



**HAL**  
open science

# Effet de la convection naturelle et forcée lors des transitions de phases : Application à la croissance cristalline

Idir Hamzaoui

► **To cite this version:**

Idir Hamzaoui. Effet de la convection naturelle et forcée lors des transitions de phases : Application à la croissance cristalline. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Lyon; Université des Sciences et de la Technologie Houari-Boumediène (Alger), 2019. Français. NNT : 2019LYSEI132 . tel-02902123

**HAL Id: tel-02902123**

**<https://theses.hal.science/tel-02902123>**

Submitted on 17 Jul 2020

**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.



# INSA



N°d'ordre NNT : 2019LYSEI132

## THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LYON

opérée au sein de

**l'INSA Lyon**

En cotutelle internationale avec

**L'Université des Sciences et de la Technologie Houari  
Boumedienne**

**Ecole Doctorale N° 162**

**Mécanique, Energétique, Génie civil et Acoustique (MEGA)**

**Spécialité/discipline de doctorat : Mécanique des Fluides**

Soutenue publiquement le 19/12/2019, par :

**Idir HAMZAOU**

---

# Effet de la convection naturelle et forcée lors des transitions de phase : Application à la croissance cristalline

---

Devant le jury composé de :

Bouabdallah, Ahcène	Professeur, Usthb, Alger (Algérie)	Président
Kaddeche, Slim	Professeur, INSAT, Tunis (Tunisie)	Rapporteur
Fournier-Gagnoud, Annie	Directrice de recherche, CNRS SIMAP	Rapporteuse
Hachani, Lakhdar	Docteur HDR, Université Amar Telidji, Laghouat (Algérie)	Examineur
Botton, Valéry	Professeur, INSA Lyon	Co-Directeur de thèse
Boenzaoui, Ahmed	Professeur, Usthb, Alger (Algérie)	Co-Directeur de thèse
Millet, Séverine	Docteure, UCBL Lyon1	Co-encadrante de thèse

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



THÈSE DE DOCTORAT  
PRÉPARÉE EN COTUTELLE  
INTERNATIONALE



**Entre**

**L'UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE HOUARI BOUMEDIENE**  
présentée pour l'obtention du diplôme de DOCTORAT

**En : Physique**

**Spécialité : Energétique et Mécanique des Fluides**

**et**

**L'UNIVERSITÉ DE LYON**

opérée au sein de

**L'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES DE LYON**

présentée pour l'obtention du diplôme de DOCTORAT de l'Université de Lyon

Ecole Doctorale N° 162 Mécanique, Energétique, Génie Civil et Acoustique

**Spécialité : Mécanique des Fluides**

**Par : HAMZAOUI Idir**

**EFFET DE LA CONVECTION NATURELLE ET FORCÉE LORS DES  
TRANSITIONS DE PHASE : APPLICATION À LA CROISSANCE  
CRISTALLINE**

Soutenue publiquement, le 19/12/2019 devant le jury composé de :

M. A. BOUABDALLAH	Professeur à l'USTHB	Président
M. A. BENZAOUÏ	Professeur à l'USTHB	Directeur de thèse
M. V. BOTTON	Professeur à l'INSA de Lyon	Directeur de thèse
M. S. KADDECHE	Professeur à l'INSAT Tunis	Examinateur
Mme. A. FOURNIER	DR CNRS à l'INP Grenoble	Examinatrice
M. L. HACHANI	M. C. A. à l'UAT Laghouat	Examinateur
Mme. S. MILLET	M. C. B. à l'UCB Lyon 1	Invitée

## Département FEDORA – INSA Lyon - Ecoles Doctorales – Quinquennal 2016-2020

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
<b>CHIMIE</b>	<b><u>CHIMIE DE LYON</u></b> <a href="http://www.edchimie-lyon.fr">http://www.edchimie-lyon.fr</a> Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage <a href="mailto:secretariat@edchimie-lyon.fr">secretariat@edchimie-lyon.fr</a> INSA : R. GOURDON	<b>M. Stéphane DANIELE</b> Institut de recherches sur la catalyse et l'environnement de Lyon IRCELYON-UMR 5256 Équipe CDFA 2 Avenue Albert EINSTEIN 69 626 Villeurbanne CEDEX <a href="mailto:directeur@edchimie-lyon.fr">directeur@edchimie-lyon.fr</a>
<b>E.E.A.</b>	<b><u>ÉLECTRONIQUE,</u></b> <b><u>ÉLECTROTECHNIQUE,</u></b> <b><u>AUTOMATIQUE</u></b>  <a href="http://edeea.ec-lyon.fr">http://edeea.ec-lyon.fr</a> Sec. : M.C. HAVGOUDOUKIAN <a href="mailto:ecole-doctorale.eea@ec-lyon.fr">ecole-doctorale.eea@ec-lyon.fr</a>	<b>M. Gérard SCORLETTI</b> École Centrale de Lyon 36 Avenue Guy DE COLLONGUE 69 134 Écully Tél : 04.72.18.60.97 Fax 04.78.43.37.17 <a href="mailto:gerard.scorletti@ec-lyon.fr">gerard.scorletti@ec-lyon.fr</a>
<b>E2M2</b>	<b><u>ÉVOLUTION, ÉCOSYSTÈME,</u></b> <b><u>MICROBIOLOGIE, MODÉLISATION</u></b>  <a href="http://e2m2.universite-lyon.fr">http://e2m2.universite-lyon.fr</a> Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : H. CHARLES <a href="mailto:secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr">secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr</a>	<b>M. Philippe NORMAND</b> UMR 5557 Lab. d'Ecologie Microbienne Université Claude Bernard Lyon 1 Bâtiment Mendel 43, boulevard du 11 Novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX <a href="mailto:philippe.normand@univ-lyon1.fr">philippe.normand@univ-lyon1.fr</a>
<b>EDISS</b>	<b><u>INTERDISCIPLINAIRE</u></b> <b><u>SCIENCES-SANTÉ</u></b>  <a href="http://www.ediss-lyon.fr">http://www.ediss-lyon.fr</a> Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : M. LAGARDE <a href="mailto:secretariat.ediss@univ-lyon1.fr">secretariat.ediss@univ-lyon1.fr</a>	<b>Mme Sylvie RICARD-BLUM</b> Institut de Chimie et Biochimie Moléculaires et Supramoléculaires (ICBMS) - UMR 5246 CNRS - Université Lyon 1 Bâtiment Curien - 3ème étage Nord 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69622 Villeurbanne Cedex Tel : +33(0)4 72 44 82 32 <a href="mailto:sylvie.ricard-blum@univ-lyon1.fr">sylvie.ricard-blum@univ-lyon1.fr</a>
<b>INFOMATHS</b>	<b><u>INFORMATIQUE ET</u></b> <b><u>MATHÉMATIQUES</u></b>  <a href="http://edinfomaths.universite-lyon.fr">http://edinfomaths.universite-lyon.fr</a> Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage Tél : 04.72.43.80.46 <a href="mailto:infomaths@univ-lyon1.fr">infomaths@univ-lyon1.fr</a>	<b>M. Hamamache KHEDDOUCI</b> Bât. Nautibus 43, Boulevard du 11 novembre 1918 69 622 Villeurbanne Cedex France Tel : 04.72.44.83.69 <a href="mailto:hamamache.kheddouci@univ-lyon1.fr">hamamache.kheddouci@univ-lyon1.fr</a>
<b>Matériaux</b>	<b><u>MATÉRIAUX DE LYON</u></b>  <a href="http://ed34.universite-lyon.fr">http://ed34.universite-lyon.fr</a> Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction <a href="mailto:ed.materiaux@insa-lyon.fr">ed.materiaux@insa-lyon.fr</a>	<b>M. Jean-Yves BUFFIÈRE</b> INSA de Lyon MATEIS - Bât. Saint-Exupéry 7 Avenue Jean CAPELLE 69 621 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.85.28 <a href="mailto:jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr">jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr</a>
<b>MEGA</b>	<b><u>MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE,</u></b> <b><u>GÉNIE CIVIL, ACOUSTIQUE</u></b>  <a href="http://edmega.universite-lyon.fr">http://edmega.universite-lyon.fr</a> Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction <a href="mailto:mega@insa-lyon.fr">mega@insa-lyon.fr</a>	<b>M. Jocelyn BONJOUR</b> INSA de Lyon Laboratoire CETHIL Bâtiment Sadi-Carnot 9, rue de la Physique 69 621 Villeurbanne CEDEX <a href="mailto:jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr">jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr</a>
<b>ScSo</b>	<b><u>ScSo*</u></b>  <a href="http://ed483.univ-lyon2.fr">http://ed483.univ-lyon2.fr</a> Sec. : Véronique GUICHARD INSA : J.Y. TOUSSAINT Tél : 04.78.69.72.76 <a href="mailto:veronique.cervantes@univ-lyon2.fr">veronique.cervantes@univ-lyon2.fr</a>	<b>M. Christian MONTES</b> Université Lyon 2 86 Rue Pasteur 69 365 Lyon CEDEX 07 <a href="mailto:christian.montes@univ-lyon2.fr">christian.montes@univ-lyon2.fr</a>



"An approximate answer to the right problem is worth a good deal more than an exact answer to an approximate problem."

John Tukey



# Remerciements

Ce travail n'aurait pas pu se faire sans l'aide et le soutien de certaines personnes et organismes. Je me réserve ici quelques lignes pour les en remercier.

Mes remerciements s'adressent tout d'abord à mes directeurs de thèse Ahmed BEN-ZAOUI et Valéry BOTTON, ainsi qu'à ma co-encadrante Severine MILLET. Leurs encouragements ainsi que leur disponibilité ont été très précieux.

Je tiens aussi à remercier Ahcène BOUABDALLAH pour avoir accepté de présider mon jury de thèse, Annie FOURNIER-GAGNOUD et Slim KADDECHE pour avoir été les rapporteurs de ce travail et Lakhdar HACHANI pour avoir bien voulu l'examiner. L'intérêt qu'ils ont manifesté envers mes travaux de thèse ainsi que les échanges qu'on a eu sont grandement appréciés.

Je remercie également Redouane BOUSSAA sans qui ma cotutelle n'aurait pas pu être possible. Tu m'a transmis les tourments d'Afrodite et tu m'a bien mis sur les rails, je t'en remercie Red1.

Je ne peux continuer ces remerciements sans exprimer ma reconnaissance et ma profonde gratitude à Daniel HENRY à qui je dois beaucoup tant sur l'aspect scientifique que humain. Beaucoup des avancées de ce travail se sont faites avec ou grâce à lui. La bienveillance et l'enthousiasme inconditionnels dont il a fait preuve durant ces trois années de PHC ainsi que ces immenses efforts ont rendu cette aventure autant réussie qu'agréable.

Je tiens aussi à remercier Virgile, Djibrilla, Simon et Sophie pour toutes les discussions hebdomadaires et leurs conseils.

Ces années de thèse ont été passionnantes et enrichissantes grâce à toutes les personnes rencontrées au sein du LTSE et du LMFA. Je tiens à remercier mes compagnons de route et amis Nouhayla et Abdessamed et l'ensemble des doctorants des deux laboratoires, tous débordant d'amicalité et de sympathie. Je remercie aussi très particulièrement Nadira MATAR qui nous a tant aidé au LMFA. Pour tous les bons moments partagés mais aussi les gâteaux, *Tanmirt-nwen!*

Merci aussi à tous mes amis ainsi que ceux que j'aurais pu oublier ici ou dont le nom n'est pas spécifiquement mentionné.

Je remercie les institutions et les organismes qui ont soutenu financièrement ce travail de thèse, en particulier le *MESRS* et *Campus France* via le projet *PHC Maghreb* et le programme de bourse *Profas b<sup>+</sup>*.

Enfin, à mes chers parents, mon frère et mes sœurs, pour leur soutien constant et inconditionnel, pour leurs encouragements et leur confiance, pour tout leur amour, mil et un merci.





# Résumé

L'influence de la convection naturelle lors du changement de phase solide-liquide est traitée dans ce travail de thèse. La configuration géométrique considérée tout au long de cette étude a été choisie de manière à correspondre au creuset du montage expérimental de référence 'Afrodite'. Différents modèles numériques (3D, 2D et  $2D^{1/2}$ ) ont été proposés pour traiter des cas de convection naturelle, de changement de phase solide-liquide de corps pur et de solidification avec ségrégation d'alliages métalliques. L'incapacité des modèles 2D classiques, qui ne prennent pas en considération la dissipation visqueuse induite par les parois latérales du creuset, à prédire des résultats fiables est mise en évidence. Les modèles  $2D^{1/2}$  sont obtenus en moyennant les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse et de la chaleur sur la direction transverse  $x_3$ . Lors de cette moyennation, des profils de vitesse transverse ajustables via un paramètre  $\delta$  sont supposés. Un domaine de validité, consistant en une gamme de variation des paramètres de contrôle, où ces modèles sont applicables est rigoureusement défini. Les valeurs optimales de  $\delta$ , pour lesquelles les modèles  $2D^{1/2}$  peuvent se substituer aux modèles 3D à la fois pour les cas de convection naturelle (intensité de l'écoulement et champs de température) et pour les cas de changement de phase solide-liquide de corps purs (forme et évolution du front solide-liquide), sont données sous forme d'une relation empirique. L'approche multi-domaines, utilisée pour les cas de changement de phase solide-liquide de corps purs, et l'approche enthalpique couplée à un modèle de micro-ségrégation, utilisée pour les cas de solidification d'alliages métalliques binaires, sont détaillées. Des comparaisons entre les résultats  $2D^{1/2}$  et les résultats expérimentaux obtenus avec l'installation 'Afrodite' lors de la formation de lingots d'étain pur et d'alliage étain-plomb sont effectuées. Une attention particulière a été consacrée à la définition de conditions aux limites représentatives des expériences. Un bon accord est trouvé entre les résultats numériques et expérimentaux.

## Mots clés

Modèles  $2D^{1/2}$  ; convection naturelle, changement de phase solide-liquide, ségrégation, maillage dynamique, méthode enthalpique, méthode multi-domaine, cavité confinée.

# Abstract

This work concerns the influence of natural convection during solid-liquid phase change. The geometrical configuration considered throughout this study was chosen to correspond to the crucible of the 'Afrodite' benchmark experiment. Various numerical models (3D, 2D and  $2D^{1/2}$ ) have been proposed to study cases of natural convection, pure materials solid-liquid phase change and solidification of metallic alloys involving segregation phenomena. The classical 2D models, which do not take into account the viscous dissipation induced by the side walls of the crucible, are shown to be unable to predict reliable results. The proposed  $2D^{1/2}$  models are obtained by averaging momentum, energy and heat conservation equations along the short transverse direction, assuming adjustable transverse velocity profiles depending on a parameter  $\delta$ . A validity domain where these models are applicable is rigorously defined in terms of ranges of variation of the control parameters. An empirical expression is also proposed for the  $\delta$  values, for which the  $2D^{1/2}$  models can accurately replace the 3D models for both natural convection problems (flow intensity and temperature fields) and pure materials solid-liquid phase change cases (form and evolution of the liquid solid-liquid front). The multi-domain approach, used for pure materials solid-liquid phase change cases, and the enthalpy approach coupled with a segregation model, used for binary metallic alloys solidification cases, are detailed. A comparison between the numerical results, obtained with the  $2D^{1/2}$  model, and the experimental results obtained with the 'Afrodite' benchmark, for the solidification of both pure tin and tin-lead ingots, is carried out. Special care has been devoted to the definition of the boundary conditions that are representative of the experiments. A good agreement is finally found between the numerical and experimental results.

