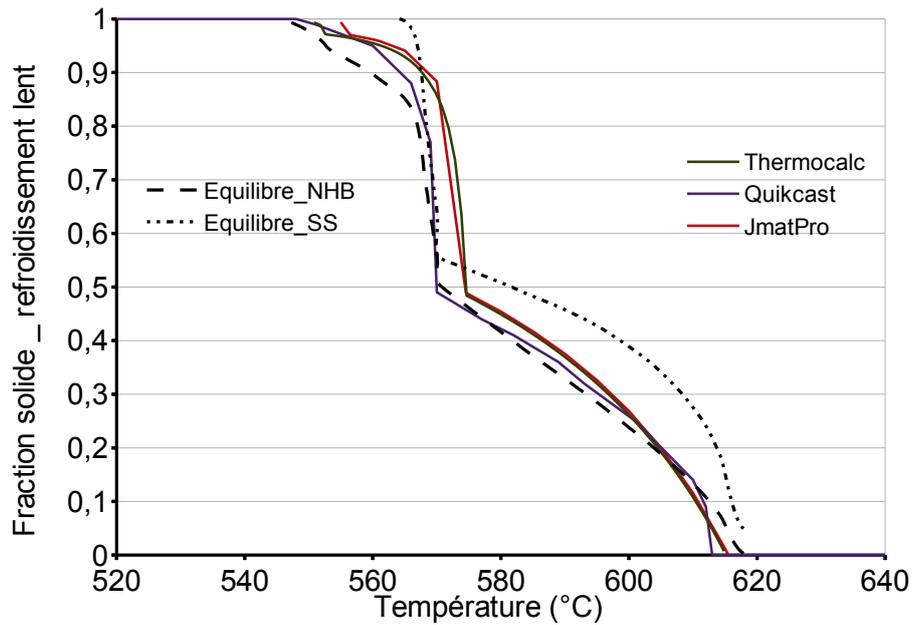


FIGURE 4.24 – Comparaison des modèles de fraction solide en refroidissement lent

adéquation avec les propositions des logiciels thermodynamiques et analytiques. Nous avons observé de manière indirecte ce résultat (Figure 4.15). Cela nous renforce dans l'idée que ces logiciels commerciaux utilisent des données de fraction solide à l'équilibre. Ce qui nous pose un problème actuellement dans les simulations mises en place industriellement pour lesquelles de fortes variations de la vitesse de refroidissement sont observées (Figure 4.1). Comme ces logiciels commerciaux ne prennent en compte qu'une courbe de fraction solide en fonction de la température, ceux-ci ne peuvent pas distinguer l'effet de la vitesse de refroidissement sur la libération de la chaleur latente de fusion.

Ce travail est néanmoins à mettre en perspective avec l'état de l'art en la matière. Celui-ci laisse apparaître un dilemme quant à l'évolution de la fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement.

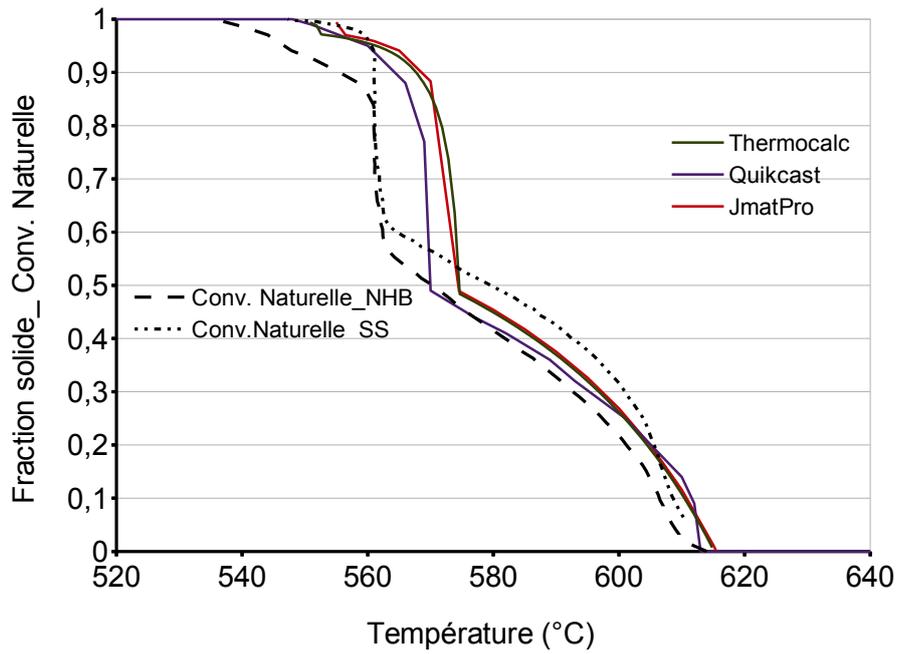


FIGURE 4.25 – Comparaison des modèles de fraction solide en convection naturelle

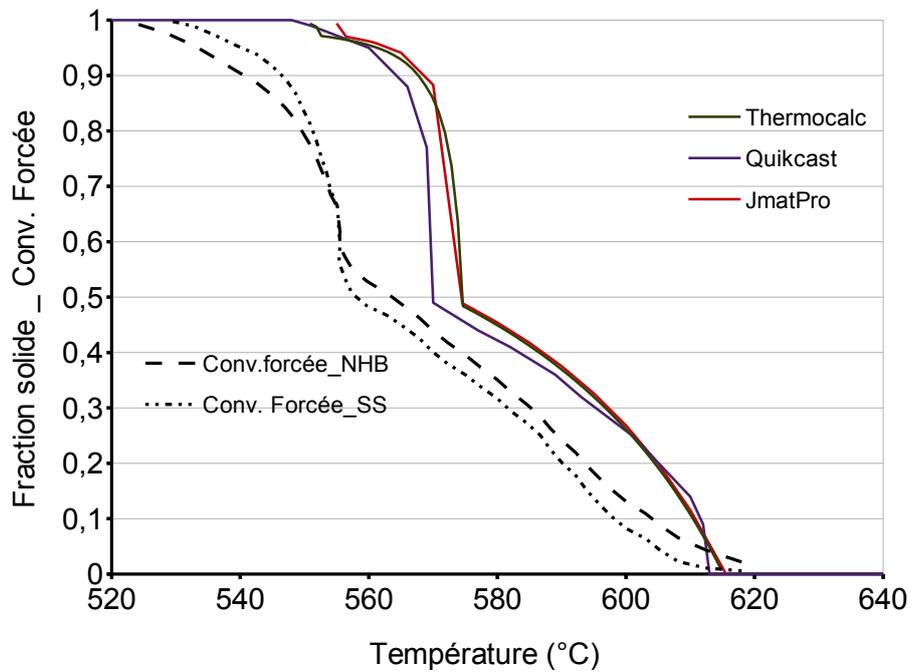


FIGURE 4.26 – Comparaison des modèles de fraction solide en convection forcée

#### 4.7 "The solid fraction dilemma"

La bibliographie révèle que la communauté n'est pas encore accordée sur l'effet de la vitesse de refroidissement sur la fraction solide et surtout la manière de la mesurer. Figueredo a constaté une différence de l'ordre de 20% par rapport aux modèles analytiques entre un calcul de la fraction solide via analyse thermique et une mesure micrographique sur échantillon trempé, le tout pour un refroidissement à l'équilibre [Figueredo and Flemings, 1998].

Nafisi remet en question la méthode de trempé et constate des écarts de l'ordre de 50% entre une méthode d'analyse d'image et de mesure thermique (Figure 4.27). Il indique qu'une couche de vapeur se crée à l'interface de l'échantillon trempé et l'eau. Ceci modifie fortement le coefficient convectif de telle manière que la trempé n'est pas recommandée d'après l'auteur.

L'A356 est équivalent à un AlSi6Mg d'après l'auteur, en comparaison avec l'AlSi7Mg.

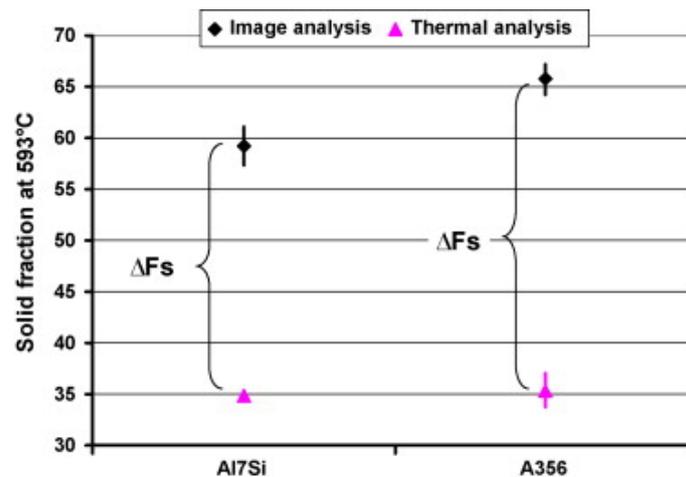


FIGURE 4.27 – Ecart entre la fraction solide calculée par analyse thermique et mesurée par trempé [Nafisi et al., 2009]

L'auteur obtient différentes courbes de fraction solide en fonction des vitesses de refroidissement appliquées (Figure 4.28). On constate d'ailleurs une nette recalescence à la température eutectique (elle était légèrement visible sur notre courbe (Figure 4.23)).