## Key words

$2D^{1/2}$  models ; natural convection ; solid-liquid phase change ; segregation ; dynamic mesh ; enthalpic method ; multi-domain method ; confined cavity.



# Table des Matières

<b>Résumé</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>Table des Matières</b>	<b>x</b>
<b>Liste des Figures</b>	<b>xiii</b>
<b>Liste des Tableaux</b>	<b>xxi</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>xxii</b>
<b>Introduction Générale &amp; Contexte</b>	<b>1</b>
<b>I État de l'Art</b>	<b>5</b>
I.1 Introduction . . . . .	5
I.2 Changement de phase solide-liquide de corps purs . . . . .	6
I.2.1 Généralités sur la solidification de corps purs . . . . .	6
I.2.2 Modélisation numérique du changement de phase solide-liquide de corps purs . . . . .	7
I.2.2.1 L'approche enthalpique . . . . .	10
I.2.2.1.1 Prise en compte de la chaleur latente . . . . .	10
I.2.2.1.1.1 Formulation <i>enthalpique</i> . . . . .	11
I.2.2.1.1.2 Formulation <i>h-source</i> . . . . .	11
I.2.2.1.1.3 Formulation de la <i>Capacité apparente</i> . . . . .	12
I.2.2.1.2 Freinage de la phase solide . . . . .	12
I.2.2.1.2.1 <i>La méthode de Darcy</i> . . . . .	13
I.2.2.1.2.2 <i>La méthode de la viscosité variable</i> . . . . .	14
I.2.2.1.2.3 <i>La technique switch-off</i> . . . . .	15
I.2.2.2 L'approche multi-domaines . . . . .	15
I.3 Solidification des alliages binaires . . . . .	17
I.3.1 Généralités sur la solidification des alliages binaires . . . . .	17
I.3.2 Diagramme des phases, coefficient de partage et ségrégation . . . . .	18
I.3.3 Modélisation de la ségrégation des éléments d'alliage lors de la solidification . . . . .	22
I.3.3.1 Modélisation de la micro-ségrégation . . . . .	23

I.3.3.2	Modélisation de la macro-ségrégation . . . . .	25
I.4	Étude expérimentale de la solidification . . . . .	26
I.4.1	Montage expérimental 'Afrodite' . . . . .	27
I.5	conclusion . . . . .	34
<b>II</b>	<b>Les Modèles 2D<sup>1/2</sup> pour la Convection Naturelle</b>	<b>37</b>
II.1	Introduction . . . . .	37
II.2	Présentation du modèle général 3D . . . . .	38
II.2.1	Configuration géométrique étudiée . . . . .	38
II.2.2	Équations générales du modèle 3D . . . . .	38
II.3	Les modèles 2D et leurs limitations . . . . .	40
II.4	Les modèles 2D <sup>1/2</sup> . . . . .	42
II.5	Ajustement du paramètre $\delta$ dans le modèle 2D <sub>H</sub> <sup>1/2</sup> . . . . .	45
II.6	Domaine de validité des modèles 2D <sup>1/2</sup> . . . . .	51
II.7	Résultats et discussion . . . . .	54
II.8	Conclusion . . . . .	59
<b>III</b>	<b>Étude du changement de phase solide-liquide</b>	<b>61</b>
III.1	Cas d'équilibre de phases solide-liquide . . . . .	62
III.1.1	Géométrie et matériau considérés . . . . .	62
III.1.2	Mise en équation du problème . . . . .	62
III.1.2.1	Écriture du terme source $S_i^*$ sous forme dimensionnelle . . . . .	64
III.1.2.2	Calcul de $\delta_{optimal}^*$ dans le modèle 2D <sub>H</sub> <sup>1/2</sup> . . . . .	64
III.1.3	Implémentation sous Comsol avec un maillage déformable . . . . .	66
III.1.4	Résultats et discussions . . . . .	68
III.2	Processus de solidification . . . . .	75
III.2.1	Processus expérimental avec 'Afrodite' . . . . .	75
III.2.2	Détermination des conditions aux limites thermiques . . . . .	76
III.2.3	Maillage utilisé . . . . .	78
III.2.4	Résultats et discussion . . . . .	80
III.3	Conclusion . . . . .	84
<b>IV</b>	<b>Simulation de la Solidification d'Alliages Binaires</b>	<b>87</b>
IV.1	Modèle 1D diffusif avec ségrégation . . . . .	88
IV.1.1	Présentation de la problématique traitée et des résultats de référence . . . . .	89
IV.1.1.1	Configuration géométrique . . . . .	89
IV.1.1.2	Équations résolues . . . . .	90
IV.1.1.3	Résultats de référence . . . . .	92
IV.1.2	Modélisation du problème avec une approche enthalpique . . . . .	92
IV.1.3	Résolution numérique du problème . . . . .	94
IV.1.3.1	Premiers résultats . . . . .	95
IV.1.3.2	Traitement apporté à la résolution . . . . .	95
IV.1.4	Résultats, discussions . . . . .	96
IV.1.4.1	Résultats de validation . . . . .	97
IV.1.4.2	Approfondissement et discussion . . . . .	99

## TABLE DES MATIÈRES

---

IV.1.4.3	Influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase solide-liquide . . . . .	101
IV.2	Modèle 2D convectif de solidification avec ségrégation . . . . .	106
IV.2.1	Présentation de la problématique traitée . . . . .	106
IV.2.2	Modèle de solidification avec macro-ségrégation . . . . .	107
IV.2.2.1	Équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement . . . . .	107
IV.2.2.2	Équation de conservation de l'énergie . . . . .	108
IV.2.2.3	Équation de conservation des espèces . . . . .	109
IV.2.3	Résolution numérique . . . . .	110
IV.2.4	Résultats et discussion . . . . .	111
IV.3	Conclusion . . . . .	119
	<b>Conclusion générale &amp; Perspective</b>	<b>122</b>
	<b>Références Bibliographiques</b>	<b>126</b>

# Liste des Figures

I.1	Évolutions typiques de la température d'un matériau pur lors de sa solidification (en l'absence et présence de surfusion du liquide). $T_f$ est la température de fusion. . . . .	6
I.2	Représentation schématique d'un processus de solidification dirigée horizontale dans une cavité différentiellement chauffée (issue de [47]). . . . .	16
I.3	Évolution typique de la température d'un alliage binaire (dont la composition est tout le temps différente de la composition eutectique) lors de sa solidification. $T_{liq}^*$ et $T_{sol}^*$ sont, respectivement, les températures de liquidus et de solidus. . . . .	18
I.4	Diagramme de phase typique d'un alliage binaire A-B en lignes noires. Les deux droites rouge et bleue donnent sa linéarisation théorique dans l'hypothèse d'un alliage faiblement concentré. $T_{f,A}^*$ et $T_{f,B}^*$ sont respectivement les températures de fusion des corps purs A et B. $P_E$ est le point eutectique défini par la température eutectique $T_E^*$ et la composition eutectique $c_E^*$ . . . . .	19
I.5	Diagramme de phase d'un alliage binaire simplifié pour le cas d'un alliage fortement dilué. Pour un alliage de composition $c_0^*$ , la solidification commence à la température de liquidus $T_l^*$ et s'achève à la température de solidus $T_s^*$ . À une température intermédiaire donnée, $T$ , inférieure à la température de liquidus $T_l^*$ , deux phases distinctes coexistent : une phase solide à une composition donnée par la droite du solidus et qui vaut $c_s^*(T^*)$ et une phase liquide à une composition donnée par la droite du liquidus et qui vaut $c_l^*(T^*)$ . . . . .	20



I.6	Représentation schématique d'une coupe d'un creuset contenant un alliage métallique au cours d'un processus de solidification en coulée (issue de [52]). (a) : Trois zones distinctes sont définies : la zone entièrement solide (s), la zone pâteuse où le liquide et le solide coexistent (l+s) et enfin la zone entièrement liquide (l). (b) : Les premières parties solides à se former sont celles en contact direct avec les parois refroidies du creuset, c'est la zone de peau. Elle est constituée de petits grains sans orientation définie et n'a que quelques millimètres d'épaisseur. Au dessus d'une certaine épaisseur, ces grains continuent à se former au sein du bain fondu en suivant la direction du gradient de température (direction normale aux parois du creuset) et forment la zone colonnaire. c) Après un certain temps, certains grains colonnaires se détachent et/ou d'autres nouveaux grains se forment plus loin dans le liquide. Ces grains croissent en grains équiaxes, sans direction de solidification particulière, au centre du creuset jusqu'à ce qu'ils bloquent la progression de la zone colonnaire. La transition de la structure colonnaire à la structure équiaxe est connue sous le nom de Transition Colonnaire-Equiaxe (CET). . . . .	22
I.7	Schéma de l'installation expérimentale 'Afrodite I' [87]. . . . .	27
I.8	Schéma de l'installation expérimentale 'Afrodite' [91] avec ses principales parties. 1,5 : échangeur de chaleur gauche et droit, 2 : échantillon du matériau étudié, 3 : matrice de thermocouples, 4 : le creuset en acier inoxydable et 6 : moteur linéaire. . . . .	28
I.9	Schéma du benchmark expérimental avec le creuset (gris clair) au milieu et les positions ainsi que l'espacement entre les cinquante thermocouples de la face latérale du creuset (points oranges). Les deux échangeurs de chaleur latéraux (gris foncé) contiennent chacun neuf thermocouples additionnels avec un positionnement spécifique (points bleus). . . . .	30
I.10	Résultats expérimentaux de la solidification de l'étain pur (Sn) avec $\Delta T^* = 0$ K et $C_r^* = -0.03$ K/s. (a) champ de température au sein de l'échantillon avec les vecteurs proportionnels à la densité du flux thermique à un instant donné du processus de solidification. (b) évolution temporelle de la température sur quelques thermocouples pendant toute la durée du processus de solidification [88]. . . . .	30
I.11	Champs expérimentaux de température au sein de la cavité à quatre instants successifs durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3wt.%Pb. $\Delta T^* = 40$ K et $C_r^* = -0.03$ K/s. La température des colorbars est en degrés Celsius et les vecteurs noirs sont proportionnels aux flux thermiques [88]. . . . .	31
I.12	Macrostructures observées sur les faces latérales des lingots de l'alliage Sn-3wt.%Pb obtenus avec les taux de refroidissement suivants : (a) $-0.03$ K/s, (b) $-0.02$ K/s et (c) $-0.04$ K/s [88]. . . . .	32
I.13	(a) : Photo du lingot carotté aux mêmes emplacements que ceux des thermocouples. (b) : Champ de concentration final du lingot de Sn-3wt.%Pb obtenu après analyse <i>post-mortem</i> [88, 101]. . . . .	33
I.14	Radiographie X (a) et son traitement d'image (b) du lingot de l'alliage Sn-10wt.%Pb obtenu en appliquant une différence de température $\Delta T^* = 40$ K et un taux de refroidissement $C_r^* = -0.04$ K/s [88]. . . . .	33

II.1	Configuration géométrique étudiée : Cavité parallélépipédique différentiellement chauffée où les parois d'extrémité verticales à droite et à gauche sont maintenues à des températures constantes, $T_c^*$ et $T_h^*$ respectivement. Les autres parois sont adiabatiques. Les plans caractéristiques sont le plan de coupe vertical central (vert) et un plan de coupe horizontal (noir hachuré). . . . .	39
II.2	Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes) pour $Pr = 10^{-2}$ et $Gr = 10^7$ obtenus avec : (a) modèle 3D moyenné suivant la direction $x_3$ et (b) modèle 2D. La solution obtenue avec le modèle 3D est stationnaire alors que la solution 2D ne l'est pas. . . . .	40
II.3	Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes) pour $Pr = 10^{-3}$ et $Gr = 10^7$ obtenus avec : (a) modèle 3D moyenné suivant la direction $x_3$ et (b) modèle 2D. Les deux solutions sont stationnaires. . . . .	41
II.4	Champs de la première composante de vitesse $u_1$ (vecteurs) et de température (isothermes en rouge) obtenus avec le modèle 3D sur le plan de coupe horizontal (voir figure II.1). (a) : $Gr = 10^7$ et $Pr = 0.01$ , (b) : $Gr = 10^7$ et $Pr = 0.001$ . . . . .	42
II.5	Différents profils utilisés pour modéliser les variations de la vitesse le long de la direction transverse. . . . .	43
II.6	Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes noires) pour $Pr = 0.01$ et $Gr = 10^7$ obtenus avec les différents modèles : (a) modèle 3D (moyenné suivant $x_3$ ), (b) modèle 2D (snapshot), (c) modèle $2D_H^{1/2}$ avec un profil de vitesse transverse de type Hartmann et (d) modèle $2D_P^{1/2}$ avec un profil de Poiseuille pour la vitesse transverse. Les solutions obtenues avec les modèles 3D, $2D_H^{1/2}$ et $2D_P^{1/2}$ sont stationnaires, alors que la solution 2D ne l'est pas. . . . .	46
II.7	Contours de l'erreur relative en température $\Delta$ entre les champs de température obtenus avec les différents modèles 2D considérés et le champ de température 3D moyenné sur $x_3$ pour le cas $Pr = 0.01$ et $Gr = 10^7$ . . . . .	47
II.8	Erreurs relatives maximales en température $\Delta_{max}$ des différents modèles comparés au champ de température 3D sur le plan de coupe central pour $Pr = 0.01$ et $Gr = 10^6$ . Courbe bleue : variation de $\Delta_{max}$ avec la variation du paramètre $\delta$ pour le modèle $2D_H^{1/2}$ ; ligne orange : $\Delta_{max}$ pour le modèle $2D_P^{1/2}$ ; ligne noire : $\Delta_{max}$ pour le modèle 2D. . . . .	48
II.9	Erreurs relatives maximales en température $\Delta_{max}$ des différents modèles comparés au champ de température 3D sur le plan de coupe central pour $Pr = 0.004$ et $Gr = 10^7$ . Courbe bleue : variation de $\Delta_{max}$ avec la variation du paramètre $\delta$ pour le modèle $2D_H^{1/2}$ ; ligne orange : $\Delta_{max}$ pour le modèle $2D_P^{1/2}$ ; ligne noire : $\Delta_{max}$ pour le modèle 2D. . . . .	48
II.10	Profils de température le long de $x_1$ à mi-hauteur de la cavité ( $x_2 = 0.5$ ), obtenus avec les différents modèles étudiés. . . . .	49

II.11 Les profils utilisés lors de l’approche  $2D^{1/2}$  pour modéliser les variations de vitesse le long de la direction transverse  $x_3$  : Le profil parabolique de Poiseuille utilisé dans le modèle  $2D_P^{1/2}$  et les profils de type Hartmann (dépendant de la valeur de  $\delta$ ) utilisés dans le modèle  $2D_H^{1/2}$ . (a) Vue générale des profils ; (b) zoom pour de plus grandes valeurs de  $\delta$ . . . . . 50