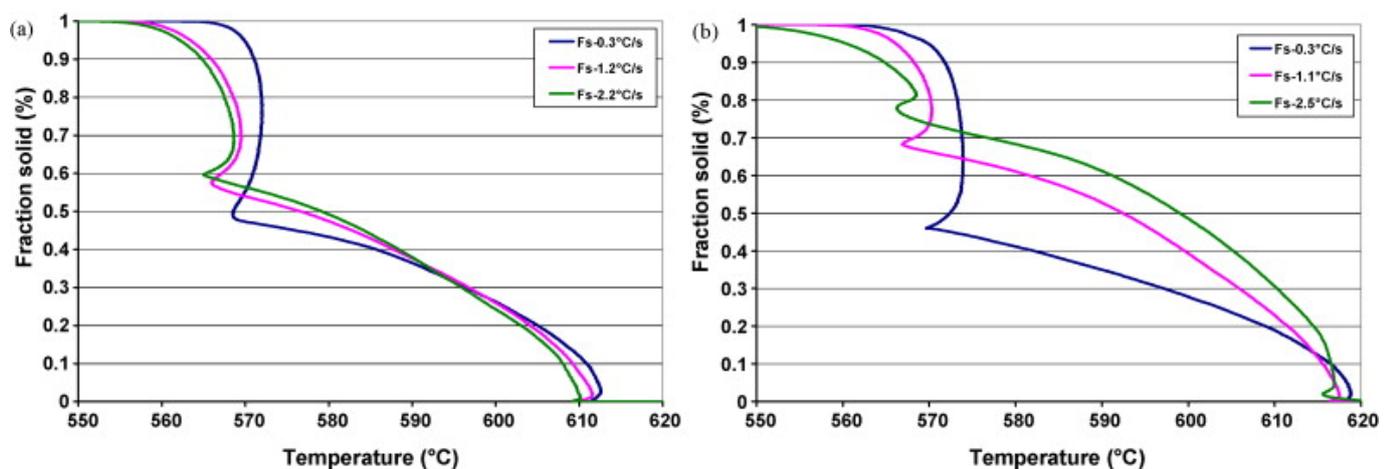


FIGURE 4.28 – Courbes de fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement obtenues par la méthode de Fourier pour des alliages AlSi7 (a) et AlSi6 (b)[Nafisi et al., 2009]

Nous pouvons observer que la fraction solide varie fortement entre une vitesse faible à 0,3°C/s et 1,2°C/s. Pour rappel, nos mesures sont limitées à une vitesse de 0,8°C/s. L'auteur conclut à une sur-

estimation de la mesure par analyse d'images après trempe. Ainsi qu'à un déplacement des températures de liquidus et eutectique vers des températures plus faibles lorsque la vitesse augmente. La trempe et la couche de vapeur qui se crée autour de l'échantillon impliquent pour l'auteur une formation précoce de phase alpha Al, ce qui justifierait la différence de fraction solide [Nafisi et al., 2009]. Par ailleurs, de grandes différences sont observées pour la valeur de la fraction solide entre les deux alliages qui sont pourtant proches.

L'auteur Dobrzanski constate également des différences de température pour la température de nucléation de la phase alpha (Figure 4.29). L'aluminium employé est un AlSi9Cu. Parmi les trois courbes présentes sur le graphe ci-dessus (Figure 4.29), seule la courbe symbolisée par des carrés, la plus élevée nous intéresse. L'auteur constate que cette température de liquidus augmente de l'ordre de 20°C avec une augmentation de la vitesse de refroidissement. Nous pouvons noter que l'ordre de grandeur de la vitesse est le même que dans notre expérimentation, il varie de 0,16°C/s à 1,04°C/s. Ces résultats vont à l'encontre du papier précédent et des résultats que nous obtenons [Dobrzanski et al., 2006].

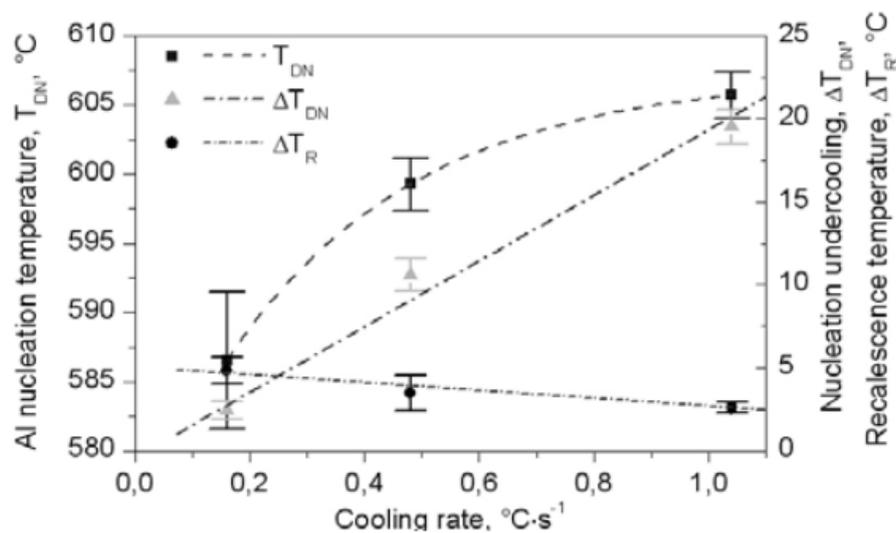


FIGURE 4.29 – Effet de la vitesse de refroidissement sur la nucléation de la phase alpha

Les effets sur les liquidus et solidus ne sont pas développés dans ce papier.

L'évolution de la fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement est encore à l'heure actuelle sujet à débat. Notre expérimentation nous offre une perspective, il faut encore mener des vérifications afin d'apporter dans un futur proche notre contribution à la problématique.

## 4.8 Conclusions

Sur la base des observations d'écarts entre simulation et instrumentations, une recherche en direction de la fraction solide a été investiguée. Nous venons de tracer la courbe de fraction solide via deux méthodes d'analyse thermique (Newton Heat Balance et Stonebrook et Sicha) pour différentes vitesses de refroidissement. Nous les avons ensuite comparées aux modèles analytiques ainsi qu'aux données proposées par différents logiciels thermodynamiques. Nous pouvons expliciter différents points clés de ces travaux.

### Points clés du chapitre

- Les températures de liquidus, eutectique et solidus sont fonction de la vitesse de refroidissement, elles décroissent quand la vitesse de refroidissement augmente ;
- La courbe de fraction solide est également fonction de la vitesse de refroidissement, elle est translatée vers des températures plus faibles quand la vitesse de refroidissement augmente ;

- L'intervalle de solidification augmente lorsque la vitesse de refroidissement augmente, la température de solidus diminue plus vite que la température de liquidus quand la vitesse de refroidissement augmente ;
- Les modèles analytiques des segments inverses, de Scheil-Gulliver et de Back Diffusion sont grossièrement en accord avec des vitesses de refroidissement faibles. Elles sont cependant en désaccord dès que la vitesse de refroidissement augmente aux environs de  $0,8^{\circ}\text{C/s}$  ( la température de l'eutectique se trouve trop hautes comparé à ce qui est prédit par les méthodes issues de l'expérimentation ;
- Les courbes de fraction solide fournies par les logiciels de thermodynamique sont particulièrement en accord avec un refroidissement à l'équilibre ;
- Une nouvelle expérimentation doit être réalisée sur la base des enseignements tirés de ces premières mesures.

#### 4.9 Perspectives expérimentales

L'expérimentation exposée dans cette partie présente de nombreux points d'améliorations possibles mais offre toute de même l'avantage de proposer une explication aux écarts observés sur la courbes d'analyses thermique des culasses entre les zones à fort refroidissement et celles à refroidissement lent. De plus, cela pourrait expliquer les écarts de température de liquidus , eutectique et solidus entre la simulation et l'expérimentation. Si ces résultats sont validés, une remise en cause des simulations proposées par les logiciels commerciaux sera à réaliser. En effet, au vu des présents résultats, la prise en compte de la fraction solide, en fonction de la température mais également de sa dérivée thermique parait nécessaire pour répondre aux cas industriels. De plus amples vérifications sont nécessaires.

Il s'agit d'une première réalisation qui permet tout de même de poser des bases aux recherches à venir. Elle permet d'observer une tendance qu'il faut maintenant vérifier et publier.

Bien que la bibliographie ne mette pas en relief un consensus de la communauté scientifique à propos de l'effet de la vitesse de refroidissement sur la fraction solide, une nouvelle expérimentation sera réalisée sur la base de l'expérience acquise.

L'alliage employé doit faire l'objet d'une mesure spectrographique dès réception des lingots. Une seconde mesure sera réalisée après le refroidissement afin de vérifier la stabilité de l'alliage. La conception de l'expérimentation doit permettre de mieux contrôler la vitesse de refroidissement, notamment pour atteindre des vitesses plus élevées qu'avec les ventilateurs précédemment employés. Un support creux du creuset est à l'étude, il permettra le passage d'un liquide ou d'un gaz à l'intérieur, obtenant ainsi des vitesses plus élevées.

L'enregistrement du thermocouple doit être réduit à 5Hz car la masse de données à traiter est inutilement lourde. Cela permettra de conserver une information précise. Le traitement du signal doit être conservé de telle manière à faciliter la lecture des données.

Les thermocouples employés doivent être le plus petit possible afin d'interférer au minimum sur la mesure.