II.12 Vue qualitative des contours de température transverses obtenus avec le modèle 3D sur le plan de coupe horizontal à  $x_2 = 0.2$  (voir [figure II.1](#)) pour  $Pr = 0.01$  et différents nombres de Grashof. Pour chaque nombre de Grashof, la flèche maximale  $C$  des isothermes le long de la direction  $x_3$  est donnée. 52

II.13 (a) Variations de  $C$  (la flèche maximale des isothermes 3D suivant  $x_3$ ) en fonction du nombre de Grashof  $Gr$  pour différents nombres de Prandtl de  $Pr = 0.001$  à  $Pr = 10$ . La ligne noire en gras représente le seuil de tolérance choisi pour la flèche  $C$ . (b) points limites dans l’espace de paramètres  $(Pr, Gr)$  pour la validité des modèles  $2D^{1/2}$ . Ces points sont extraits de (a) et correspondent, pour chaque valeur de  $Pr$ , au dernier point en dessous du seuil de tolérance. Ligne rouge : limite de validité approchée dans le plan  $(Gr, Pr)$ . . . . . 53

II.14 Erreur relative maximale en température  $\Delta_{max}$  (donnée par l’[Équation II.17](#)) obtenue avec les modèles 2D (courbe noire),  $2D_P^{1/2}$  (courbe rouge) et  $2D_H^{1/2}$  (courbe verte) en fonction du nombre de Grashof pour  $Pr = 0.01$ . . . . . 55

II.15 Erreur relative maximale en température  $\Delta_{max}$  (donnée par l’[Équation II.17](#)) obtenue avec les modèles 2D (courbe noire),  $2D_P^{1/2}$  (courbe rouge) et  $2D_H^{1/2}$  (courbe verte) en fonction du nombre de Grashof pour  $Pr = 0.001$ . . . . . 55

II.16 Contours de  $\Delta_{max}$  obtenus avec les modèles étudiés et présentés dans le plan  $(Gr, Pr)$ , restreint à la région de validité des approches  $2D^{1/2}$ . Les points noirs dans (a), (b) et (c) représentent les cas  $(Gr, Pr)$  étudiés. La ligne noire en gras représente la limite de validité des modèles  $2D^{1/2}$ , et les lignes noires fines correspondent aux exposants de  $\Delta_{max}$  en puissance de 10. (a) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle 2D, (b) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle  $2D_P^{1/2}$ , (c) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle  $2D_H^{1/2}$  et (d) : barre de couleur donnant les valeurs de  $\Delta_{max}$ . . . . . 56

II.17  $\delta_{optimal}$  obtenu pour tous les cas étudiés  $(Gr, Pr)$  comme fonction du nombre de Grashof (points rouges). La présence de plus d’un point pour le même nombre de Grashof est liée aux différents nombres de Prandtl étudiés ; Le fait que ces points soient tous proches d’une unique courbe maîtresse montre la faible influence du nombre de Prandtl. La courbe noire correspondant à ([Équation II.12](#)) donne un bon fit pour tous ces points. . . . . 58

III.1 Maillage 2D utilisé pour l’étude des cas d’équilibre de phase. Le domaine est divisé en deux régions, la région liquide (en rouge) et la région solide (en bleu). (a) : le maillage des modèles 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$  à l’instant initial pour le cas (1). (b) : le maillage en régime établi obtenu pour le cas (1) avec le modèle 2D. . . . . 67

III.2	Champs de vitesse (niveaux d'intensité de couleur et vecteurs) dans la zone de la phase liquide et champs de température (isothermes noires (avec un pas de 1 K)) obtenus avec les différents modèles pour le premier cas, 'cas (1)', d'équilibre de phase. La position et la forme du front solide-liquide correspond à l'isotherme $T^* = T_f^*$ . (a) : modèle 3D (dans le plan de coupe central défini sur la <a href="#">figure II.1</a> ), (b) : modèle 2D, (c) : modèle 3D (résultats moyennés sur l'épaisseur le long de $x_3^*$ ), (d) : modèle $2D_P^{1/2}$ et (e) : modèle $2D_H^{1/2}$ . . . . .	69
III.3	Champs de vitesse (niveaux d'intensité de couleur et vecteurs) dans la zone de la phase liquide et champs de température (isothermes noires (avec un pas de 0.5 K)) obtenus avec les différents modèles pour le second cas, 'cas (2)', d'équilibre de phase. La position et la forme du front solide-liquide correspond à l'isotherme $T^* = T_f^*$ . (a) : modèle 3D (dans le plan de coupe central défini sur la <a href="#">figure II.1</a> ), (b) : modèle 2D, (c) : modèle 3D (résultats moyennés sur l'épaisseur le long de $x_3^*$ ), (d) : modèle $2D_P^{1/2}$ et (e) : modèle $2D_H^{1/2}$ . . . . .	70
III.4	Profils de température à mi-hauteur de la cavité en $x_2^* = 3$ cm obtenus avec les différents modèles (3D, 2D, $2D_P^{1/2}$ et $2D_H^{1/2}$ ) pour les deux cas d'équilibre de phase (1) et (2) considérés. . . . .	72
III.5	Positions du front solide-liquide obtenues par les différents modèles pour les deux cas d'équilibre de phase (1) et (2) considérés. . . . .	72
III.6	Évolution typique de la température à un thermocouple ( $L_{26}$ ) et des températures expérimentales $T_h^*(t)$ et $T_c^*(t)$ estimées respectivement aux parois chaude et froide durant le processus de solidification de l'étain pur. Le taux de refroidissement nominal est de -0.03 K/s, $T_f^*$ est la température de fusion. Les courbes de $T_h^*(t)$ et $T_c^*(t)$ sont utilisées comme conditions aux limites lors des simulations numériques. . . . .	77
III.7	Le maillage utilisé dans le modèle $2D_H^{1/2}$ pour la simulation du processus de solidification. (a) Vue du maillage initial à $t = 0$ s dans toute la cavité : Les deux régions solide aux parois gauche et droite sont à peine remarquables. (b) Zoom sur le coin gauche en bas près de $x_1^* = x_2^* = 0$ : La région maillée en bleu montre la couche solide ajoutée tandis que la région maillée en rouge représente la région liquide. . . . .	78
III.8	Deux maillages, l'un avant et l'autre après une opération de remaillage automatique utilisée au cours de la résolution numérique. . . . .	79
III.9	Résultats expérimentaux (à droite) et numériques (à gauche) et obtenues avec le modèle $2D_H^{1/2}$ donnant les positions des fronts solide-liquide à différents instants durant le processus de solidification. Le rectangle noir sur les résultats numériques représente la zone où les données expérimentales de température (obtenues avec la matrice des cinquante thermocouples) sont disponibles. . . . .	81
III.10	Évolution de la température expérimentale et numérique en fonction du temps durant le processus de solidification à mi-hauteur de la cavité aux niveau des positions de quelques thermocouples. L'évolution des températures imposées aux parois chaude et froide, respectivement $T_h^*$ et $T_c^*$ , ainsi que la température de fusion ( $T_f^*$ ) sont aussi représentées. . . . .	82

III.11	Profils expérimentaux et numériques de température à mi-hauteur de la cavité à deux instants différents durant le processus de solidification. . . . .	83
IV.1	(a) : La configuration géométrique, de hauteur finie, étudiée. Á un instant $t$ donné, avant le régime permanent, les trois zones solide (en noir), pâteuse (en gris) et liquide (en blanc) sont présentes. Deux interfaces $a(t)$ et $b(t)$ (représentées en pointillés sur les profils) dépendantes du temps se forment. $a(t)$ sépare les zones solide et pâteuse et $b(t)$ sépare les zone pâteuse et liquide. (b) : Les profils de température (en rouge) et de concentration (en noir) sont donnés en fonction de la hauteur $x$ . La solubilité des impuretés dans le solide étant nulle, la concentration solide $c_s = 0$ . . . . .	90
IV.2	Évolution des positions des interfaces solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ en noir) et zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ en rouge). Les deux interfaces démarrent de zéro en avançant avec des vitesses différentes vers le haut de la cavité. L'interface zone pâteuse-liquide atteint une hauteur maximale, puis revient en arrière jusqu'à rencontrer l'interface solide-zone pâteuse. La zone pâteuse disparaît alors et il ne reste plus que deux zones : solide et liquide. Au delà du point de rencontre des deux interface, la ligne noire donne la position de l'interface solide-liquide. Résultats obtenus par Gewecke <i>et al.</i> [110]. . . . .	92
IV.3	Diagramme de phase de l'alliage binaire étudié, simplifié dans l'hypothèse des faibles concentrations inférieures à la concentration eutectique ( $c_0 < c_E$ ). La température de fusion du matériau pur vaut 273.15 K, la pente du liquidus $m_l = -0.4$ K/wt% et le coefficient de partage $k_p$ est nul. . . . .	94
IV.4	Évolution des positions des limites solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ en noir) et zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ en rouge). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que les premiers résultats de nos calculs sont représentés en lignes continues. Les résultats obtenus avec cette première modélisation ne sont pas cohérents avec les résultats attendus et ceux de référence.	95
IV.5	Évolution des positions des limites zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ ) et solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ ). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que les résultats des calculs améliorés sont représentés en lignes continues. Dans nos calculs, il est plus délicat de cerner l'iso-valeur $g_l = 0$ car des valeurs positives résiduelles subsistent encore de l'ordre de $10^{-10}$ . Pour cela l'iso valeur $g_l = 10^{-2}$ est considérée comme représentative de la limite solide-zone pâteuse. . . . .	97
IV.6	Comparaison entre les concentrations liquides calculées à différents instants au cours de la solidification (lignes vertes) et celles données par la référence [110] (lignes noires pointillées). La concentration initiale $c_0$ vaut 14 wt% (ligne bleue). L'évolution de la position de l'interface liquide-zone pâteuse, <i>i.e.</i> $g_l = 1$ , au cours du temps est donnée par la ligne rouge. . . . .	98

- IV.7 Évolution de la concentration moyennée sur l'ensemble du domaine  $c_{m_D}$  au cours de la solidification. Le pas de temps maximal autorisé au solveur vaut  $\Delta t^* = 40$  min (ce qui correspond à un pas de temps adimensionnel  $\Delta t = 0.0137$ ) pour le cas  $c_{m1_D}$  et  $\Delta t^* = 5$  min ( $\Delta t = 0.0017$ ) pour le cas  $c_{m2_D}$ . La déviation maximale par rapport à la concentration nominale  $c_0$  est obtenue en tout début du processus et est inférieure à 0.006 wt%, donnant alors une erreur relative maximale par rapport à  $c_0$  ne dépassant pas  $4 \cdot 10^{-4}$ . . . . . 98
- IV.8 Profils des variables  $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$  et  $c_l$  le long de la hauteur de la cavité à des instants successifs au cours de la solidification. Les courbes noires continues et vertes en pointillés représentant, respectivement,  $T$  et  $g_l$  sont rattachées au premier axe des abscisses (celui du haut variant de 0 à 1). Les lignes rouges continues et bleues en pointillés correspondent, respectivement, aux profils de  $\langle c \rangle$  et  $c_l$ , et sont rattachées au deuxième axe des abscisses (celui du bas variant de 0 à 40 wt%). À l'instant initial  $t = 0$ ,  $T = 1$  et  $g_l = 1$  le long de la hauteur, les lignes vertes et noires sont superposées. C'est le cas aussi des lignes rouges et bleues qui se superposent dans la zone liquide (là où  $g_l = 1$ ) car  $\langle c \rangle = c_l$ . . . . . 100
- IV.9 Évolutions des positions des limites zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ ) et solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ ). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que nos résultats sont représentés en lignes continues pour le cas  $\Delta H_f = 0$  et en lignes discontinues pour le cas  $\Delta H_f \neq 0$ . L'isovaleur  $g_l = 10^{-2}$  est considérée comme représentative de la limite solide-zone pâteuse. La prise en compte de la chaleur latente, *i.e.*  $\Delta H_f \neq 0$ , influence seulement la première étape de solidification. Un zoom sur l'évolution de ces interfaces lors des premiers instants de la solidification est donc donné. . . . . 103
- IV.10 Établissement de la température  $T(t)$  en deux points distincts à différentes hauteurs de la cavité. En régime établi, la température a un profil linéaire (en adimensionnel,  $T = x$ ). L'établissement de la température prend plus de temps pour le cas  $\Delta H_f \neq 0$  que pour le cas  $\Delta H_f = 0$ . Ce retard est aussi visible sur l'évolution de la position de l'interface zone pâteuse-liquide (qui est donnée aux premiers instants sur la petite figure). La hauteur maximale de cette interface quand  $\Delta H_f \neq 0$  est inférieure aux hauteurs maximales obtenues quand  $\Delta H_f = 0$  et est atteinte avec un retard correspondant à l'établissement de la température. . . . . 104
- IV.11 Comparaison des profils des variables  $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$  et  $c_l$ , obtenus pour les deux cas avec et sans chaleur latente, le long de la hauteur de la cavité à différents instants successifs au cours de la solidification. Les lignes simples correspondent au cas  $\Delta H_f = 0$  et les lignes fines avec des points au cas  $\Delta H_f \neq 0$ . Avant l'établissement total des profils de température ( $t = 0.2$  et  $t = 0.5$ ) : des différences sont notables entre les différents profils correspondants aux deux cas. La position de l'interface  $g_l = 1$  est plus haute pour le cas  $\Delta H_f = 0$ , la concentration  $\langle c \rangle$  dans la zone pâteuse est plus faible. Après l'établissement des profils de température ( $t = 1$  et  $t = 5$ ), les différences entre les différents profils diminuent (ils tendent à se superposer) et un comportement quasi-identique est observé dans leurs évolutions. . . . . 105

IV.12	Évolution du champ de température $T^*$ au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage étain-plomb. Le gradient de température vaut $\Delta T = 20$ K et le taux de refroidissement $Cr = -0.03$ K/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide $g_l$ est représentée en lignes noires. . . . .	112
IV.13	Évolution du champ de vitesse (niveau d'intensité de couleur et vecteurs) au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb. Le gradient de température vaut $\Delta T = 20$ K et le taux de refroidissement $Cr = -0.03$ K/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide $g_l$ est représentée en lignes noires. Le terme de freinage de Darcy est prépondérant dans la zone pâteuse et permet l'annulation des vitesses dès le début de celle-ci au voisinage de $g_l \simeq 0.9$ . . . . .	113
IV.14	Évolution de la distribution moyenne en plomb $\langle c \rangle$ au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb. Le gradient de température vaut $\Delta T = 20$ K et le taux de refroidissement $Cr = -0.03$ k/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide $g_l$ est représentée en lignes noires. Le soluté est rejeté vers la phase liquide au fur et à mesure de la solidification. La cheminée de ségrégation correspondant aux dernières parties liquides solidifiées qui sont les plus enrichies en soluté est retrouvée. Une zone légèrement enrichie est aussi observée en bas du coté de la paroi froide : elle corespond à la localisation des canaux ségrégés, mais ces derniers ne sont pas nettement retrouvés. . . . .	115
IV.15	Comparaison qualitative de la ségrégation finale observée sur le lingot solide. À gauche : contour de la concentration $\langle c \rangle$ avec une échelle de couleur en gris allant de 2.2 à 4.4 wt% ; à droite : radiographie X du lingot solide (issue de [88]). Les zones riches en plomb apparaissent en clair et les zones pauvres sont plus sombres. . . . .	117
IV.16	Comparaison entre les valeurs de la concentration finale en plomb mesurées expérimentalement sur le lingot solidifié et celles obtenues numériquement le long de la ligne $x_2^* = 1$ cm . . . . .	117
IV.17	Évolution de la concentration (calculée avec le modèle) moyennée sur l'ensemble du domaine par rapport à la concentration initiale $c_0$ . L'écart relatif maximal observé en fin de solidification vaut 5.55 %. . . . .	118

# Liste des Tableaux

II.1	Évolution des variables $a$ et $b$ dans $S_i$ (donné par l'Équation II.11)) avec l'augmentation de $\delta$ dans le modèle $2D_H^{1/2}$ et comparées avec les valeurs constantes dans le modèle $2D_P^{1/2}$ . . . . .	51
II.2	Comparaison entre les nombres d'éléments constituant le maillage, les degrés de liberté et les temps de résolution des différents modèles numériques (2D, $2D_H^{1/2}$ et 3D) pour trois différents cas (avec des valeurs différentes des paramètres de contrôle). . . . .	57
III.1	Propriétés physiques utilisées pour modéliser l'étain au voisinage de sa température de fusion $T_f^*$ . La densité $\rho$ est considérée constante entre les deux phases pour assurer la conservation de la masse totale. . . . .	63
III.2	Comparaison entre les nombres d'éléments constituant le maillage, les degrés de liberté et les temps de résolution des différents modèles numériques (2D, $2D_H^{1/2}$ et 3D) pour le premier cas d'équilibre de phases étudié (le cas (1)). . . . .	68
III.3	Comparaison des longueurs liquides $L_l$ estimées, des nombres de Grashof $Gr$ et des paramètres $\delta^*_{optimal}$ , obtenus avec les approches $2D_H^{1/2}$ (diffusive) et $2D_H^{1/2}$ (convecto-diffusive). Les erreurs moyennes et maximales sur les positions des fronts solide-liquide obtenus par les modèles 2D et $2D_H^{1/2}$ par rapport aux positions des fronts obtenus par le modèle 3D sont données pour les deux cas considérés. <sup>(1)</sup> fait référence au cas (1), et <sup>(2)</sup> fait référence au cas (2). . . . .	74
IV.1	Propriétés physiques caractéristiques du cas étudié [111] . . . . .	94
IV.2	Propriétés physiques utilisées pour modéliser l'alliage Sn-3 wt%Pb. [76]. . . . .	111



# Nomenclature

## Nombres et grandeurs adimensionnels

$A_l$	Rapport d'aspect dans la direction $x_1$
$A_w$	Rapport d'aspect dans la direction $x_3$
$Gr$	Nombre de Grashof
$Le$	Nombre de Lewis
$Nu$	Nombre de Nusselt
$Pr$	Nombre de Prandtl
$Ra$	Nombre de Rayleigh
$Ste$	Nombre de Stefan
$\epsilon_0$	Porosité
$g_l/g_s$	fraction liquide/solide
$k_p$	coefficient de partage
$C$	flèche maximale des contours de température

## Propriétés thermo-physiques des matériaux

$\alpha$	Diffusivité thermique	$m^2 \cdot s^{-1}$
$\beta_c$	Coefficient d'expansion solutale	$wt\%^{-1}$
$\beta_T$	Coefficient d'expansion thermique	$K^{-1}$
$\rho$	Densité	$kg \cdot m^{-3}$
$k$	Conductivité thermique	$Wm^{-1}K^{-1}$
$\mu$	Viscosité dynamique	$kg \cdot m^{-1} s^{-1}$
$\nu$	Viscosité cinématique	$m^2 s^{-1}$
$\Delta H_f$	Enthalpie de changement de phase	$Jkg^{-1}$
$C_p$	Capacité calorifique massique	$Jkg^{-1}K^{-1}$
$m$	pente du diagramme des phases linéarisé	$K \cdot wt\%^{-1}$

**Variables**

$c$	concentration
$h$	enthalpie
$p$	pression
$T, \theta$	Température
$t$	temps
$\mathbf{u}$	vecteur vitesse
$\mathbf{v}_f$	vitesse du front de solidification
$x$	variable spatiale

**Autres grandeurs physiques**

$\phi$	flux de chaleur	$W$
$g$	accélération de la pesanteur	$m.s^{-2}$
$\epsilon$	petite valeur de température	$K$
$K$	perméabilité de la zone pâteuse	$m^2$
$H$	hauteur	$m$
$L$	longueur	$m$
$W$	largeur	$m$

**Indices**

$app$	apparent	$E$	eutectique
$sen$	sensible	$h$	chaude
$l, liq$	liquide	$c$	froide
$s, sol$	solide	$b$	bas
$f,$	fusion	$P$	Poiseuille
$ref$	référence	$H$	Hartmann
$i$	$i^{\text{ème}}$ composante		

**Exposant**

*	variable dimensionnelle
$n$	$n^{\text{ème}}$ instant
$1/2$	modélisation 2D <sup>1/2</sup>

# Introduction Générale & Contexte

La transition de phase liquide-solide est un phénomène physique intervenant dans plusieurs processus industriels. La maîtrise de ces processus est constamment recherchée afin d'assurer la qualité des matériaux obtenus. Elle est aussi la source d'une course basée sur la recherche et le développement avec d'importants enjeux économiques dans un secteur industriel très concurrentiel et où la constante amélioration des procédés de solidification est vitale pour l'innovation et la survie des acteurs industriels.

À une échelle plus académique, il apparaît clairement que la maîtrise de ces processus passe par la compréhension des phénomènes physiques qui y apparaissent. Ces phénomènes sont aussi variés que complexes. En effet l'étude de la solidification est très multi-physiques et demande la maîtrise de plusieurs disciplines (transferts de chaleur et de masse, dynamique des fluides, cinétique de croissance, équilibres thermodynamique et chimique...). Plusieurs études ont donc été menées et le sont encore pour la compréhension de l'interaction entre ces différents phénomènes et leur impact sur la dynamique de croissance et la qualité des lingots obtenus. Outre les études expérimentales, onéreuses dans la plupart des cas, les études numériques, qui ont connues de grandes avancées, ont pris le pas petit à petit et focalisent une grande partie des efforts de recherche sur ce domaine. Plusieurs approches numériques ont été mises au point. Leur pertinence dépend du degré de complexité considérée.

Les mouvements convectifs apparaissant au sein des zones liquides durant la solidification jouent un rôle prépondérant sur la dynamique de croissance. Cette influence est encore plus marquée pour les alliages métalliques qui, en plus de la convection thermique, sont sujets à la convection solutale en lien avec la ségrégation des éléments d'alliage. Cette ségrégation est souvent la source de grosses hétérogénéités de composition au sein des matériaux obtenus. Selon les procédés, on cherche soit à l'optimiser (comme dans les procédés de purification) ou à la limiter (dans les procédés de moulage par exemple). Sa considération dans les modèles numériques les rend encore davantage multi-échelles. La micro-ségrégation, qui est la source de toutes les ségrégations, se fait à l'échelle du micro-mètre, tandis que les transferts thermiques se font à l'échelle des procédés (celle du four de solidification par exemple allant au mètre). La prise en compte de toutes ces phénoménologies complexifie nettement la résolution numérique. Les modèles numériques semi-analytiques ou semi-empiriques sont constamment recherchés.

Ce travail de thèse a pour but la mise au point de modèles numériques fiables pour la simulation de la solidification de corps purs et d'alliages métalliques dans un four similaire à ceux utilisés en croissance Bridgman horizontale. La géométrie considérée est une cavité parallélépipédique différentiellement chauffée correspondant au creuset du dispositif expérimental 'Afrodite'. Les modèles 3D étant très onéreux en termes de temps et/ou moyens de résolution, un intérêt particulier est porté aux modèles dits 2D<sup>1/2</sup>. Ces modèles ont pour objectifs d'être

adaptés aux études paramétriques, en étant plus fiables que les modèles 2D classiques car ils prennent en compte différents aspects induits par la troisième dimension spatiale de la cavité, tout en gardant une formulation 2D. Différentes approches de modélisation sont développées en fonction du degré de complexité des cas étudiés qui vont de la simple convection naturelle stationnaire à la ségrégation lors de la solidification des alliages métalliques binaires en passant par la solidification de matériaux purs.

Ce travail de thèse fait partie du projet PHC-Maghreb (Partenariat Hubert Curien Maghreb) qui vise à promouvoir la collaboration scientifique entre le Maroc, l'Algérie, la Tunisie et la France autour de thématiques de développement durable. Ce projet est intitulé : 'Modéliser et optimiser le processus de purification du silicium photovoltaïque par solidification dirigée'. Ces travaux sont réalisés dans le cadre d'une cotutelle internationale de thèse entre l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, membre de l'Université de Lyon et l'Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumedienne d'Alger. Cette thèse comporte quatre chapitres :

Le premier chapitre présente l'état de l'art de la modélisation numérique du changement de phase liquide-solide des corps purs et des alliages métalliques. Les différentes approches les plus utilisées sont passées en revue et détaillées. Les notions élémentaires et théoriques, les définitions et les rappels nécessaires à la compréhension de ce travail y sont également inclus. La dernière partie est consacrée à la description du dispositif expérimental 'Afrodite' utilisé comme benchmark pour les modèles numériques développés aux chapitres suivants.

Le second chapitre est consacré à la modélisation de la convection naturelle au sein de la cavité différentiellement chauffée correspondant au creuset du dispositif expérimental 'Afrodite'. Des modèles  $2D^{1/2}$  dérivés de la moyennation des équations 3D sur la petite épaisseur de la cavité sont présentés. Ces modèles sont réglables via un paramètre d'ajustement et présentent l'avantage de prendre en considération les effets dissipatifs induits par les parois latérales, tout en gardant une formulation 2D. La pertinence des hypothèses considérées lors de cette moyennation est vérifiée sur une large gamme des paramètres de contrôle et un domaine de validité des modèles  $2D^{1/2}$  est ensuite dégagé. Enfin, après plusieurs comparaisons entre ces modèles développés et les modèles 3D, une relation empirique, donnant les valeurs optimales du paramètre d'ajustement en fonction des paramètres de contrôle de l'écoulement convectif, est donnée.

Le troisième chapitre traite du changement de phase solide-liquide de corps purs. Deux types de cas y sont étudiés. Dans le premier, les conditions aux limites thermiques appliquées à la cavité sont choisies de sorte à converger vers un état d'équilibre où les deux phases solide et liquide coexistent. Une comparaison est alors faite entre les formes et les positions des interfaces solide-liquide obtenues avec les différents modèles 3D, 2D et  $2D^{1/2}$ . Le second cas est un cas de solidification complète d'un lingot d'étain pur au sein du dispositif expérimental 'Afrodite'. Les résultats prédits par la modélisation  $2D^{1/2}$  sont confrontés aux résultats expérimentaux. La méthode numérique utilisée pour les deux types de cas et qui est basée sur l'approche multi-domaines avec un maillage dynamique y est détaillée.

Le quatrième chapitre est consacré à la modélisation de la ségrégation se produisant lors de la solidification des alliages métalliques binaires avec développement d'une zone pâteuse. Là encore, deux cas sont étudiés. Dans le premier, la solidification est unidimensionnelle et les échanges sont exclusivement diffusifs. Les résultats du modèle numérique alors présenté sont comparés à la résolution analytique. Le second cas, quant à lui, correspond à l'étude

de la solidification d'un lingot de l'alliage étain-plomb (Sn-3 wt%Pb) au sein du dispositif expérimental 'Afrodite'. Durant ce processus, la convection thermosolutale joue un rôle prépondérant. Le modèle de macro-ségrégation basé sur une approche enthalpique uni-domaine y est détaillé et les résultats qu'il prédit sont confrontés aux résultats expérimentaux.

Ce manuscrit de thèse s'achève par une conclusion générale, résumant brièvement les principaux résultats obtenus, et par des perspectives sur l'orientation des prochains travaux éventuels à réaliser.



# Chapitre I

## État de l'Art

### Sommaire

---

<b>I.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>I.2</b>	<b>Changement de phase solide-liquide de corps purs</b>	<b>6</b>
I.2.1	Généralités sur la solidification de corps purs	6
I.2.2	Modélisation numérique du changement de phase solide-liquide de corps purs	7
I.2.2.1	L'approche enthalpique	10
I.2.2.2	L'approche multi-domaines	15
<b>I.3</b>	<b>Solidification des alliages binaires</b>	<b>17</b>
I.3.1	Généralités sur la solidification des alliages binaires	17
I.3.2	Diagramme des phases, coefficient de partage et ségrégation	18
I.3.3	Modélisation de la ségrégation des éléments d'alliage lors de la solidification	22
I.3.3.1	Modélisation de la micro-ségrégation	23
I.3.3.2	Modélisation de la macro-ségrégation	25
<b>I.4</b>	<b>Étude expérimentale de la solidification</b>	<b>26</b>
I.4.1	Montage expérimental 'Afrodite'	27
<b>I.5</b>	<b>conclusion</b>	<b>34</b>

---

### I.1 Introduction

Comme annoncé en introduction générale de ce travail, cette étude a pour but de modéliser le changement de phase solide-liquide de corps purs et d'alliages métalliques binaires. Les modèles qui seront proposés serviront à étudier l'influence des effets convectifs, apparaissant lors des différents processus de solidification traités, sur les différents phénomènes physiques de transfert y intervenant et la dynamique globale du changement de phase solide-liquide. Ce chapitre consiste en une revue bibliographique de synthèse qui a pour objectif de donner les notions élémentaires, les éléments théoriques et la présentation des différentes approches numériques utilisées, sur lesquels la suite de ce travail est basée et qui sont nécessaires à sa

compréhension. Dans un premier temps, on s'intéresse au changement de phase solide-liquide de corps purs. Ensuite, on aborde la solidification des alliages métalliques binaires. Enfin, nous présentons le montage expérimental de référence dont la configuration nous intéresse et qui nous a permis de valider nos modèles.

## I.2 Changement de phase solide-liquide de corps purs

### I.2.1 Généralités sur la solidification de corps purs

La solidification, ou changement de phase solide-liquide, est le passage de l'état liquide de la matière à l'état solide. Quand un corps pur en fusion est refroidi, à pression constante, le changement de phase s'effectue toujours à une température constante qui est la température de fusion. En ce point de fusion, ou de solidification, les deux phases liquide et solide de la matière co-existent. Lors du changement de phase solide-liquide, le point de fusion est généralement défini par la température de fusion uniquement. En effet, contrairement à la température de vaporisation qui dépend fortement de la pression au point d'ébullition, la température de fusion est assez insensible aux variations de pression. Le point de fusion peut être déterminé à partir de la courbe de refroidissement.