L'usage de deux thermocouples permettra l'emploi de toutes les méthodes évoquées précédemment. Les thermocouples placés dans l'alliage doivent représenter moins de 10% du poids de l'alliage.

Une estimation du coefficient de transfert thermique pourra être réalisé pour les phases liquide et solide sur la base de la géométrie et des vitesses de refroidissement avant et après solidification.

En parallèle du développement de cette méthodologie expérimentale, une méthode de traitement d'images doit être développée afin de préparer l'arrivée d'images microstructurales issues de trempes d'échantillons. Afin d'obtenir une quantification de la fraction solide via cette méthode.

#### 4.10 Conséquence d'une prise en compte de la vitesse de refroidissement sur la simulation

Nous avons observé dans cette partie que l'évolution de la fraction solide serait dépendante de la vitesse de refroidissement. Nous sommes conscient qu'il existe toujours un débat sur ce point. Néanmoins,

cela expliquerait pourquoi il y a un écart entre simulation et mesures expérimentales (Figure 4.1) sur la partie semelle, à fort gradient thermique.

#### 4.10.1 Modèle 1D avec vitesse de refroidissement

Dans le but de tester l'influence du changement de fraction solide lors d'une simulation, nous avons employé le modèle suivant.

Nous adaptons le modèle 1D (Figure 3.2) décrit en partie 3. Nous n'appliquons pas une température imposée à  $0^\circ\text{C}$  au cours du temps au point origine  $x=0$ , mais une température qui décroît linéairement de  $800^\circ\text{C}$  (température initiale dans le barreau) à une vitesse  $\dot{T}$  déterminée ( $T_{\text{imposé}} = 800 - \dot{T} * t$ ). Nous imposons un flux nul à l'autre extrémité du barreau pour simuler une barre semi-infinie.

D'après le graphe (Figure 4.1) nous constatons que la vitesse de refroidissement en semelle est de l'ordre de  $2,5^\circ\text{C/s}$ . Cependant, les mesures expérimentales réalisées se limitent à  $0,8^\circ\text{C/s}$ . Si nous extrapolons la température de solidus d'après l'équation de régression linéaire (Figure 4.15) :  $T_{\text{solidus}} = -43,75x + 551$ . Nous obtenons pour une vitesse de refroidissement de  $2,5^\circ\text{C/s}$  un solidus à  $441^\circ\text{C}$ . L'intervalle de solidification se trouve grandement étendu ( $110^\circ\text{C}$  plus basse que celle fournie par les logiciels thermodynamiques qui indiquent  $550^\circ\text{C}$ , semble-t-il à l'équilibre). Assurément cette valeur est excessivement basse, mais pour notre démonstration, conservons la.

Notre modèle 1D nous permet de modéliser une fraction solide qui varie linéairement entre 0 et 1 sur un l'intervalle de solidification pouvant être paramétré. D'après les considérations précédentes, nous choisissons un intervalle ( $T_{\text{liquidus}} = 615^\circ\text{C}$  et  $T_{\text{solidus}} = 441^\circ\text{C}$ ).

#### 4.10.2 Résultat du modèle 1D avec vitesse de refroidissement

Le graphique suivant compare l'évolution de la température au cours du temps de deux simulations avec vitesse de refroidissement pour deux cas d'intervalles de solidification différents. Le premier est avec un intervalle de solidification standard ( $615^\circ\text{C} - 550^\circ\text{C}$ ) et le second avec un intervalle extrapolé ( $615^\circ\text{C} - 441^\circ\text{C}$ ) comme décrit précédemment et traduisant une vitesse de refroidissement supérieure.

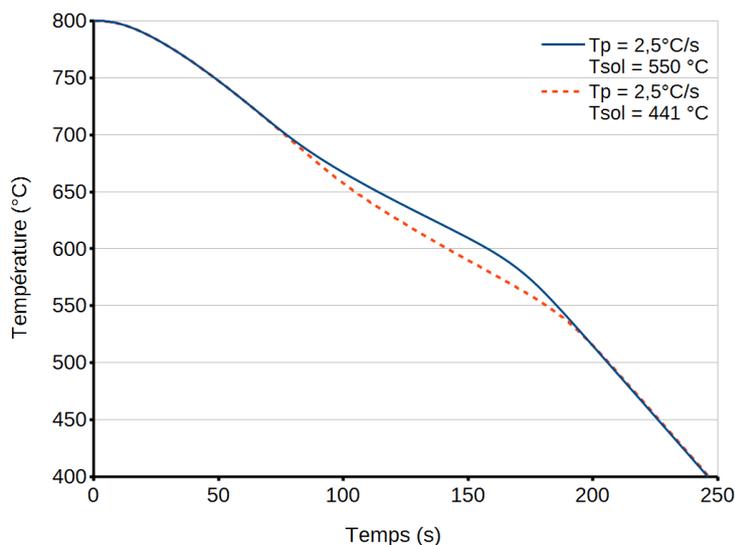


FIGURE 4.30 – Evolution de la température au cours du temps avec et sans prise en compte de l'influence de la vitesse de refroidissement sur l'intervalle de solidification.

Nous observons que la température de la simulation avec un intervalle de solidification plus large présente une température inférieure (de l'ordre de  $20^\circ\text{C}$ ).

Ce résultat montre que prendre en compte l'influence de la vitesse de refroidissement (via l'intervalle de solidification) tend à diminuer la température dans la zone de changement de phase. Cela est cohérent avec l'écart observé sur la culasse entre la partie semelle et la partie masselotte.

A quantité de chaleur extraite constante, la libération de chaleur latente, réalisée sur un intervalle de solidification plus grand entrainera un abaissement de la température du système.

Il est à noter que nous n'avons ici mesuré l'effet que de l'intervalle de solidification, l'évolution de la courbe de fraction solide elle-même nécessiterait des approfondissements.

## Conclusions et perspectives générales de la thèse

La thèse CIFRE exposée dans ce manuscrit s'est articulée autour de différentes thématiques métallurgiques afin de modéliser la solidification. En particulier, il a été question de poser les bases physique de la solidification aux niveaux microscopiques et macroscopiques avec la croissance dendrites, les modèles analytiques de fraction solide et surtout les propriétés matériaux non linéaires qui seront employés après. La prise en compte de non linéarités matériaux via une discrétisation spatio-temporelle a ensuite été traitée afin de mener des calculs via une méthode de réduction de modèle PGD. Cette méthode a montré des gains intéressants en regard de la méthode de référence. Ces gains semblent provenir, dans notre cas industriel, d'un nombre de résolution de système inférieur pour une résolution PGD. Une prise en compte de l'énergie de changement de phase a été réalisée pour simuler au mieux la solidification. Ceci via trois formulations et résolutions différentes. Cela nous a d'ailleurs amené à écrire une formulation en enthalpie uniquement. Il a été noté, au cours de cette thèse, le caractère déterminant de la fraction solide et en particulier de sa dérivée pour simuler la solidification. Aussi, des travaux expérimentaux ont été menés lors d'un séjour aux Etats-Unis et ont mis en lumière une relation de comportement entre la courbe de fraction solide et le couple température, vitesse de refroidissement. Cette dernière partie offre des perspectives intéressantes en terme de poursuite des travaux de simulation.

Une partie des travaux à visée industrielle n'a pas été décrite dans ce manuscrit et avaient pour objectif une implémentation sous logiciel libre de la solidification en vue de réaliser des calculs intensifs pour des pièces industrielles 3D à plusieurs millions de degrés de liberté.

En termes de perspectives, la partie expérimentale montre que la fraction solide n'est pas fonction uniquement que de la température. Elle semble être fonction également de la vitesse de refroidissement. Aussi, un code évolué devrait prendre en compte cette vitesse de refroidissement. Ceci de telle manière que dans un schéma temporel incrémental, entre deux pas de temps et pour chacun des nœuds du maillage, une vitesse de refroidissement est évaluée, une courbe de fraction solide est choisie et l'ensemble des points est réévalué. Ceci jusqu'à convergence de l'ensemble des nœuds. De cette manière, la vitesse de refroidissement de chaque nœud serait pris en compte et la courbe de fraction solide la plus adaptée serait utilisée.

La poursuite des travaux sur la PGD semble importante au vu du traitement des non linéarités entrepris. En effet, la communauté scientifique à jusque lors peu traité la question de la non linéarité. Il serait intéressant de reprendre les exemples largement diffusés en appliquant la discrétisation spatio-temporelle aux propriétés matériaux. Egalement, l'implémentation de la PGD dans le logiciel libre serait un pas en avant. D'une part cela permettrait de tester si les gains de temps se recentrent bien sur la partie inversion de matrice et non plus sur la partie assemblage. D'autre part, cela permettrait de tester des modèles 3D lourds et d'y observer l'efficacité de la méthode PGD.

La partie détection de défauts a été traitée uniquement sous le spectre du champ de température et du post-traitement des isothermes. Une prise en compte du champ de masse volumique doit être réalisée. Pour ce faire, il est nécessaire d'inclure les champs de vitesses, donc la mécanique des fluides (hors cadre de cette thèse). En effet, lors de la solidification, la rétractation crée un appel de matière, ce qui implique un mouvement fluide. La géométrie précise des retassures dans les boucles fermées isothermes dépend précisément de cet écoulement fluide. Une amélioration de de la prédiction des défauts est donc à attendre à ce niveau.

Pour conclure, des travaux expérimentaux doivent être menés pour vérifier et évaluer la variation de fraction solide en fonction de la vitesse de refroidissement pour différents alliages et ainsi obtenir des informations plus précises sur les propriétés matériaux des alliages utilisés. Nous avons observé l'effet d'une augmentation de l'intervalle de solidification sur le champ de température. Ce qui pourrait expliquer les écarts observés industriellement entre simulation et expérimental.



## Références

- [Mat, 2013] (2013). Matlab release r2013b.
- [Adenis and D.V.Ragone, 1962] Adenis, K. and D.V.Ragone (1962). An analysis of the direct chill casting process by numerical methods. *J.Inst. Metals*, 91 :395.
- [Aguirre-Ramirez and Oden, 1973] Aguirre-Ramirez, G. and Oden, J. T. (1973). Finite element technique applied to heat conduction in solids with temperature dependent thermal conductivity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 7(3) :345–355.
- [Aksoz et al., 2010] Aksoz, S., Ocak, Y., Mara, N., Kaya, H., and Bayak, U. (2010). Dependency of the thermal and electrical conductivity on the temperature and composition of cu in the al based alcu alloys. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 34(8) :1507 – 1516.
- [Amine Ammar, 2010] Amine Ammar, Francisco Chinesta, P. D. A. H. (2010). An error estimator for separated representations of highly multidimensional models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Elsevier*, 199((25 28)) :pp.1872–1880. <10.1016/j.cma.2010.02.012>. <hal-01004991>.
- [Ammar et al., 2012] Ammar, A., Chinesta, F., Cueto, E., and Doblaré, M. (2012). Proper generalized decomposition of time-multiscale models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 90(5) :569–596.
- [Ammar et al., 2010] Ammar, A., Chinesta, F., Diez, P., and Huerta, A. (2010). An error estimator for separated representations of highly multidimensional models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(25â28) :1872 – 1880.
- [Ammar et al., 2006] Ammar, A., Mokdad, B., Chinesta, F., and Keunings, R. (2006). A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139(3) :153–176.
- [Ammar et al., 2007] Ammar, A., Mokdad, B., Chinesta, F., and Keunings, R. (2007). A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids : Part ii : Transient simulation using space-time separated representations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144(2) :98–121.
- [Avrami, 1939] Avrami, M. (1939). Kinetics of phase change. i general theory. *The Journal of Chemical Physics*, 7(12) :1103–1112.
- [Avrami, 1940] Avrami, M. (1940). Kinetics of phase change. ii transformation time relations for random distribution of nuclei. *The Journal of Chemical Physics*, 8(2) :212–224.
- [Avrami, 1941] Avrami, M. (1941). Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. iii. *The Journal of Chemical Physics*, 9(2) :177–184.
- [B. Zhang, 2003] B. Zhang, M. Garro, C. T. (2003). Dendrite arm spacing in aluminium alloy cylinder heads produced by gravity semi-permanent mold. *Metallurgical Science and Technology*, Vol. 21(No. 1).
- [Baez et al., 2004] Baez, J., Gonzalez, C., Chavez, M., Castro, M., and Juarez, J. (2004). Fourier thermal analysis of the solidification kinetics in a356/sic p cast composites. *Journal of Materials Processing Technology*, 153 :531–536.
- [Balanche, 1980] Balanche, P. (1980). *Memento de métallurgie appliquée pour les agents de maîtrise et techniciens de fonderie.*. Syndicat Général des Fondateurs de France.
- [Bamberger et al., 1986] Bamberger, M., Minkoff, I., and Stupel, M. (1986). Some observations on dendritic arm spacing in al-si-mg and al-cu alloy chill castings. *Journal of Materials Science*, 21(8) :2781–2786.
- [Bell and Wood, 1983] Bell, G. E. and Wood, A. S. (1983). On the performance of the enthalpy method in the region of a singularity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 19(11) :1583–1592.

- [Belsito, 2014] Belsito, D. L. (2014). *Application of Computational Thermodynamic and Solidification Kinetics to Cold Sprayable Powder Alloy Design*. Phd thesis, Worcester Polytechnic Institute WPI.
- [Belytschko et al., 1996] Belytschko, T., Krongauz, Y., Organ, D., Fleming, M., and Krysl, P. (1996). Meshless methods : An overview and recent developments. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139(1&4) :3 – 47.
- [Bergheau and Fortunier, 2013] Bergheau, J.-M. and Fortunier, R. (2013). *Finite element simulation of heat transfer*. John Wiley & Sons.
- [Billaud-Friess et al., 2014] Billaud-Friess, M., Nouy, A., and Zahm, O. (2014). A tensor approximation method based on ideal minimal residual formulations for the solution of high-dimensional problems. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48 :1777–1806.
- [Bognet et al., 2011] Bognet, B., Leygue, A., Chinesta, F., and Poitou, A. (2011). Reduction de modeles par la pgd pour le calcul de contraintes et deformations residuelles issues du refroidissement de pieces composites. In *MECAMAT*, Aussois, France.
- [Bonithon et al., 2010] Bonithon, G., Joyot, P., Chinesta, F., and Villon, P. (2010). Non-incremental boundary element element discretization of non-linear heat equation based on the proper generalized decomposition. In *International Conference on Boundary Element Method*, Berlin, Germany.
- [Boucinha et al., 2013] Boucinha, L., Gravouil, A., and Ammar, A. (2013). Space–time proper generalized decompositions for the resolution of transient elastodynamic models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 255 :67–88.
- [Bower, 1966] Bower, Brody, F. (1966). Measurements of solute redistribution in dendritic solidification. *Transaction of the Metallurgical Society of AIME*, 236 :p624–634.
- [Bower, 1962] Bower, T. F. (1962). *Dendrite morphology*. Ph.d. thesis, MIT Mass. USA.
- [Breitkopf et al., 2005] Breitkopf, P., Naceur, H., Rassineux, A., and Villon, P. (2005). Moving least squares response surface approximation : Formulation and metal forming applications. *Computers & Structures*, 83(17 18) :1411 – 1428. *Advances in Meshfree Methods*.
- [Breitkopf et al., 2000] Breitkopf, P., Rassineux, A., Touzot, G., and Villon, P. (2000). Explicit form and efficient computation of mls shape functions and their derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48(3) :451–466.
- [Brent et al., 1988] Brent, A., Voller, V., and Reid, K. t. J. (1988). Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change : Application to the melting of a pure metal. *Numerical Heat Transfer, Part A Applications*, 13(3) :297–318.
- [Brody, 1966] Brody, F. (1966). Solute redistribution in dendritic solidification. *Transaction of the Metallurgical Society of AIME*, 236 :p615–624.
- [Brody, 1961] Brody, H. D. (1961). *Influence of slow solidification rates on the dendritic structure of aluminum alloys*. PhD thesis, MIT Mass USA. MASTER THESIS p27.
- [Brody, 1965] Brody, H. D. (1965). *Solute redistribution in dendritic solidification*. PhD thesis, MIT Mass USA. PHD THESIS.
- [Burden and Hunt, 1974] Burden, M. and Hunt, J. (1974). Cellular and dendritic growth. *Journal of Crystal Growth*, 22(2) :109 – 116.
- [Butler and Kerr, 1962] Butler, R. and Kerr, E. (1962). *An introduction to numerical methods*. Pitman Pub. Corp.
- [Campbell, 2003] Campbell, J. (2003). Chapter 5 - solidification structure. In Campbell, J., editor, *Castings (Second Edition)*, pages 117 – 177 et p11 et p3. Butterworth-Heinemann, Oxford, second edition edition.
- [Carslaw and Jaeger, 1959] Carslaw, H. and Jaeger, J. (1959). *Conduction of Heat in Solids*. Oxford science publications. Clarendon Press.
- [Chapman, 1984] Chapman, A. (1984). *Heat Transfer*. Macmillan.