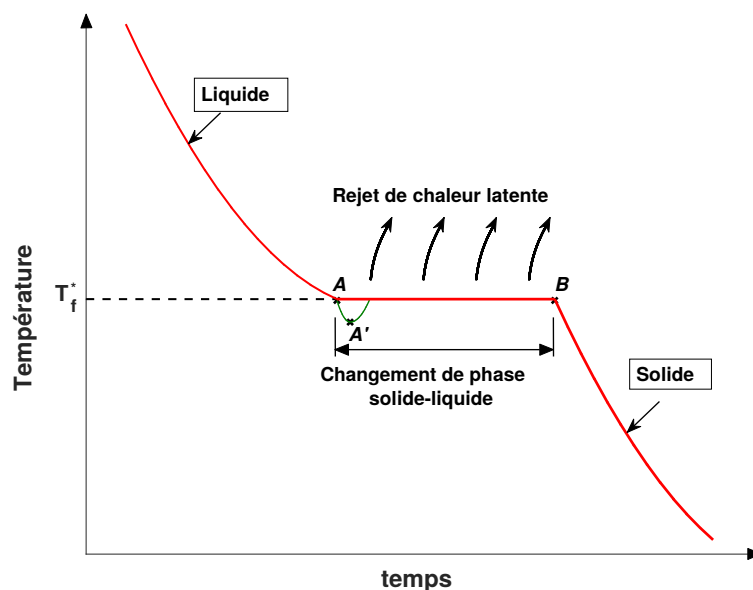


FIGURE I.1 : Évolutions typiques de la température d'un matériau pur lors de sa solidification (en l'absence et présence de surfusion du liquide).  $T_f$  est la température de fusion.

Pour un métal pur initialement à l'état liquide (en fusion), qui est ensuite lentement refroidi au sein d'un creuset jusqu'à sa solidification complète, cette courbe de refroidissement est obtenue en relevant l'évolution au cours du temps de la température en n'importe quel point au sein de ce même creuset. La figure I.1 présente la courbe de refroidissement typique d'un métal. Elle se divise en trois parties distinctes. Dans la première (du début jusqu'au



point A), une décroissance de la température correspondant au refroidissement du métal liquide est observée. Elle se termine à la température de fusion lorsque les premiers germes de cristaux solides se forment. La deuxième partie est le palier isotherme (de A à B) dans lequel la température reste constante et égale à la température de fusion et où les deux phases solide et liquide de la matière co-existent. Au début, les premiers germes solides sont à peine formés ; ces germes croissent ensuite jusqu'à disparition complète de la phase liquide autour du point de mesure ; le métal est alors entièrement solidifié. Ce palier isotherme est d'autant plus large que le refroidissement est lent et que la masse à solidifier est grande. Comme la solidification est un phénomène exothermique, de la chaleur est rejetée le long de ce palier. La troisième partie (au delà du point B) est une décroissance de la température correspondant au refroidissement du métal solide. Les chaleurs extraites lors des deux décroissances de la température (du liquide, puis du solide) sont des chaleurs sensibles, tandis que la chaleur rejetée au cours du palier isotherme est une chaleur latente, c'est la chaleur latente de solidification. Dans cette première évolution typique, la surfusion du liquide est absente. En effet, dans la réalité, le liquide refroidi reste à l'état liquide même en dessous de la température de fusion  $T_f^*$ . Les premiers germes solides stables et suffisamment grands pour croître ne se forment qu'au point A'. Cette surfusion peut être atténuée par la présence d'impuretés, de rugosités aux parois du creuset, ou même d'un brassage. Dès la formation de ces premiers germes stables, la température croît par rejet de chaleur latente et revient à la température de fusion. C'est le phénomène de recalescence. La solidification suit ensuite le même chemin que précédemment.

## I.2.2 Modélisation numérique du changement de phase solide-liquide de corps purs

Lors du changement de phase solide-liquide, dans lequel la matière passe d'un état à un autre, un front séparant ces deux états se développe et se déplace dans la matière au cours du processus. À la limite de ce front, les propriétés de transport varient considérablement d'un état à l'autre, entraînant des taux de transport d'énergie, de masse et de quantité de mouvement tout aussi différents d'une phase à l'autre. La position de ce front ne peut pas être calculée à l'avance, mais doit être déterminée comme une composante essentielle de la solution recherchée. L'expression 'problèmes à interface mobiles' est associée aux problèmes dans lesquels la position de l'interface mobile doit être déterminée en fonction du temps et de l'espace. Ces cas ont été étudiés dès 1831 par *Lame et al.* [1]. La série d'articles de Stefan [2,3] portant sur la fonte de la calotte polaire a fini par donner son nom aux problèmes à interface mobile dits 'problèmes de Stefan'.

Avant l'arrivée des ordinateurs et l'avènement des méthodes numériques, les méthodes analytiques étaient le seul moyen de résolution de ces problèmes physiques. Bien que les méthodes analytiques offrent des solutions exactes et soient mathématiquement élégantes, elles ne sont utilisables, pour les cas de transition de phase solide-liquide, que pour des cas unidimensionnels où le domaine est infini ou semi-infini avec des conditions initiales et aux limites simples et des propriétés physiques constantes [4]. Les problèmes pratiques de solidification et de fusion sont rarement unidimensionnels, les conditions initiales sont toujours plus ou moins complexes, les propriétés thermophysiques peuvent varier d'une phase à l'autre et divers mécanismes de transport (convection et diffusion par exemple) peuvent se produire si-

multanément. Cela rend la résolution analytique impossible, d'autant plus que ces problèmes sont dépendants du temps et non linéaires à cause du fort couplage entre les champs de vitesse et de température. Avec la montée en puissance des ordinateurs, la modélisation mathématique et les simulations numériques sont devenues les outils les plus efficaces pour l'étude et la compréhension de ces problèmes.

Différentes approches et méthodes numériques ont été élaborées et utilisées pour modéliser le changement de phase solide-liquide, des corps purs et des alliages faiblement concentrés, avec chacune ses propres avantages et inconvénients. De par la manière dont est suivie l'interface solide-liquide, comment sont décrites les deux phases et la nature du maillage utilisé, on distingue deux grandes familles d'approches : la première est "l'approche à domaine unique" ou bien "l'approche uni-domaine", et la seconde est "l'approche multi-domaines".

**Les méthodes à domaine unique** : Dans ces méthodes, dites aussi méthodes enthalpiques, les deux phases coexistent au sein du même et unique domaine de calcul. Les fractions volumiques de chaque phase sont introduites afin de les distinguer l'une de l'autre. La transition d'une phase à l'autre n'est plus isotherme mais se fait sur une plage de variation de la température. Cet intervalle de température, qui n'est physiquement justifiable que pour le cas des alliages, est un artefact mathématique pour permettre une transition lisse et continue entre les deux états et donc faciliter la résolution numérique. L'interface solide-liquide séparant les deux phases n'est pas explicitement décrite mais diffuse sur cet intervalle de coexistence des deux phases appelé aussi "zone pâteuse". Ces méthodes, permettent la résolution d'un unique et complet système d'équations aux dérivées partielles sur l'ensemble du domaine étudié. Ce système d'équations peut être obtenu avec deux approches différentes, une approche monophasée (modèle à un fluide) ou une approche multiphasée (modèle à deux fluides).

Dans l'approche multi-phase, la distinction est faite entre les deux phases, qui décrivent deux matériaux différents mais qui coexistent dans un unique domaine de calcul. Chacune de ces phases est modélisée par son propre système d'équations (conservation de l'énergie, Navier-Stokes, transports d'espèces...). Dans l'approche monophasée, le système d'équations est défini, sur l'ensemble du domaine, pour une seule phase équivalente contenant, à proportion de la fraction volumique, les phases solide et liquide. Ces deux phases partagent donc les mêmes champs de vitesse, de pression et de température. Ces modèles sont aussi très utilisés pour l'étude de la solidification des alliages et sont bien détaillés par Bennon *et al.* [5, 7] et Beckermann *et al.* [8–10].

Les différentes manières de prendre en considération le rejet de la chaleur latente de changement de phase ainsi que le forçage des vitesses à être nulles dans le solide sont détaillées dans la section I.2.2.1.

**Les méthodes multi-domaines** : comme indiqué par leur nom, avec ces méthodes, chacune des phases de la matière est associée à son propre domaine de calcul. Elles sont généralement basées sur la formulation complète de Stefan (qui est détaillée dans la section I.2.2.2). Les déplacements du front solide-liquide entraînent la déformation des deux domaines considérés. Les méthodes multi-domaines sont généralement divisées en deux catégories, les méthodes à maillage variable et les méthodes eulériennes.

Dans les méthodes à maillage variable, dites aussi à maillage dynamique ou adaptatif, le maillage est continuellement déformé afin de garder l'interface solide-liquide définie sur une ligne ou une surface de ce même maillage. Le but est aussi d'avoir et de garder un maillage plus raffiné au voisinage du front. Cela est généralement réalisé de deux manières différentes.

Dans la première, le maillage initial est adapté (raffiné) à chaque itération, soit en ajoutant ou en retirant des nœuds. Le nombre de nœuds du maillage change donc à chaque itération. On parle de "h-method" dans la littérature [11, 12]. Dans la seconde approche, le maillage est déplacé avec une certaine vitesse pour suivre l'interface, mais le nombre de nœuds reste inchangé pendant la simulation. Cette vitesse à laquelle est déplacée l'interface peut être celle du fluide (méthode lagrangienne), ou choisie arbitrairement (méthode ALE pour Arbitrary-Lagrangian-Eulerian method). Dans la littérature, on regroupe ces méthodes sous le nom de "r-method" [13, 14].

Dans les méthodes eulériennes, l'interface est soit suivie, soit reconstruite, tout en gardant un maillage fixe. Les méthodes dites de "front tracking" permettent le suivi explicite de l'interface solide-liquide. Cette interface nette sépare les deux phases en deux domaines distincts et leur sert de condition aux limites. Ces déplacements sont obtenus à partir du bilan énergétique. La reconstruction, ou bien le suivi implicite, de l'interface est aussi possible, on parle alors de méthodes de "front capturing". L'interface n'est plus nette, mais est considérée comme diffuse et sa description macroscopique peut inclure des phénomènes microscopiques. Le suivi implicite de l'interface est effectué grâce à une nouvelle équation qui peut être basée sur des considérations physiques ou juste sur une fonction numérique jouant le rôle de marqueur. Dans les méthodes du champ de phase (phase-field methods), une variation rapide mais continue des propriétés est supposée à travers l'interface. L'interface est ensuite déterminée à travers une variable de champ de phase [15–17]. Dans les méthodes volume of fluid (VOF) [18, 19] et Level-Set [20], des fonctions numériques (fonction distance ou fonction couleur) qui varient entre 0 et 1 ou entre -1 et 1 sont utilisées pour reconstruire l'interface qui est décrite comme un niveau ou une iso-valeurs de ces fonctions.

Les grandes lignes, les équations résolues et les formulations des deux principales approches uni-domaine et multi-domaines sont détaillées dans des sections dédiées. Avant cela, il faut mentionner que d'autres approches numériques traitant la solidification existent. Elles se distinguent de ces deux classes de méthodes car dérivant ou se basant sur des approches radicalement différentes. La méthode 'LBM' (Lattice Boltzmann Method), dite aussi méthode de Boltzmann sur réseau, et la méthode sans maillage sont les plus intéressantes.

Dans la méthode LBM, qui se base sur le modèle du 'gaz sur réseau', à la place des équations de Navier-Stokes, l'équation discrète de Boltzmann est résolue pour simuler à une échelle mésoscopique le comportement de fluides. Cette simulation est faite à l'aide d'un schéma de collision-propagation d'un ensemble de quasi-particules dites population. Par l'alternance de ce procédé de collision et de propagation et l'utilisation de méthodes de moyennes statistiques, il est possible de reproduire le comportement macroscopique du fluide [21]. Jiaung *et al.* [22] ont montré la possibilité d'utiliser la méthode LBM pour étudier des problèmes de conduction thermique avec changement de phase en incorporant une formulation enthalpique dans le schéma Lattice Boltzmann. Pour les problèmes de convection-diffusion avec changement de phase, où la résolution est faite à la fois pour le champ de vitesse et le champ de température, soit des méthodes LBM avec double population sont utilisées [23, 24], soit la méthode LBM est couplée à une des approches à domaine unique ou multi-domaines précédemment présentées [25–27].

L'autre approche est la Méthode Sans Maillage [28] pour 'Meshless Method' ou bien 'Meshfree Method'. Cette méthode ne nécessite pas un maillage avec des nœuds reliés entre eux, mais est plutôt basée sur un ensemble de nœuds, arbitrairement distribués et sans aucune

relation topologique les reliant, et représentant le domaine du problème étudié ainsi que ses limites. Différentes méthodes d'interpolation sont utilisées afin de construire l'approximation des fonctions inconnues (champs de variables) sur ces nœuds. Ces fonctions inconnues sont remplacées par leur approximation avec un résidu d'erreurs provenant du système d'équations résolues et de ses conditions aux limites. Enfin, le problème est résolu en minimisant l'intégrale (forme forte) ou l'intégrale de pas (forme faible) de ce résidu, mais pondéré sur l'ensemble du domaine et de ses limites [29]. La classification de ces méthodes sans maillage basée sur la façon dont l'approximation de la fonction inconnue (champ de variable) est construite est donnée par Liu [30]. Cette méthode a été utilisée pour l'étude du changement de phase solide-liquide [31], le suivi de la contrainte thermique lors de la simulation d'un processus de solidification en coulée continue [29] et pour l'étude de la macro-ségrégation d'alliages binaires [32]. La méthode LBM et la méthode sans maillage sont réputées pour avoir un grand potentiel de parallélisation, ce qui est un avantage non négligeable lors de la résolution, mais elles requièrent plus d'efforts de programmation et une maîtrise poussée en méthodes numériques.

### I.2.2.1 L'approche enthalpique

Les méthodes enthalpiques font partie des approches uni-domaine dans lesquelles le même et unique système d'équations est résolu partout dans le domaine contenant à la fois les phases solide et liquide qui sont représentées par un seul fluide. Pour bien prendre en considération le changement de phase, deux ingrédients majeurs sont indispensables. D'abord, le rejet ou l'absorption de la chaleur latente de fusion, notée  $\Delta H_f$ , doit être pris en considération dans l'équation de la conservation de l'énergie. Pour rappel,  $\Delta H_f$  est l'énergie (sous forme de chaleur) rejetée (ou absorbée) par un corps lorsqu'il passe de l'état liquide à l'état solide (ou l'inverse) à température et pression constante. Cela peut être fait de plusieurs manières. Soit en reformulant l'équation de l'énergie en se basant sur l'enthalpie, c'est le cas de *la formulation enthalpique et la méthode h-source* ; soit en gardant l'équation de conservation de l'énergie basée sur la température, mais en modifiant la formulation de la capacité calorifique, c'est le cas de la méthode de la *capacité apparente*. Ensuite, les vitesses à l'intérieur de la phase solide doivent être forcées à être nulles. Là encore, différentes méthodes et formulations sont disponibles : la méthode *switch-off*, la méthode de la *viscosité variable* et la *méthode de Darcy*.

#### I.2.2.1.1 Prise en compte de la chaleur latente

On présente ici les différentes techniques utilisées pour prendre en compte le rejet (ou absorption) de la chaleur latente de changement de phase solide-liquide. Celle-ci peut être incluse de différentes manières dans l'équation de conservation de l'énergie. Dans toutes les formulations de l'équation de l'énergie qui suivent, la dissipation thermique due aux effets visqueux est considérée comme négligeable.

**I.2.2.1.1.1 Formulation enthalpique** Cette formulation consiste à résoudre l'équation de l'énergie écrite sous la forme suivante [33, 34] :

$$\rho \left( \frac{\partial h^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* h^* \right) = \nabla^* \cdot (k \nabla T^*) \quad (\text{I.1})$$

où  $\rho$ ,  $h^*$ ,  $t^*$ ,  $\mathbf{u}^*$ ,  $k$  et  $T^*$  sont, respectivement, la densité, l'enthalpie, le temps, la vitesse, la conductivité thermique et la température. L'enthalpie, qui est ici la somme de l'enthalpie sensible et de la chaleur latente, est entièrement convectée par le champ de vitesse. Elle est exprimée de la manière suivante [35] :

$$h^*(T^*) = \int_{T_{ref}^*}^{T^*} (C_p + \delta_{T_f^*} \Delta H_f) dT^* \quad (\text{I.2})$$

où  $C_p$  est la capacité calorifique et  $\delta_{T_f^*}$  est une distribution de Dirac centrée sur la température de fusion  $T_f^*$ , généralement considérée comme distribuée sur un intervalle de température  $2\epsilon^*$  autour de  $T_f^*$ . La zone pâteuse contenant les deux phases est alors comprise entre la température solide,  $T_{sol}^*$ , et la température liquide,  $T_{liq}^*$ , respectivement définies par  $T_{sol}^* = T_f^* - \epsilon^*$  et  $T_{liq}^* = T_f^* + \epsilon^*$ . En supposant que la fraction liquide,  $g_l$ , varie de manière linéaire de 0 à 1 au sein de la zone pâteuse comprise entre  $T_{sol}^*$  et  $T_{liq}^*$  i.e. :

$$g_l(T) = \frac{T^* - T_{sol}^*}{T_{liq}^* - T_{sol}^*} = \frac{T^* - T_f^* + \epsilon^*}{2\epsilon^*}, \quad (\text{I.3})$$

et que la chaleur latente est rejetée/absorbée de manière linéaire à proportion de  $g_l$ , l'enthalpie est alors exprimée par :

$$h^* = \begin{cases} C_{ps}(T^* - T_{ref}^*) & \text{si } T^* < T_{sol}^*; \\ C_{ps}(T_f^* - T_{ref}^*) + g_l \Delta H_f & \text{si } T_{sol}^* < T^* < T_{liq}^*; \\ C_{ps}(T_f^* - T_{ref}^*) + \Delta H_f + C_{pl}(T^* - T_f^*) & \text{si } T_{liq}^* < T^*, \end{cases}$$

où  $C_{ps}^*$  et  $C_{pl}^*$  sont respectivement les capacités calorifiques des phases solide et liquide.

### I.2.2.1.1.2 Formulation h-source

Dans cette formulation, les deux types d'enthalpie, que sont l'enthalpie sensible  $h_{sen}^*$  et l'enthalpie latente de changement de phase  $h_{lat}^*$  et dont la somme est l'enthalpie totale  $h^*$ , sont exprimées séparément comme suit :

$$h^* = h_{sen}^* + h_{lat}^* = \int_{T_{ref}^*}^{T^*} C_p dT^* + \rho g_l(T^*) \Delta H_f \quad (\text{I.4})$$

Cela permet de reformuler l'équation de conservation de l'énergie, de manière à ne faire

intervenir que la température comme inconnue, sous la forme suivante :

$$\rho C_p \left( \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T^* \right) = \nabla^* \cdot (k \nabla^* T^*) - \rho \Delta H_f \left( \frac{\partial g_l}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* g_l \right) \quad (\text{I.5})$$

Le terme  $\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* g_l$  est négligeable quand la phase solide est supposée être figée ou bien si le changement de phase est considéré isotherme [36]. Des expressions de la fraction liquide  $g_l$ , autres que celle donnée par l' Eq. I.3, ont été proposées. Elles ne sont plus exprimées par parties mais avec des fonctions erreur (*er*) [37] ou par des polynômes [38] ou en loi de puissance [39] et sont continuellement dérivables. Bien qu'elles soient le plus souvent dépourvues de considérations physiques, elles facilitent la résolution de l'Eq. I.5 et améliorent la convergence des schémas numériques.

### I.2.2.1.1.3 Formulation de la *Capacité apparente*

Cette formulation a pour but de garder l'équation de conservation de l'énergie similaire à celle sans changement de phase :

$$C_{p_{app}} \left( \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T^* \right) = \nabla^* \cdot (k \nabla^* T^*) \quad (\text{I.6})$$

Le changement de phase et la chaleur latente sont pris en considération en changeant la définition de la capacité calorifique  $C_p$  qui est maintenant une capacité apparente notée ici  $C_{p_{app}}$ . Elle est définie au sein de la zone pâteuse comme suit [40] :

$$C_{p_{app}} = \frac{\Delta H_f}{T_{liq}^* - T_{sol}^*} + C_{p_s}$$

Une comparaison détaillée entre ces différentes méthodes de prise en considération de la chaleur latente dans les méthodes enthalpiques, accompagnée par leurs différentes implémentations, a été effectuée par Franquet *et al.* [36,41]. L'influence de la discrétisation spatiale et temporelle appliquée avec les différentes approches sur la qualité des résultats prédits y est détaillée. Il en ressort que la formulation *enthalpique* est, en règle générale, la plus précise et robuste. La formulation *h-source* peut donner des résultats au moins aussi précis que la précédente formulation, à condition de bien la paramétrer avec des choix de pas de temps et de tailles de mailles adéquats. La formulation de la *Capacité apparente* est par contre la moins précise, car la conservation de l'énergie totale n'est pas assurée et les champs de température calculés sont approximatifs. Sa précision peut être légèrement améliorée et donner des résultats difficilement acceptables lorsque la zone pâteuse est étalée sur une plage de température  $T_{liq}^* - T_{sol}^*$  assez large, mais cela s'éloigne encore plus des cas de changement de phase quasi-isothermes.

### I.2.2.1.2 Freinage de la phase solide

Avec l'approche uni-domaine, le problème du changement de phase est traité au sein du même et unique domaine où les deux phases solide et liquide sont assimilées à un seul fluide. Or, lors du changement de phase, plus précisément lors du passage du liquide au solide au niveau de l'interface, les vitesses s'annulent. Différentes techniques ont été présentées et uti-

lisées afin de forcer ces vitesses de la phase solide à être nulles. On présente ici les trois principales techniques utilisées dans les modèles de solidification enthalpiques. Avant de les détailler, le système d'équations modélisant la partie hydrodynamique dans ces modèles enthalpiques est présenté. Rappelons que, puisque dans ces modèles la partie solide et la partie liquide sont vues comme étant une seule et unique phase, la modélisation de l'hydrodynamique doit nécessairement inclure un traitement de la partie solide. La phase considérée décrit donc les deux états solide et liquide du matériau. Le système d'EDP est constitué de l'équation de conservation de la masse (Eq. I.7) et des équations de conservation de la quantité de mouvement (Eq. I.8). Pour un fluide newtonien incompressible, avec des propriétés physiques considérées comme constantes entre les deux phases (cela n'est pas une règle générale et une variation de ces propriétés peut être prise en compte), ces équations sont :

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad (\text{I.7})$$

$$\frac{\partial \rho u_i^*}{\partial t^*} + \rho \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* u_i^* = -\frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \mu \nabla^{*2} u_i^* + F_{\text{flottabilité}}^* + F_{\text{freinage}}^*, \quad (\text{I.8})$$

où  $i$  varie de 1 à 2 dans une modélisation 2D et de 1 à 3 dans une modélisation 3D ; et où  $u^*$ ,  $t^*$ ,  $p^*$ ,  $\rho$  et  $\mu$  sont respectivement la vitesse, le temps, la pression, la densité et la viscosité dynamique.

La densité  $\rho$  est considérée comme constante, l'approximation de Boussinesq est utilisée pour prendre en compte ses variations dans le terme de flottabilité. Ce terme induisant les écoulements convectifs est exprimé comme suit :

$$F_{\text{flottabilité}}^* = \rho(T^*)g\delta_{i,2} = \rho g \beta_T (T^* - T_f^*) \delta_{i,2}$$

où  $g$ ,  $T^*$ ,  $\beta_T$  et  $T_f^*$  sont respectivement la force de gravité, la température, le coefficient d'expansion thermique et la température de fusion. Ce terme de flottabilité n'intervient que suivant la direction verticale  $x_2^*$  portant la gravité, d'où  $\delta_{i,2}$  qui est le symbole de Kronecker. Le terme  $F_{\text{freinage}}^*$  est utilisé pour induire un fort amortissement lorsque la fraction liquide  $g_l$  tend vers zéro (dans la phase solide) et doit être nul lorsque celle-ci vaut 1 (dans la phase liquide). Plusieurs façons d'exprimer ce terme existent, elles sont détaillées ci-dessous.

#### 1.2.2.1.2.1 La méthode de Darcy

Dans cette formulation (dite aussi méthode de la porosité), la zone pâteuse séparant les régions totalement liquide et totalement solide, est considérée comme un milieu poreux saturé. La perméabilité dans ce milieu doit passer d'une perméabilité totale dans le liquide à une perméabilité nulle (ou quasi-nulle) dans le solide, de manière à progressivement réduire les vitesses de leurs valeurs finies dans le liquide à zéro dans le solide. Le terme de freinage,  $F_{\text{freinage}}^*$  de l'Eq. I.8, correspond à un terme de Darcy et est exprimé par :

$$F_{\text{freinage}}^* = -A^* \mathbf{u}^*,$$

où  $A^*$  est une fonction de porosité paramétrable qui doit être définie de manière à forcer l'équation de conservation de la quantité de mouvement à correspondre à la loi de Carman-Kozeny pour les écoulements en milieu poreux. Dans un milieu ayant une porosité  $\epsilon_0$ , cette

loi permet d'exprimer le gradient de pression  $\nabla^* P^*$ , elle est donnée par :

$$\nabla^* P^* = -B_0^* \frac{(1 - \epsilon_0)^2}{\epsilon_0^3} \mathbf{u}_a^*,$$

où  $\mathbf{u}_a^*$  est la vitesse apparente du liquide dans le milieu poreux et  $B_0^*$  une constante prenant en compte les propriétés du milieu poreux. En pratique, Voller *et al.* [42] assimilent la fraction liquide  $g_l$  à la porosité de la zone pâteuse  $\epsilon_0$ , et donnent une définition de la fonction  $A^*$  :

$$A^* = B_1^* \frac{(1 - g_l)^2}{g_l^3 + B_2^*} \mathbf{u}_a^*,$$

où  $B_1^*$  et  $B_2^*$  sont des constantes numériques.  $B_2^*$  a une petite valeur et sert à éviter la division par zéro quand la fraction liquide  $g_l$  est nulle. Voller *et al.* [35] rapportent que cette définition de  $A^*$  correspond bien aux cas de changement de phase avec une zone pâteuse, et notent que cette correspondance est d'autant plus affirmée si la constante  $B_1^*$  est basée sur des observations expérimentales et prend en compte la morphologie de la zone pâteuse. Cependant, pour des cas de changement de phase isotherme, où cette approche est purement numérique, n'importe quelle fonction croissante de zéro à une grande valeur quand la fraction liquide  $g_l$  décroît de 1 à 0 est suffisante. Ce terme de freinage prend une valeur nulle dans la région liquide, les équations de quantité de mouvement d'un fluide simple sont donc retrouvées. Dans la zone pâteuse, la valeur de  $A^*$  augmente de sorte à ce que la valeur du terme de freinage commence à dominer les termes transitoires, convectif et diffusif, l'équation de conservation de la quantité de mouvement se rapproche alors de la loi de Darcy. Enfin, quand la fraction liquide locale tend vers 0, ce terme domine tous les autres termes de l'Eq. I.8 et forcent les vitesses calculées à avoir des valeurs proches de 0.

### I.2.2.1.2.2 La méthode de la viscosité variable

Dans cette méthode, proposée initialement par Gartling *et al.* [43], la viscosité  $\mu$  est supposée être fonction de la température de sorte que lors du changement de phase et dans la région solide,  $\mu$  prend une valeur élevée. Cela a pour effet de freiner la phase solide et d'y avoir des vitesses calculées négligeables. La formulation de Gartling ( $\mu = f(T^*)$ ) est adaptée aux méthodes enthalpiques afin d'avoir la viscosité comme fonction de la chaleur latente de changement de phase d'un volume de contrôle  $\Delta H_v$ . Cela revient à définir la viscosité en fonction de la fraction liquide  $g_l$  contenue dans le volume de contrôle. La viscosité variable est donc définie comme suit [42, 44] :

$$\mu = \mu_l + B_3(\Delta H_f - \Delta H_v) \iff \mu = \mu_l + B_4(1 - g_l(T^*))$$

où  $\mu_l$  est la viscosité de la phase liquide et  $B_3$  et  $B_4$  sont des constantes purement numériques d'un ordre de grandeur nettement supérieur à celui de  $\mu_l$  (de l'ordre de  $10^5$ ). Avec cette définition, lorsqu'un élément numérique est entièrement liquide, sa chaleur latente de changement de phase  $\Delta H_v$  est égale à  $\Delta H_f$  (ou encore la fraction liquide de cet élément vaut 1), la viscosité  $\mu$  qui lui est associée est égale à  $\mu_l$ . Lorsque cet élément subit un changement de phase,  $\Delta H_v$  devient inférieure à  $\Delta H_f$  ( $g_l$  aussi devient inférieure à 1),  $\mu$  augmente. Enfin, à la fin du changement de phase, *i.e.*  $\Delta H_v = 0$  ( $g_l = 0$ ), la valeur de  $\mu$  prend sa valeur maximale



$\mu_l + B_3 \Delta H_f$  (ou  $\mu_l + B_4$ ). L'influence de cette valeur maximale de la viscosité, notée aussi  $\mu_s$  comme viscosité de la phase solide, a été étudiée par Kasibhatla *et al.* [45]. Ils montrent que plus  $\mu_s$  est grande (de l'ordre de  $10^5$  Pa.s), meilleure est la correspondance avec les résultats expérimentaux, mais cela implique des coûts de calcul supplémentaires.