- [Chen and Stefanescu, 1984] Chen, I. and Stefanescu, D. (1984). Computer-aided differential thermal analysis of spheroidal and compacted graphite cast irons. *AFS Transactions*, 92 :947–964.
- [Chinesta et al., 2005] Chinesta, F., Ammar, A., and Cueto, E. (2005). On the use of proper generalized decompositions for multidimensional models. *Revue européenne des éléments finis. Volume*, 8(2).
- [Chinesta et al., 2010] Chinesta, F., Ammar, A., and Cueto, E. (2010). Recent advances and new challenges in the use of the proper generalized decomposition for solving multidimensional models. *Archives of Computational methods in Engineering*, 17(4) :327–350.
- [Chinesta et al., 2013] Chinesta, F., Keunings, R., and Leygue, A. (2013). *The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulations : A Primer*. SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology. Springer. p27-30.
- [Chinesta et al., 2011] Chinesta, F., Ladeveze, P., and Cueto, E. (2011). A short review on model order reduction based on proper generalized decomposition. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 18(4) :395–404.
- [Comini et al., 1974] Comini, G., Del Giudice, S., Lewis, R. W., and Zienkiewicz, O. C. (1974). Finite element solution of non-linear heat conduction problems with special reference to phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 8(3) :613–624.
- [Comini et al., 1990] Comini, G., Giudice, S. D., and Saro, O. (1990). A conservative algorithm for multidimensional conduction phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :697–709.
- [C.R. and Voller, 1993] C.R., S. and Voller, V. (1993). On the enthalpy method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 3(3) :233–244.
- [Crivelli and Idelsohn, 1986] Crivelli, L. A. and Idelsohn, S. R. (1986). A temperature-based finite element solution for phase-change problems. *International journal for numerical methods in engineering*, 23(1) :99–119.
- [Cruz et al., 2006] Cruz, H., Gonzalez, C., Juarez, A., Herrera, M., and Juarez, J. (2006). Quantification of the microconstituents formed during solidification by the newton thermal analysis method. *Journal of materials processing technology*, 178(1) :128–134.
- [Cuenin, 2015] Cuenin, P. (2015). Moulage et noyautage. *Techniques de l'ingénieur Fonderies et moulages : aspects généraux*, base documentaire : TIB352DUO.(ref. article : m3512). fre.
- [CUENIN, 2015] CUENIN, P. (2015). Métallurgie des alliages de fonderie. *Techniques de l'ingénieur Fonderies et moulages : aspects généraux*, base documentaire : TIB352DUO.(ref. article : m3520). fre.
- [Curran, 1922] Curran, J. (1922). "modification" of aluminumsilicon alloys. *Chemical and metallurgical engineering*, 27(8) :360–390.
- [Dantzig and Rappaz, 2009] Dantzig, J. and Rappaz, M. (2009). *Solidification*. Engineering sciences. EFPL Press. p 399, p39.
- [Davydov, 2012] Davydov, M. (2012). Nucleation and growth of a gas bubble in magma. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 53(3) :324–332.
- [Del Giudice et al., 1978] Del Giudice, S., Comini, G., and Lewis, R. (1978). Finite element simulation of freezing processes in soils. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2(3) :223–235.
- [Delahaye, 2001] Delahaye, J.-P. (2001). Jusqu'où l'ordinateur calculera-t-il ? *Pour la Science*, (283).
- [Desbiolles et al., 1987] Desbiolles, J.-L., Droux, J.-J., Rappaz, J., and Rappaz, M. (1987). Simulation of solidification of alloys by the finite element method. *Computer Physics Reports*, 6(16) :371 – 383.
- [Despret, 2013] Despret, Pierre, J.-L. D. P. V. (2013). Méthode pgd appliquée à la non linéarité matériels. In *CSMA Giens 13-17 mai 2013*.

- [Despret, 2014] Despret, Pierre, J.-L. D. P. V. (2014). Pgd method with material non-linearities with enthalpic approach applied foundry. In *WCCM XI, July 20 - 25, 2014, Barcelona, Spain*.
- [Dhatt et al., 2013] Dhatt, G., Lefrancois, E., and Touzot, G. (2013). *Finite Element Method*. ISTE. Wiley.
- [Dincer and Zamfirescu, 2014] Dincer, I. and Zamfirescu, C. (2014). Chapter 1 - fundamentals of thermodynamics. In Zamfirescu, I. D., editor, *Advanced Power Generation Systems*, pages 1 – 53. Elsevier, Boston.
- [Dobrzanski et al., 2006] Dobrzanski, L., Maniara, R., and Sokolowski, J. (2006). The effect of cast al-si-cu alloy solidification rate on alloy thermal characteristics. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, 17(1-2) :217–220.
- [Dour, 2009] Dour, G. (2009). *Aide mémoire fonderie*. 9782100523320. p147.
- [Dufy, 1937] Dufy, R. (1937). La fée électricité. [www.mam.paris.fr/fr/oeuvre/la-fee-electricite](http://www.mam.paris.fr/fr/oeuvre/la-fee-electricite).
- [Dulong, 2014] Dulong, Jean-Luc, P. D. P. V. (2014). An enthalpy based heat equation to solve the phase change. In *WCCM XI, July 20 - 25, 2014, Barcelona, Spain*.
- [Dumon, 2011] Dumon, A. (2011). *Reduction dimensionnelle de type PGD pour la resolution des écoulements in-compressibles*. *Fluids mechanics*. PhD thesis, Université de La Rochelle. p55, French. <tel-00644565v1>.
- [Durand-Charre, 2012] Durand-Charre, M. (2012). *Microstructure des aciers et des fontes - Genese et interpretation nouvelle edition 2012 : Genese et Interpretation*. Science des materiaux. EDP Sciences. p90-91.
- [Eskin, 2008] Eskin, D. (2008). *Physical Metallurgy of Direct Chill Casting of Aluminum Alloys*. Advances in Metallic Alloys. Taylor & Francis. p29.
- [Eyres et al., 1946] Eyres, N. R., Hartree, D. R., Ingham, J., Jackson, R., Sarjant, R. J., and Wagstaff, J. B. (1946). The calculation of variable heat flow in solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 240(813) :1–57.
- [Eyring, 1941] Eyring, H. (1941). Physical chemistry : An introduction (moelwyn-hughes, e. a.). *Journal of Chemical Education*, 18(6) :300.
- [Fachinotti et al., 1999] Fachinotti, V. D., Cardona, A., and Huespe, A. E. (1999). A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(12) :1863–1884.
- [Falco et al., 2013] Falco, A., Hilario, L., Montes, N., and Mora, M. (2013). Numerical strategies for the galerkin–proper generalized decomposition method. *Mathematical and Computer Modelling*, 57(7) :1694–1702.
- [Felberbaum et al., 2011] Felberbaum, M., Landry-Desy, E., Weber, L., and Rappaz, M. (2011). Effective hydrogen diffusion coefficient for solidifying aluminium alloys. *Acta Materialia*, 59(6) :2302 – 2308.
- [Feulvarch, 012a] Feulvarch, E. (2012a). Finite element modeling of interdiffusion phenomena in solid metals. *Comptes Rendus Mecanique*, 340(10) :695–701.
- [Feulvarch et al., 2009] Feulvarch, E., Bergheau, J., and Leblond, J. (2009). An implicit finite element algorithm for the simulation of diffusion with phase changes in solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 78(12) :1492–1512.
- [Feulvarch and Bergheau, 2007] Feulvarch, E. and Bergheau, J.-M. (2007). An implicit fixed-grid method for the finite-element analysis of heat transfer involving phase changes. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 51(6) :585–610.
- [Feulvarch et al., 2011] Feulvarch, E., Roux, J.-C., and Bergheau, J.-M. (2011). An enriched finite element algorithm for the implicit simulation of the stefan problem. *Comptes Rendus Mecanique*, 339(10) :649–654.

- [Feulvarch et al., 2012] Feulvarch, E., Roux, J.-C., and Bergheau, J.-M. (2012). Finite element solution for diffusion–convection problems with isothermal phase changes. *Comptes Rendus Mecanique*, 340(7) :512–517.
- [Figueredo and Flemings, 1998] Figueredo, S. and Flemings (1998). measurement and calculation of solid fraction in quenched semi-solid metls of rheocast aluminium alloy a357 . *Light Metals, San Antonio, TX, USA*, pages pp1103–106.
- [Flemings, 1974] Flemings, M. (1974). *Solidification Processing*. Materials Science and Engineering Series. McGraw-Hill.
- [Fourier, 1822] Fourier, J. (1822). *Théorie analytique de la chaleur*. Chez Firmin Didot, père et fils.
- [Fox, 1973] Fox, L. (1973). What are the best numerical methods ? *JR Ockendon, WR Hodgkins (Eds.) Clarendon Press, Oxford*, Moving Boundary Problems in Heat Flow and Diffusion.
- [G. Comini and Saro., 1989] G. Comini, S. D. G. and Saro., O. (1989). Conservative equivalent heat capacity methods for non-linear heat conduction. *Numerical methods in thermal problems, In R.W. Lewis and K. Morgan ed. pp5-15. Pineridge Press, Swansea, U.K., 6-1(2) :5–15.*
- [Garat, 2015] Garat, M. (2015). Moulage des alliages d'aluminium moules permanents : coquille, sous pression et apparentes. *Techniques de l'ingenieur Fonderies et moulages des alliages*, base documentaire : TIB479DUO.(ref. article : m3637).
- [Germain, 1986] Germain, P. (1986). *Mécanique*. Number vol.1 in Mécanique. Ecole Polytechnique. pVII(2.4(26)).
- [Ghnatios et al., 2012] Ghnatios, C., Masson, F., Huerta, A., Leygue, A., Cueto, E., and Chinesta, F. (2012). Proper generalized decomposition based dynamic data-driven control of thermal processes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 213 :29–41.
- [Gibbs and Mendez, 2008] Gibbs, J. W. and Mendez, P. F. (2008). Solid fraction measurement using equation-based cooling curve analysis. *Scripta Materialia*, 58(8) :699 – 702.
- [Glardon and Kurz, 1981] Glardon, R. and Kurz, W. (1981). Solidification path and phase diagram of directionally solidified cosmcu alloys. *Journal of Crystal Growth*, 51(2) :283 – 291.
- [Glicksman, 2010] Glicksman, M. (2010). *Principles of Solidification : An Introduction to Modern Casting and Crystal Growth Concepts*. SpringerLink : Bucher. Springer. p31.
- [Glicksman and Hills, 2001] Glicksman, M. and Hills, R. (2001). Non-equilibrium segregation during alloy solidification. *Philosophical Magazine A*, 81(1) :153–159.
- [Greenwood, 1963] Greenwood, N. (1963). The chemistry of gallium. volume 5 of *Advances in Inorganic Chemistry and Radiochemistry*, pages 91 – 134. Academic Press.
- [Guenther et al., 2014] Guenther, P., Coates, J., and Helgason, S. (2014). *Huygens' Principle and Hyperbolic Equations*. Perspectives in Mathematics. Elsevier Science.
- [Guillet, 1922] Guillet (1922). Les alliages d'aluminium et leurs emplois dans l'industrie. *Revue de métallurgie*, 19 :303–312.
- [Gulliver, 1913] Gulliver (1913). Quantitative effect of rapid cooling upon the constitution of binary alloys. *The institute of metals*, pages p146–157.
- [Guo et al., 2009] Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, P., and Schille, J.-P. (2009). Modelling phase transformations and material properties critical to the prediction of distortion during the heat treatment of steels. *International Journal of Microstructure and Materials Properties*, 4(2) :187–195.
- [Guo et al., 2013] Guo, Z. L., Turner, R., Da Silva, A. D., Sauders, N., Schroeder, F., Cetlin, P. R., and Schille, J. P. (2013). Introduction of materials modelling into processing simulation. In *Materials Science Forum*, volume 762, pages 266–276. Trans Tech Publ.
- [Heyberger et al., 2013] Heyberger, C., Boucard, P.-A., and Neron, D. (2013). A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the pgd framework. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 259(0) :40 – 49.