### 1.2.2.1.2.3 La technique switch-off

Avec cette méthode, les vitesses calculées dans le solide sont simplement remplacées par zéro [46]. La seule difficulté consiste à identifier les régions solides et liquides au sein du domaine. Cela est fait, pour chaque élément, en mettant à contribution les valeurs calculées de  $\Delta H_v$  (la chaleur latente de changement de phase de l'élément considéré) [42]. Il s'agit ensuite d'appliquer une condition sur  $\Delta H_v$  pour savoir si la vitesse calculée au niveau de cet élément est écrasée par une vitesse nulle ou bien gardée. Les vitesses calculées peuvent être remplacées dès que le changement de phase au niveau de l'élément commence *i.e.*  $\{\mathbf{u}^* = \mathbf{0}$  dès que  $\Delta H_v > 0\}$ , ou une fois que l'élément est totalement solide *i.e.*  $\{\mathbf{u}^* = \mathbf{0}$  seulement si  $\Delta H_v = \Delta H_f\}$ , ou quand une solidification partielle est atteinte *i.e.*  $\{\mathbf{u}^* = \mathbf{0}$  dès que  $\Delta H_v > H_0\}$  où  $H_0$  est une valeur de la chaleur latente de fusion fixée arbitrairement de telle sorte que :  $0 < H_0 < \Delta H_f$ .

Parmi ces trois approches, la méthode de la porosité est celle qui est la plus utilisée par la communauté pour son efficacité et sa facilité de mise en œuvre. C'est le cas aussi dans les modules traitant le changement de phase solide-liquide des codes de CFD commerciaux (*Comsol, Fluent, Star-CCM...*).

## 1.2.2.2 L'approche multi-domaines

Avec l'approche multi-domaines, les deux phases solide et liquide sont traitées séparément avec chacune son propre domaine de calcul. Ces deux domaines sont séparés par une frontière mobile qui est le front solide-liquide. Contrairement aux méthodes enthalpiques, où l'interface est diffuse et donc peut représentative des changements de phase isothermes, l'approche multi-domaines permet la description explicite du front et son suivi au cours de la résolution. Le front joue le rôle de conditions aux limites à la fois thermique et hydrodynamique aux deux domaines. Dans cette partie nous présentons la formulation dite de Stefan, qui prend en compte les échanges convectifs au sein de la phase liquide, pour un changement de phase solide-liquide. Pour se faire une idée de la problématique présentée ici et traitée au long de ce travail, considérons le cas d'un changement de phase solide-liquide au sein d'une cavité rectangulaire différentiellement chauffée. Lors du changement de phase, l'interface solide-liquide se déplace au sein de cette même cavité. Ce cas est illustré sur la [figure I.2](#).

La formulation complète de Stefan consiste à définir les équations de conservation séparément pour chacun des deux domaines. Dans la phase solide, la seule équation de conservation à résoudre est l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial T_s^*}{\partial t^*} = \frac{k_s^*}{\rho^* C_{p_s}^*} \nabla^{*2} T_s^*, \quad (I.9)$$

avec  $T_s^*$  la température dans le solide et où  $k_s^*$  et  $C_{p_s}^*$  sont respectivement la conductivité thermique et la capacité calorifique de la phase solide. Les propriétés du solide ont été considérées

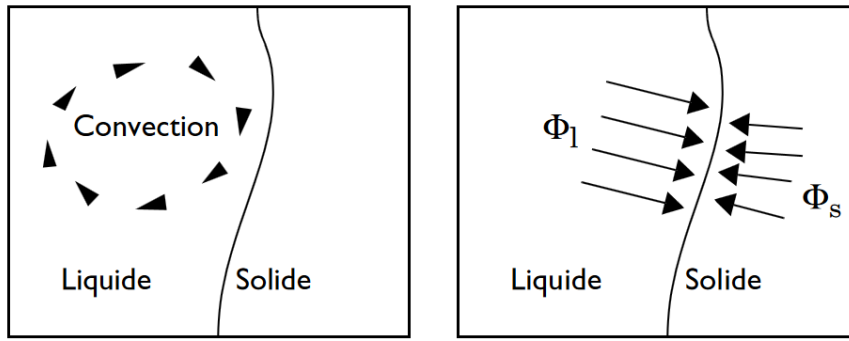


FIGURE I.2 : Représentation schématique d'un processus de solidification dirigée horizontale dans une cavité différentiellement chauffée (issue de [47]).

ici comme constantes.

Dans la phase liquide, l'équation de conservation de l'énergie contient en plus un terme convectif et est couplée aux équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse. Pour un fluide newtonien incompressible ayant la même masse volumique que le solide, sous l'approximation de Boussinesq et en négligeant la dissipation thermique due aux effets visqueux, ces équations sont :

— L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* u_i^* = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + g \beta_T (T_l^* - T_f^*) \delta_{i,2} + \nu \nabla^{*2} u_i^* \text{ pour } i = 1 \text{ et } 2, \quad (\text{I.10})$$

où  $T_l^*$  est la température du liquide et  $\nu^*$  la viscosité cinématique.

— L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial T_l^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T_l^* = \frac{k_l}{\rho c_{pl}} \nabla^{*2} T_l^*, \quad (\text{I.11})$$

où  $k_l$  et  $C_{pl}$  sont respectivement la conductivité thermique et la capacité calorifique de la phase liquide.

— L'équation de conservation de la masse :

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0. \quad (\text{I.12})$$

La condition de Stefan [48] donnant le bilan énergétique au niveau de l'interface solide-liquide est exprimée par :

$$\rho \Delta H_f \mathbf{v}_f^* \cdot \mathbf{n}^* = (\phi_l^* - \phi_s^*) \cdot \mathbf{n}^*, \quad (\text{I.13})$$

où  $\mathbf{v}_f^*$  est la vitesse du front solide-liquide,  $\phi_l^*$  et  $\phi_s^*$  sont les flux de chaleur provenant des régions liquides et solides respectivement (fig. I.2), et  $\mathbf{n}^*$  est le vecteur normal au front. Cette condition permet d'avoir les vitesses de déplacement du front solide-liquide *i.e.* la manière dont sont déformés les deux domaines solide et liquide. L'un des principaux avantages de cette approche multi-domaines, outre le fait d'avoir une interface explicite, nette et non

diffuse, est qu'une fois couplée à une méthode de résolution avec un maillage déformable (adaptatif), on peut constamment modifier les proportions des deux domaines en fonction de la vitesse du front. Cela donne plusieurs avantages à l'approche multi-domaines avec maillage adaptatif par rapport à la méthode enthalpique. D'abord, la séparation des deux domaines dans la première, permet l'utilisation de maillages différents entre les deux domaines que ce soit en type de maille ou en raffinement ; là où la méthode enthalpique nécessite un maillage unique et suffisamment raffiné partout où l'interface est susceptible de passer au sein du domaine. Bien que des approches avec maillage glissant, permettant un maillage fin au niveau de l'interface et grossier ailleurs dans le domaine, ont été proposées avec la méthode enthalpique [49] ; il n'en reste que cela se limite à des cas quasi-1D où la vitesse de glissement du maillage doit être bien ajustée pour correspondre avec la configuration géométrique et thermique, mais aussi que la réécriture des équations de conservation et donc des efforts de modélisation supplémentaires sont nécessaires.

L'autre avantage est qu'il n'y a plus besoin de terme de freinage de la phase solide dans l'approche multi-domaines. Une condition d'adhérence à la paroi est considérée directement au niveau du front pour le domaine liquide, alors que dans les méthodes enthalpiques l'amortissement des vitesses jusqu'à la zone solide se fait de manière progressive à travers la zone pâteuse dont l'épaisseur est généralement non négligeable. Avnaim *et al.* [44], dans une comparaison entre les approches enthalpiques et multi-domaines, rapportent que la présence et la largeur de la zone pâteuse indissociable de l'approche enthalpique avaient un effet non négligeable sur la boucle convective au sein du liquide, affectant ainsi la dynamique du transfert thermique global et par conséquent l'évolution du front solide-liquide. Ils rapportent aussi que l'approche multi-domaines donne des résultats plus cohérents avec les résultats expérimentaux de validation que ne le fait la méthode enthalpique. Il faut tout de même noter que le maillage adaptatif ajoute des étapes supplémentaires lors de la résolution (le calcul des nouvelles positions des nœuds et l'interpolation des différents champs entre ces nœuds), et cela représente donc des coûts de calcul supplémentaires par rapport à l'approche enthalpique.

## I.3 Solidification des alliages binaires

### I.3.1 Généralités sur la solidification des alliages binaires

La solidification des alliages binaires est différente de celle des corps purs. Les alliages métalliques, lors de leur solidification, passent par un état intermédiaire entre l'état liquide et l'état solide dit état pâteux. Si l'on regarde la courbe de refroidissement d'un alliage métallique binaire donné, initialement à l'état liquide, il existe une température dite température de liquidus  $T_{liq}^*$  au dessus de laquelle l'alliage est entièrement liquide. Ce n'est que quand la température  $y$  est inférieure que les premiers germes solides se forment. Il existe aussi une température dite température de solidus  $T_{sol}^*$  en dessous de laquelle l'alliage est entièrement à l'état solide et plus aucun liquide n'est présent. Entre ces deux températures, l'alliage passe par un état, qualifié de pâteux, où les phases solide et liquide co-existent. L'évolution typique de la température d'un alliage durant sa solidification est représentée sur la [fig. I.3](#). Cette représentation donne un des cas les plus simples de l'évolution de la température d'un alliage durant son refroidissement. Dans la réalité, cette évolution peut suivre plusieurs branches

### I.3. SOLIDIFICATION DES ALLIAGES BINAIRES

avec différents points de raccordement, elle peut même présenter un palier de changement de phase isotherme similaire aux corps purs pour certaines compositions en éléments d'alliages. Le relevé des courbes de refroidissement pour un alliage donné et pour différentes concentrations en éléments de l'alliage servent à interpréter le diagramme de phase.

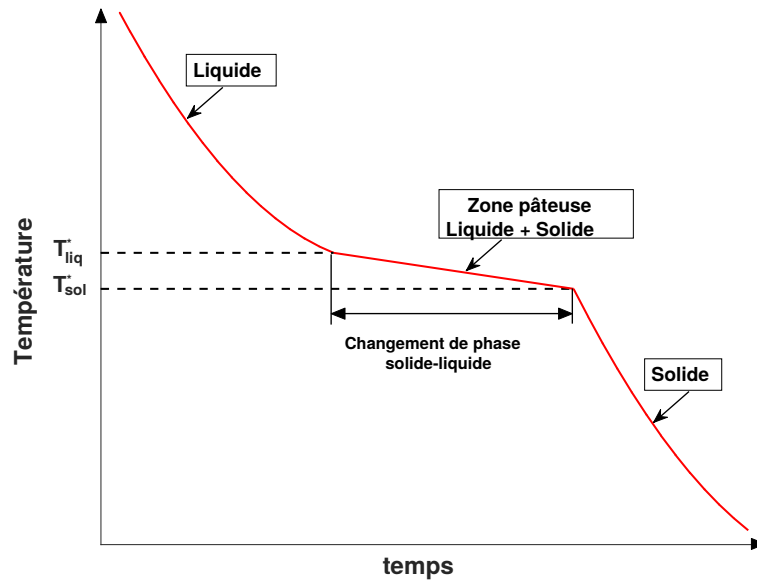


FIGURE I.3 : Évolution typique de la température d'un alliage binaire (dont la composition est tout le temps différente de la composition eutectique) lors de sa solidification.  $T_{liq}^*$  et  $T_{sol}^*$  sont, respectivement, les températures de liquidus et de solidus.

#### I.3.2 Diagramme des phases, coefficient de partage et ségrégation

Le changement de phase solide-liquide des alliages binaires est plus complexe que celui des corps purs. En effet, pour les alliages binaires, plusieurs phénomènes de transport entrent en jeu au niveau de l'interface solide-liquide. Le premier est un transfert de chaleur lié au rejet de la chaleur latente de changement de phase. Le second est un transfert de masse lié à la répartition du soluté (éléments d'alliage) entre les phases liquide et solide. Ce second transfert est dû au fait que les solutés ont des solubilités différentes entre les phases liquide et solide. Pour les alliages métalliques binaires auxquels on s'intéresse dans cette étude, cette solubilité est plus grande dans la phase liquide que solide. Cela donne un phénomène de rejet de ces solutés vers la phase liquide au niveau de l'interface. Quand on réalise donc la solidification d'un alliage métallique, les premières parties solides formées, du fait de ce rejet, auront des concentrations en éléments d'alliages plus faibles que la concentration initiale de l'alliage à l'état liquide. La manière suivant laquelle est faite cette répartition est accessible grâce au diagramme des phases.

En réalité, un système donné tendra toujours à minimiser son enthalpie libre  $G^*$ . La diminution de cette énergie libre est la force motrice de la transformation d'un système constitué d'un alliage binaire donné de l'état fondu à l'état solide. Celle-ci diminue principalement en raison de l'extraction de chaleur sensible (c'est-à-dire du refroidissement du système) et de la transformation de la phase liquide en phase solide (c'est-à-dire un rejet de chaleur latente).

Quand la température d'un alliage, ayant une concentration initiale  $c_0^*$ , se trouve à pression constante entre la température de liquidus ( $T_{liq}^*$ ) et la température de solidus ( $T_{sol}^*$ ), la minimisation de l'enthalpie libre  $G^*$  ne permet pas d'avoir un système complètement à l'état solide ou liquide, mais une coexistence de ces deux états avec chacun une concentration en soluté différente. Le diagramme des phases, pour une pression constante donnée, montre les conditions d'équilibre entre les phases liquide et solide thermodynamiquement distinctes. Il représente un moyen simple de comprendre le changement de phase solide-liquide d'un alliage.

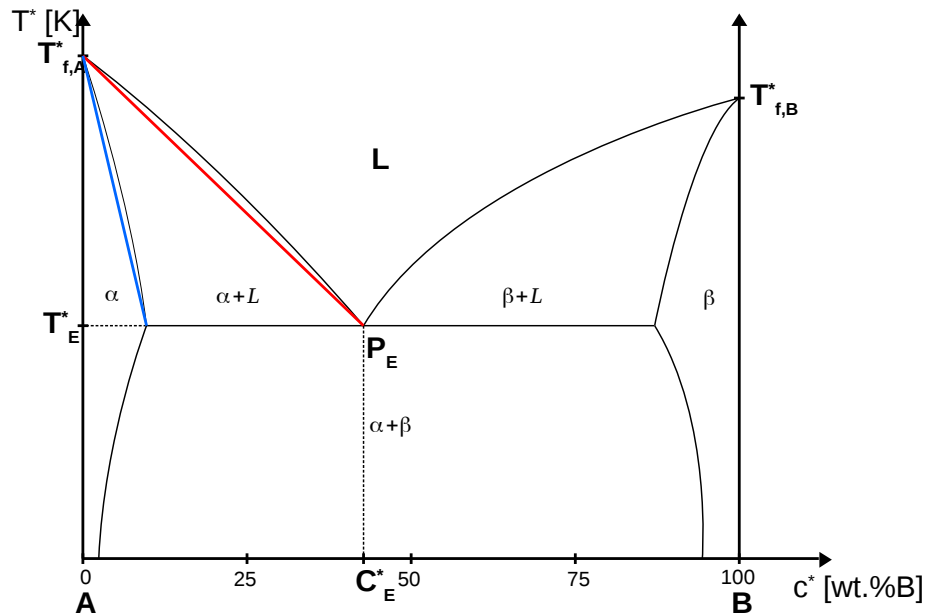


FIGURE I.4 : Diagramme de phase typique d'un alliage binaire A-B en lignes noires. Les deux droites rouge et bleue donnent sa linéarisation théorique dans l'hypothèse d'un alliage faiblement concentré.  $T_{f,A}^*$  et  $T_{f,B}^*$  sont respectivement les températures de fusion des corps purs A et B.  $P_E$  est le point eutectique défini par la température eutectique  $T_E^*$  et la composition eutectique  $c_E^*$ .