- [Hirschfelder et al., 1954] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F., Bird, R. B., and Mayer, M. G. (1954). *Molecular theory of gases and liquids*, volume 26. Wiley New York.
- [Hirt and Kopp, 2009] Hirt, G. and Kopp, R. (2009). *Thixoforming*. Wiley. p 150.
- [Hunt and Lu, 1996] Hunt, J. and Lu, S. (1996). Numerical modeling of cellular/dendritic array growth : spacing and structure predictions. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 27(3) :611–623.
- [Jackson, 2006] Jackson, K. A. (2006). *Kinetic Processes : Crystal Growth, Diffusion, and Phase Transformations in Materials*. John Wiley & Sons. p136.
- [Jasson, 2015] Jasson, P. (2015). Sables et matériaux de moulage de fonderie. *Techniques de l'ingénieur Techniques de moulage des métaux*, base documentaire : TIB358DUO.(ref. article : m3575). fre.
- [JMatPro, 2014] JMatPro (2014). Version 8.0 ; practical software for materials properties.
- [Kholpanov et al., 2003] Kholpanov, L., Zakiev, S., and Fedotov, V. (2003). Neumann lame clapeyron stefan problem and its solution using fractional differential-integral calculus. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 37(2) :113–121.
- [Kirkwood, 1994] Kirkwood, D. H. (1994). Semisolid metal processing. *International Materials Reviews*, 39(5) :173–189. doi :10.1179/imr.1994.39.5.173.
- [Kreyszig and Norminton, 2001] Kreyszig, E. and Norminton, E. (2001). *Mathematica computer guide : a self-contained introduction for Erwin Kreyszig, Advanced engineering mathematics, eighth edition*. Advanced Engineering Mathematics. Wiley. p14.
- [Lacroix, 1819] Lacroix, S. (1819). *Traité du calcul différentiel et du calcul intégral*. Number vol.3 in Traite du calcul différentiel et du calcul integral. Chez Courcier.
- [Ladeveze, 1989] Ladeveze, P. (1989). La méthode à grand incrément de temps pour l'analyse de structures à comportement non linéaire décrit par variables internes. *Comptes-rendus. Académie des Sciences Paris*, 309 :1095–1099.
- [Ladeveze and Chamoin, 2011] Ladeveze, P. and Chamoin, L. (2011). On the verification of model reduction methods based on the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(23) :2032–2047.
- [Ladeveze and Dureisseix, 1999] Ladeveze, P. and Dureisseix, D. (1999). Une nouvelle strategie de calcul micro/macro en mecanique des structures. *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences - Series II - Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(12) :1237 – 1244.
- [Ladeveze et al., 2010] Ladeveze, P., Passieux, J.-C., and Néron, D. (2010). The latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(21) :1287–1296.
- [Lame, 1831] Lamé, C. (1831). *Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe liquide*. Number vol.15 16. Bulletin universel des sciences et de l'industrie : Bulletin des sciences mathématiques, astronomiques, physiques et chimiques, page250-256.
- [Leibniz and Parmentier, 1989] Leibniz, G. and Parmentier, M. (1989). *La naissance du calcul différentiel : 26 articles des "Acta Eruditorum"*. Mathesis (Paris, France). Librairie Philosophique J. Vrin.
- [Lemmon, 1979] Lemmon, E. (1979). Phase-change techniques for finite element conduction codes. Technical report, Idaho National Engineering Lab., Idaho Falls (USA).
- [Magenes et al., 1987] Magenes, E., Nocketto, R., and Verdi, C. (1987). Energy error estimates for a linear scheme to approximate nonlinear parabolic problems. *Modélisation mathématique et analyse numérique*, 21(4) :655–678.
- [McCartney, 1989] McCartney, D. G. (1989). Grain refining of aluminium and its alloys using inoculants. *International Materials Reviews*, 34(1) :247–260.
- [Mercier et al., 1999] Mercier, J., Zambelli, G., and Kurz, W. (1999). *Introduction a la science des matériaux*. Traite des matériaux. Presses polytechniques et universitaires romandes. p217.

- [Meyer, 1978] Meyer, G. H. (1978). The numerical solution of stefan problems with front-tracking and smoothing methods. *Applied Mathematics and Computation*, 4(4) :283 – 306.
- [Mizikar, 1967] Mizikar, E. (1967). Mathematical heat transfer model for solidification of continuously cast steel slabs. *Trans. TMS-AIME*, 239 :pp. 1747–1753.
- [Modi et al., 2014] Modi, S. K., B., D. P., and Basavaraj, M. (2014). Effect of moisture content and temperature on thermal conductivity of psidium guajava l. by line heat source method (transient analysis). *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 78(0) :354 – 359.
- [Morgan et al., 1978] Morgan, K., Lewis, R., and Zienkiewicz, O. (1978). An improved algorithm for heat conduction problems with phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 12(7) :1191–1195.
- [Mundim et al., 1989] Mundim, M., Fortes, M., Lewis, R., and Morgan, K. (1989). Evaluation of finite element method utilised in the solution of solid-liquid phase change problems. *Numerical methods in thermal problems*, 6 :90–100.
- [Nafisi et al., 2009] Nafisi, S., Emadi, D., and Ghomashchi, R. (2009). Semi solid metal processing : The fraction solid dilemma. *Materials Science and Engineering : A*, 507(1) :87–92.
- [Nedjar, 2002] Nedjar, B. (2002). An enthalpy-based finite element method for nonlinear heat problems involving phase change. *Computers & Structures*, 80(1) :9 – 21.
- [Nguyen, 2012] Nguyen, T. L. (2012). *Proper Generalized Decomposition for solving transient coupled multiphysics problems in the framework of mechanics of materials - Adaptive mesh and coupling with the ANM*. Theses, ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers. Chapitre B p 72-75.
- [Nouy, 2010] Nouy, A. (2010). A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(23-24) :1603 – 1626.
- [Onate et al., 1996] Onate, E., Idelsohn, S., Zienkiewicz, O., and Taylor, R. (1996). A finite point method in computational mechanics. applications to convective transport and fluid flow. *International journal for numerical methods in engineering*, 39(22) :3839–3866.
- [Pailhes et al., 2012] Pailhes, J., Pradere, C., Battaglia, J.-L., Toutain, J., Kusiak, A., Aregba, A., and Batsale, J.-C. (2012). Thermal quadrupole method with internal heat sources. *International Journal of Thermal Sciences*, 53(0) :49 – 55.
- [Paolini et al., 1988] Paolini, M., Sacchi, G., and Verdi, C. (1988). Finite element approximations of singular parabolic problems. *International journal for numerical methods in engineering*, 26(9) :1989–2007.
- [Pelton, 2014] Pelton, A. D. (2014). 3 - thermodynamics and phase diagrams. In Hono, D. E. L., editor, *Physical Metallurgy (Fifth Edition)*, pages 203 – 303. Elsevier, Oxford, fifth edition edition.
- [Pham, 1986] Pham, Q. (1986). The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 29(2) :285 – 291.
- [Pham, 1995] Pham, Q. (1995). Comparison of general-purpose finite-element methods for the stefan problem. *Numerical Heat Transfer*, 27(4) :417–435.
- [Pham, 1985] Pham, Q. T. (1985). A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28(11) :2079–2084.
- [Pruliere et al., 2010] Pruliere, E., Chinesta, F., and Ammar, A. (2010). On the deterministic solution of multidimensional parametric models using the proper generalized decomposition. *Mathematics and Computers in Simulation*, 81(4) :791–810.
- [Pruliere et al., 2013] Pruliere, E., Chinesta, F., Ammar, A., Leygue, A., and Poitou, A. (2013). On the solution of the heat equation in very thin tapes. *International Journal of Thermal Sciences*, 65(0) :148 – 157.

- [Rappaz et al., 1998] Rappaz, M., Bellet, M., and Deville, M. (1998). *Modélisation numérique en science et génie des matériaux*. Traite des matériaux. Presses polytechniques et universitaires romandes.
- [Robertson, 2015] Robertson, Marcos Cardoso, E. V. (2015). Evaluating the metal cleanliness of Al-Si casting alloys by fracture surface analysis of K-mold samples. *2015 TMS Annual Meeting & Exhibition*.
- [Rolland, 2000] Rolland, A. B. . D. (2000). Lexique. [http://crd1418.org/espace\\_pedagogique/lexique/lexique\\_i.ni.h](http://crd1418.org/espace_pedagogique/lexique/lexique_i.ni.h)
- [Rolph and Bathe, 1982] Rolph, W. D. and Bathe, K.-J. (1982). An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 18(1) :119–134.
- [Rose, 1960] Rose, M. E. (1960). A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary. *American Mathematical Society*, 14(71) :249–256.
- [Rubinshtein, 1971] Rubinshtein, L. I. (1971). The stefan problem. *Translations of mathematical monographs, American Mathematical Soc*, 27. ISBN : 0821886568.
- [S. M. H. Mirbagheri and Firoozi, 2011] S. M. H. Mirbagheri, H. Baiani, M. B. and Firoozi, S. (2011). Simulation of liquid flow permeability for dendritic structures during solidification process. *Computational Fluid Dynamics Technologies and Applications*, ISBN : 978-953-307-169-5. Prof. Igor Minin (Ed.).
- [Saint-Blanquet, 2001] Saint-Blanquet, C. (2001). Conduction de la chaleur. Claude.Saint-Blanquet@univ-nantes.fr ; [http://www.sciences.univ-nantes.fr/sites/claude\\_saintblanquet/](http://www.sciences.univ-nantes.fr/sites/claude_saintblanquet/).
- [Saunders et al., 2003] Saunders, N., Guo, U., Li, X., Miodownik, A., and Schille, J.-P. (2003). Using jmatpro to model materials properties and behavior. *JOM*, 55(12) :60–65.
- [Scheil, 1942] Scheil, E. (1942). Bemerkungen zur schichtkristallbildung. *Zeitschrift fur Metallkunde*, 34(3) :70–72.
- [Shi et al., 2014] Shi, C., Wang, C., and Wei, T. (2014). Numerical solution for an inverse heat source problem by an iterative method. *Applied Mathematics and Computation*, 244(0) :577 – 597.
- [Sonntag et al., 1998] Sonntag, R. E., Borgnakke, C., Van Wylen, G. J., and Van Wyk, S. (1998). *Fundamentals of thermodynamics*, volume 6. Wiley New York.
- [Spear, 1963] Spear, G. G. (1963). Dendrite cell size. *AFS*, pages 209–215.
- [Stefanescu, 2008] Stefanescu, D. (2008). *Science and Engineering of Casting Solidification, Second Edition*. Springer. p36.
- [Stonebrook and Sicha, 1949] Stonebrook, E. and Sicha, W. (1949). Correlation of cooling curve data with casting characteristics of aluminum alloys. *AFS Transactions*, 57 :489–496.
- [Suery, 2015] Suery, M. (2015). Mise en forme à l'état semi-solide rheoformage et thixoformage. *Techniques de l'ingénieur Mise en forme des métaux : aspects rhéologiques et métallurgiques*, base documentaire : TIB476DUO.(ref. article : m3050). fre.
- [Taigbenu, 2015] Taigbenu, A. E. (2015). Inverse solutions of temperature, heat flux and heat source by the green element method. *Applied Mathematical Modelling*, 39(2) :667 – 681.
- [Tamma and Namburu, 1990] Tamma, K. K. and Namburu, R. R. (1990). Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulations for applications to solidification problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :803–820.
- [Thomas et al., 1984] Thomas, B., Samarasekera, I., and Brimacombe, J. (1984). Comparison of numerical modeling techniques for complex, two-dimensional, transient heat-conduction problems. *Metallurgical Transactions B*, 15(2) :307–318.
- [TOMOPIC, ] TOMOPIC. Projet industrilab 2010-2013 utc-montupet-cetim-esi.
- [Tszeng et al., 1989] Tszeng, T., Im, Y., and Kobayashi, S. (1989). Thermal analysis of solidification by the temperature recovery method. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 29(1) :107 – 120. Technology of Plasticity in Japan.

- [Venkatesan et al., 2005] Venkatesan, A., Gopinath, V., and Rajadurai, A. (2005). Simulation of casting solidification and its grain structure prediction using fem. *Journal of materials processing technology*, 168(1) :10–15.
- [Voller et al., 1990] Voller, V., Swaminathan, C., and Thomas, B. (1990). Fixed grid techniques for phase change problems : a review. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4) :875–898.
- [Vuik, 1993] Vuik, C. (1993). Some historical notes on the stefan problem. *Faculty of Faculty of Electrical Engineering, Mathematics and Computer Science, Delft University of Technology*.
- [Vuillermoz, 1993] Vuillermoz, P.-L. (1993). *Conductivite Thermique des Solides*. Ed. Techniques Ingénieur.
- [W. Hume-Rothery P. S. Rudman and R. I. Jaffee, 1967] W. Hume-Rothery P. S. Rudman, J. S. and R. I. Jaffee, e. (1967). *Phase Stability in Metals and Alloys. Factor affecting theoretical stability of metallic phases*. p3-23.
- [Wilson and Nickell, 1966] Wilson, E. L. and Nickell, R. E. (1966). Application of the finite element method to heat conduction analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 4(3) :276–286.
- [Yaws, 2014] Yaws, C. L. (2014). Chapter 6 - density of solid inorganic compounds. In Yaws, C. L., editor, *Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons (Second Edition)*, pages 353 – 365. Gulf Publishing Company, Oxford, second edition edition.
- [Zhang et al., 2010] Zhang, Y., Evans, J., and Yang, S. (2010). The prediction of solid solubility of alloys : developments and applications of hume-rothery ?s rules. *The Journal of Crystallization Physics and Chemistry*, 1(2) :103–119.
- [Zienkiewicz et al., 2013] Zienkiewicz, O., Taylor, R., and Zhu, J. (2013). *The Finite Element Method : Its Basis and Fundamentals : Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Science.
- [Zienkiewicz et al., 1977] Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L., Zienkiewicz, O. C., and Taylor, R. L. (1977). *The finite element method*, volume 3. McGraw-hill London.

# Annexes

Détail des développements PGD pour la partie 2.

**Première équation en R avec**  $T^*(x, t) = R^*(x)S(t)$  La première équation (recherche R connaissant S) est issue du fait que l'on pose  $T^*(x, t) = R^*(x)S(t)$ . Dès lors, il nous faut discrétiser et poser les fonctions de formes suivantes. Dans un but de clarté, nous exprimerons chacune des intégrales individuellement.

Termes de gauche :

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \rho c_p (T^m) \frac{\partial RS}{\partial t} R^* S dV dt = \int_{\Omega_e} \mathbf{R}^{*T} \mathbf{N} \mathbf{N}^T \mathbf{R} (\mathbf{N}^T [\mathbf{C}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) \dot{S} S dt dV = \mathbf{R}^{*T} [\mathbf{M}_1^R] \mathbf{R}$$

$$\text{Avec } \mathbf{a}_1(S) = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \dot{S} S dt \text{ et } [\mathbf{M}_1^R(S)] = \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{C}] \mathbf{a}_1) \mathbf{N} \mathbf{N}^T dV$$

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) \nabla(RS) \nabla(R^*S) dV dt = \int_{\Omega_e} \mathbf{R}^{*T} [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T \mathbf{R} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S^2 dt dV = \mathbf{R}^{*T} [\mathbf{K}_2^R] \mathbf{R}$$

$$\text{Avec } \mathbf{b}_1(S) = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} S^2 dt \text{ et } [\mathbf{K}_2^R(S)] = \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \mathbf{b}_1) [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T dV.$$

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} R^* S h_c R S dS dt = \mathbf{R}^{*T} \int_{\Gamma_c} \mathbf{N} h_c \mathbf{N}^T dS \mathbf{R} \int_{\Omega_t} S^2 dt = \mathbf{R}^{*T} c_1 [\mathbf{K}_c] \mathbf{R}$$

$$\text{Avec } c_1(S) = \int_{\Omega_t} S^2 dt \text{ et } [\mathbf{K}_c] = \int_{\Gamma_c} h_c \mathbf{N} \mathbf{N}^T dS.$$

On obtient pour le terme de gauche, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{R}^{*T} \left( [\mathbf{M}_1^R] + [\mathbf{K}_2^R] + c_1 [\mathbf{K}_c] \right) \mathbf{R} \quad (4.12)$$

Termes de droite :

$$-\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \rho c_p (T^m) \sum_j \frac{\partial a_i}{\partial t} \varphi_j T^* dV dt = -\mathbf{R}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \varphi_j^T \mathbf{N} (\mathbf{N}^T [\mathbf{C}] dV \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S \dot{a}_j^T dt = -\mathbf{R}^{*T} \mathbf{b}_{1,j}^R$$

$$\text{Avec } \mathbf{d}_{1,j}(S) = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} S \dot{a}_j^T dt \text{ et } \mathbf{b}_{1,j}^R = \sum_j \int_{\Omega_e} \mathbf{N} (\varphi_j^T \mathbf{N}) \mathbf{N}^T [\mathbf{C}] dV \mathbf{d}_{1,j}.$$

$$-\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) \nabla \left( \sum_j a_i \varphi_j \right) \nabla(T^*) dV dt = -\mathbf{R}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \int_{\Omega_t} \mathbf{P}) S a_j dt [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T dV \varphi_j$$

$$= -\mathbf{R}^{*T} \mathbf{b}_{2,j}^R$$

$$\mathbf{e}_{1,j}(S) = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} S a_j dt \text{ et } \mathbf{b}_{2,j}^R(S) = \sum_j \int_{\Omega_e} \mathbf{N}^T [\mathbf{K}] \mathbf{e}_{1,j} [\nabla(\mathbf{N})] [\nabla(\mathbf{N})]^T \varphi_j dV$$

$$+\int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} R^* S h_c T_{ext} dS dt = +\mathbf{R}^{*T} \int_{\Gamma_c} h_c T_{ext}^T \mathbf{N} dS \int_{\Omega_t} S dt = +\mathbf{R}^{*T} \mathbf{b}_3^R$$

$$\text{Avec } f_1(S) = \int_{\Omega_t} S dt, \mathbf{l}_c = \int_{\Gamma_c} h_c T_{ext}^T \mathbf{N} dS \text{ et } \mathbf{b}_3^R = \mathbf{l}_c f_1$$

$$-\int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} T^* h_c \left( \sum_j a_i \varphi_j \right) dS dt = -\mathbf{R}^{*T} \sum_j \int_{\Gamma_c} h_c \mathbf{N} \mathbf{N}^T dS \varphi_j \int_{\Omega_t} a_j S dt = +\mathbf{R}^{*T} [\mathbf{K}_c] \varphi_j g_{1,j}$$

$$\text{Avec } g_{1,j}(S) = \int_{\Omega_t} a_j S dt.$$

On obtient pour le terme de droite, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{R}^{*T}(-\mathbf{b}_1^R - \mathbf{b}_2^R + \mathbf{b}_3^R - [\mathbf{K}_c] \boldsymbol{\varphi}_j g_{1,j}) \quad (4.13)$$

Ce qui donne, en regroupant les formes condensées de droite et de gauche :

$$\mathbf{R}^{*T}([\mathbf{M}_1^R] + [\mathbf{K}_2^R] + c_1[\mathbf{K}_C])\mathbf{R} = \mathbf{R}^{*T}(-\mathbf{b}_1^R - \mathbf{b}_2^R + \mathbf{b}_3^R - [\mathbf{K}_c] \boldsymbol{\varphi}_j g_{1,j}) \quad (4.14)$$

Nous devons alors résoudre  $\forall \mathbf{R}^*$  le système :

$$\mathbf{A}^1(S) \mathbf{R} = \mathbf{b}^1 \quad (4.15)$$

avec  $\mathbf{A}^1 = [\mathbf{M}_1^R] + [\mathbf{K}_2^R] + c_1[\mathbf{K}_C]$  et  $\mathbf{b}^1 = -\mathbf{b}_1^R - \mathbf{b}_2^R + \mathbf{b}_3^R - [\mathbf{K}_c] \boldsymbol{\varphi}_j g_{1,j}$ .

Remarquons que par construction,  $\mathbf{A}^1$  a la même structure creuse que les matrices masses et rigidité usuelles de la méthode de référence.

Intéressons nous maintenant à la seconde équation.

**Seconde équation en S avec**  $T^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}(\mathbf{x})S^*(t)$  La seconde équation (on recherche S connaissant R) est issue du fait que l'on pose  $T^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{R}(\mathbf{x})S^*(t)$ . Nous reprenons l'équation variationnelle 2.27.

Dans un but de clarté, nous exprimerons de la même manière que précédemment chacune des intégrales individuellement.

Termes de gauche :

$$\int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \rho c_p (T^m) R^2 \frac{\partial S}{\partial t} S^* dV = \mathbf{S}^{*T} \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{P}^T}{\partial t} \mathbf{S} (\mathbf{P}^T [\mathbf{C}^T] \int_{\Omega_e} \mathbf{N}) R^2 dV dt = \mathbf{S}^{*T} [\mathbf{A}_1^S] \mathbf{S}$$

$$\text{Avec} \quad \mathbf{a}_2(R) = \int_{\Omega_e} \mathbf{N} R^2 dV \text{ et } [\mathbf{A}_1^S] = \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^T [\mathbf{C}^T] \mathbf{a}_2) \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{P}^T}{\partial t} dt.$$

$$+ \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) S S^* \nabla R \nabla^T R dV dt = \mathbf{S}^{*T} \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{S} (\mathbf{P}^T [\mathbf{K}^T] \int_{\Omega_e} \mathbf{N}) \nabla(R) \nabla^T(R) dV dt = \mathbf{S}^{*T} [\mathbf{A}_2^S] \mathbf{S}$$

$$\text{Avec} \quad \mathbf{b}_2(R) = \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \nabla(R) \nabla^T(R) dV \text{ et } [\mathbf{A}_2^S] = \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^T [\mathbf{K}^T] \mathbf{b}_2) \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt.$$

$$+ \int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} h_c R^2 S S^* dS dt = \mathbf{S}^{*T} \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt \mathbf{S} \int_{\Gamma_c} h_c R^2 dS = \mathbf{S}^{*T} c_2[\mathbf{Q}] \mathbf{S}$$

$$\text{Avec} \quad c_2(R) = \int_{\Gamma_c} h_c R^2 dS \text{ et } [\mathbf{Q}] = \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt.$$

On obtient pour le terme de gauche, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{S}^{*T}([\mathbf{A}_1^S] + [\mathbf{A}_2^S] + c_2[\mathbf{Q}])\mathbf{S} \quad (4.16)$$

Termes de droite :

$$- \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} \rho c_p (T^m) \sum_j \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \boldsymbol{\varphi}_j R S^* dS dt = -\mathbf{S}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{P}^T}{\partial t} \mathbf{a}_j (\mathbf{P}^T [\mathbf{C}^T] \int_{\Omega_e} \mathbf{N}) \boldsymbol{\varphi}_j R dV dt = -\mathbf{S}^{*T} \mathbf{b}_1^S$$

$$\text{Avec} \quad \mathbf{d}_{2,j}(R) = \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \boldsymbol{\varphi}_j R dV \text{ et } \mathbf{b}_1^S = \sum_j \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^T [\mathbf{C}^T] \mathbf{d}_{2,j}) \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{P}^T}{\partial t} \mathbf{a}_j dt.$$

$$- \int_{\Omega_t} \int_{\Omega_e} k(T^m) S^* \nabla (\sum_j \alpha_j \boldsymbol{\varphi}_j) \nabla R dV dt = -\mathbf{S}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j (\mathbf{P}^T [\mathbf{K}^T] \int_{\Omega_e} \mathbf{N}) \nabla(R) \nabla^T(\boldsymbol{\varphi}_j) dV dt = -\mathbf{S}^{*T} \mathbf{b}_2^S$$

$$\text{Avec} \quad \mathbf{e}_{2,j}(R) = \int_{\Omega_e} \mathbf{N} \nabla(R) \nabla^T(\boldsymbol{\varphi}_j) dV \text{ et } \mathbf{b}_2^S = \sum_j \int_{\Omega_t} (\mathbf{P}^T [\mathbf{K}^T] \mathbf{e}_{2,j}) \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{a}_j dt.$$

$$+ \int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} h_c S^* T_{\text{ext}} R dS dt = +\mathbf{S}^{*T} \int_{\Omega_t} \mathbf{P} dt \int_{\Gamma_c} h_c T_{\text{ext}}^T R dS = +\mathbf{S}^{*T} \mathbf{b}_3^S$$

Avec  $f_2(\mathbf{R}) = \mathbf{l}_c^T \mathbf{R}$  et  $\mathbf{b}_3^S = f_2 \int_{\Omega_t} \mathbf{P} dt$ .

$$-\int_{\Omega_t} \int_{\Gamma_c} h_c \mathbf{T}_{ext} \mathbf{R} \mathbf{S}^* \sum_j (a_i \varphi_j) dS dt = -\mathbf{S}^{*T} \sum_j \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt \mathbf{a}_j \int_{\Gamma_c} h_c \varphi_j \mathbf{R} dS = -\mathbf{S}^{*T} \mathbf{b}_4^S$$

Avec  $g_{2,j}(\mathbf{R}) = \varphi_j [\mathbf{K}_C] \mathbf{R}$  et  $\mathbf{b}_4^S = \sum_j \int_{\Omega_t} \mathbf{P} \mathbf{P}^T dt \mathbf{a}_j g_{2,j}$ .

On obtient pour le terme de droite, et de manière condensée la formulation suivante :

$$\mathbf{S}^{*T} (-\mathbf{b}_1^S - \mathbf{b}_2^S + \mathbf{b}_3^S - \mathbf{b}_4^S) \quad (4.17)$$

Ce qui donne, en regroupant les formes condensées de droite et de gauche :

$$\mathbf{S}^{*T} ([\mathbf{A}_1^S] + [\mathbf{A}_2^S] + c_2[\mathbf{Q}]) \mathbf{S} = \mathbf{S}^{*T} (-\mathbf{b}_1^S - \mathbf{b}_2^S + \mathbf{b}_3^S - \mathbf{b}_4^S) \quad (4.18)$$

Nous devons alors résoudre  $\forall \mathbf{S}^*$  le système :

$$\mathbf{A}^2(\mathbf{R}) \mathbf{S} = \mathbf{b}^2 \quad (4.19)$$

avec  $\mathbf{A}^2 = [\mathbf{A}_1^S] + [\mathbf{A}_2^S] + c_2[\mathbf{Q}]$  et  $\mathbf{b}^2 = -\mathbf{b}_1^S - \mathbf{b}_2^S + \mathbf{b}_3^S - \mathbf{b}_4^S$ .