Le diagramme de phase typique d'un alliage binaire A-B est illustré sur la fig. I.4. Sa linéarisation dans l'hypothèse d'un alliage fortement dilué est représentée par les droites bleue et rouge (voir aussi fig. I.5). Les lignes de liquidus, ( $T_{f,A}^*$ ,  $P_E$ ) et ( $P_E$ ,  $T_{f,B}^*$ ) sur la fig. I.4 ou la droite rouge sur la fig. I.5, indiquent, en fonction de la composition, la température au delà de laquelle il ne reste que la phase liquide ou bien au delà de laquelle la phase liquide est plus stable que la coexistence des deux phases solide et liquide. En réalité, comme pour un corps pur, de la surfusion peut être observée. Celle-ci se manifeste quand un alliage métallique, avec une composition  $c_0^*$  reste à l'état liquide en dessous de la température de liquidus, comme rapportée par Kurz *et al.* [50]. De la même manière que les lignes de liquidus, les lignes de solidus donnent, en fonction de la composition, les températures en dessous desquelles seule la phase solide est thermodynamiquement stable. Le diagramme de phase prédit que les concentrations solide  $c_s^*(T^*)$  et liquide  $c_l^*(T^*)$ , à l'équilibre thermodynamique (à pression constante), ne dépendent que de la température  $T^*$ .

Dans le cas d'un alliage faiblement concentré, les courbes de liquidus et de solidus peuvent

### I.3. SOLIDIFICATION DES ALLIAGES BINAIRES

être linéarisées comme suit :

$$\begin{aligned} T_s^*(c^*) &= T_{f,A}^* - m_s^* c^*, \\ T_l^*(c^*) &= T_{f,A}^* - m_l^* c^*, \end{aligned} \quad (\text{I.14})$$

où  $T_s^*(c^*)$  et  $T_l^*(c^*)$  sont, respectivement, la température de solidus et de liquidus, toutes deux fonctions de la concentration  $c^*$ .  $m_s^*$  et  $m_l^*$  sont les pentes de solidus et de liquidus.  $T_{f,A}^*$  est la température de fusion du composant pur  $A$ .

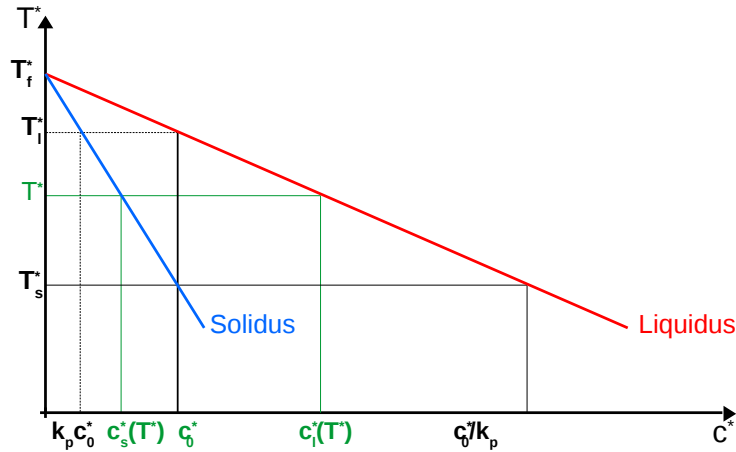


FIGURE I.5 : Diagramme de phase d'un alliage binaire simplifié pour le cas d'un alliage fortement dilué. Pour un alliage de composition  $c_0^*$ , la solidification commence à la température de liquidus  $T_l^*$  et s'achève à la température de solidus  $T_s^*$ . Á une température intermédiaire donnée,  $T$ , inférieure à la température de liquidus  $T_l^*$ , deux phases distinctes coexistent : une phase solide à une composition donnée par la droite du solidus et qui vaut  $c_s^*(T^*)$  et une phase liquide à une composition donnée par la droite du liquidus et qui vaut  $c_l^*(T^*)$ .

Comme l'indique le diagramme de phases, la création de la phase solide à partir de l'alliage initial en fusion entraîne une redistribution de la composition locale des éléments d'alliages. Celle-ci est due à la condition d'équilibre thermodynamique entre les phases. Cette différence entre les compositions en solutés entre les phases solide et liquide est appelée redistribution des solutés ou ségrégation des éléments d'alliages [51]. La ségrégation joue un rôle majeur dans la morphologie de la structure finale ainsi que dans l'évolution de la fraction volumique des phases. La redistribution ou la répartition du soluté au niveau de l'interface solide est disponible grâce au coefficient de ségrégation ou coefficient de partage,  $k_p$ . Ce paramètre décrit, quand la condition d'équilibre thermodynamique local est respectée, le rapport de composition entre les phases solide et liquide au niveau de l'interface de croissance. Il permet donc de transcrire le diagramme des phases en donnant une relation entre les concentrations solide  $c_s^*(T^*)$  et liquide  $c_l^*(T^*)$  à l'équilibre quand l'interface est à la température  $T^*$ . Il est simplement exprimé par le rapport entre ces deux compositions, ou bien directement par le rapport entre les pentes de liquidus et de solidus dans l'hypothèse d'un alliage fortement dilué :

$$k_p = c_s^*(T^*)/c_l^*(T^*) = m_l^*/m_s^* \quad (\text{I.15})$$

Ce coefficient de partage,  $k_p$ , a généralement une valeur inférieure à 1 pour les alliages mé-

talliques. Le soluté est donc plus soluble dans le liquide que dans le solide. Si  $k_p$  tend vers 0, la ségrégation tend alors à être optimale, *i.e.* tout le soluté est rejeté vers la phase liquide au cours de la solidification. La conservation du soluté à l'équilibre et à l'interface solide-liquide s'écrit :

$$c_0^* = g_l c_l^* + g_s c_s^* = g_l (c_l^* - c_s^*) + c_s^* \quad (\text{I.16})$$

où  $g_l$  et  $g_s = 1 - g_l$  sont respectivement les fractions liquide et solide. Cette relation permet de déduire la règle des leviers qui donne, à la température  $T^*$  et à l'équilibre, les valeurs des fractions solide et liquide à l'interface solide-liquide :

$$g_s = \frac{c_l^* - c_0^*}{c_l^* - c_s^*}, \quad g_l = \frac{c_0^* - c_s^*}{c_l^* - c_s^*}. \quad (\text{I.17})$$

Cette expression n'est valable que dans l'hypothèse d'une transformation quasi-réversible à l'équilibre des deux phases solide et liquide. Un tel équilibre implique une homogénéité de la concentration dans les deux phases à tout moment *i.e.* des diffusivités infinies du soluté dans les deux phases. Bien que cet équilibre puisse être respecté à une petite échelle locale lors de la solidification, il ne l'est pas à l'échelle du processus entier. Cela est dû au changement de position de l'interface solide-liquide qui impacte principalement la concentration dans le solide, mais aussi à des valeurs de diffusivité des solutés finies voire très petites ou encore au régime de croissance de l'interface (croissance plane, cellulaire, équiaxe ou dendritique). Dans le cas d'une croissance dendritique, il arrive que du liquide se retrouve emprisonné au sein des espaces inter-dendritiques. Des différences en composition sont alors constatées entre ces différentes régions liquides, entre celles se trouvant au sein de la zone pâteuse dans des espacements inter-dendritiques différents, et entre celles-ci et le liquide de la région entièrement liquide. D'autres modèles existent pour traiter ces cas, les principaux sont présentés ci-dessous dans la section suivante.

Le diagramme de phases d'un système d'alliage binaire (voir [fig. I.4](#)) prédit aussi que pour une certaine composition nominale en éléments d'alliage, au dernier stade de la solidification deux phases solides sont formées conjointement : la phase  $\alpha$  et la phase  $\beta$ . En effet, pour une concentration appelée concentration eutectique  $c_0^* = c_E^*$  au delà d'une température  $T_E^*$ , dite température eutectique, la phase liquide n'est plus une phase thermodynamiquement stable. Le liquide se dissocie alors en deux phases solides distinctes. La première, notée  $\alpha$ , est riche en composés A ; la deuxième, notée  $\beta$ , est riche en composés B. Cette structure est connue sous le nom de structure eutectique et peut présenter une grande variété de dispositions géométriques [50]. Cette structure eutectique peut aussi être observée pour un alliage dont la concentration nominale est inférieure à la concentration eutectique. En effet, la solidification successive des parties liquides restantes et leur enrichissement progressif en soluté, quand la température diminue et que l'interface solide-liquide croît, ne se poursuit pas indéfiniment le long des pentes liquidus et solidus, mais entraîne l'obtention d'une composition égale à la composition eutectique. Pour les alliages métalliques binaires, la structure eutectique peut être fibreuse ou lamellaire, régulière ou irrégulière en fonction des valeurs de l'entropie de fusion des deux phases solides  $\alpha$  et  $\beta$ .

La [figure I.6](#) présente une représentation schématique d'un processus de solidification typique d'un alliage binaire dans un creuset. Initialement l'alliage se trouve à l'état fondu avec une composition  $c_0^*$  et à une température  $T_0^*$  supérieure à la température liquidus  $T_l^*$

### I.3. SOLIDIFICATION DES ALLIAGES BINAIRES

donnée par le diagramme des phases. La solidification commence quand la température baisse suffisamment grâce à l'extraction de chaleur via le refroidissement des parois du creuset. Trois zones sont généralement identifiables, la zone solide (s), la zone pâteuse composée d'un mélange des phases liquide et solide (s+l) et enfin, la zone entièrement liquide (l).

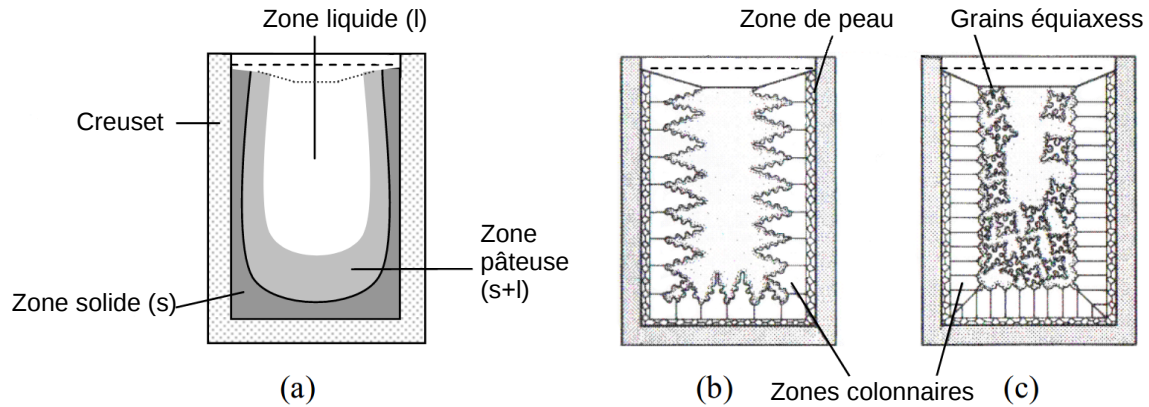


FIGURE I.6 : Représentation schématique d'une coupe d'un creuset contenant un alliage métallique au cours d'un processus de solidification en coulée (issue de [52]). (a) : Trois zones distinctes sont définies : la zone entièrement solide (s), la zone pâteuse où le liquide et le solide coexistent (l+s) et enfin la zone entièrement liquide (l). (b) : Les premières parties solides à se former sont celles en contact direct avec les parois refroidies du creuset, c'est la zone de peau. Elle est constituée de petits grains sans orientation définie et n'a que quelques millimètres d'épaisseur. Au dessus d'une certaine épaisseur, ces grains continuent à se former au sein du bain fondu en suivant la direction du gradient de température (direction normale aux parois du creuset) et forment la zone colonnaire. (c) Après un certain temps, certains grains colonnaires se détachent et/ou d'autres nouveaux grains se forment plus loin dans le liquide. Ces grains croissent en grains équiaxes, sans direction de solidification particulière, au centre du creuset jusqu'à ce qu'ils bloquent la progression de la zone colonnaire. La transition de la structure colonnaire à la structure équiaxe est connue sous le nom de Transition Colonnaire-Equiaxe (CET).

### I.3.3 Modélisation de la ségrégation des éléments d'alliage lors de la solidification

La ségrégation est généralement constatée ou mesurée sur le lingot solide obtenu à l'état final. À l'échelle du lingot (de quelques millimètres au mètre), on parle de macro-ségrégation. Si elle est mesurée entre les grains dendritiques (ou au niveau des espacements inter-dendritiques de l'ordre d'une centaine de micromètres), elle est dite micro-ségrégation. Dans la réalité, comme présenté précédemment, la ségrégation apparaît d'abord au niveau de l'interface solide-liquide lors de la croissance des zones colonnaires ou équiaxes, ce n'est encore que de la micro-ségrégation. Comme celle-ci modifie les champs de concentration à l'échelle



dentritique donnant lieu (dans la plupart des cas) à des mouvements de convection thermosolutale du liquide enrichi en soluté ; que cette convection thermosolutale peut être accentuée par de la convection naturelle ou dans d'autres cas par des mécanismes de brassage mécanique ([53,54]), électromagnétique ([55,56]) ou par ultrasons ([57,58]) ; qu'à cela s'ajoute l'accumulation du soluté au sein du liquide (enrichissement continu du liquide et appauvrissement du solide) lors de la croissance de la phase solide ; des variations du champ de concentration apparaissent à l'échelle macroscopique. C'est la macro-ségrégation. Elle se manifeste sous des formes diverses et variées (en canaux [59,60], en veines sombres [61],...) et dépend principalement de l'influence des mouvements convectifs sur la zone pâteuse.

Lors de la solidification d'un alliage métallique, de nombreux phénomènes de transfert entrent en jeu : d'abord des transferts de chaleur, à la fois au niveau local de l'interface solide-liquide (rejet de chaleur latente), mais aussi à l'échelle du processus de solidification entier (extraction de chaleur aux parois et convection-diffusion dans le bain liquide) ; auxquels s'ajoutent les transferts de masse (rejet de soluté en lien avec la ségrégation des impuretés à l'interface et convection-diffusion de ces mêmes impuretés au sein des deux phases). Ces phénomènes, fortement couplés, interagissent les uns avec les autres et prédominent à différentes échelles. Le transfert de chaleur peut être traité à l'échelle macroscopique, *i.e.* à l'échelle du creuset ou du four tout entier. Cependant, les interactions chaleur/masse doivent être considérées à l'échelle microscopique *i.e.* au même ordre de grandeur que les structures dentritiques, voire que celui des espacements inter-dentritiques secondaires. La modélisation de la ségrégation est donc une étude à la fois multi-physiques et multi-échelles.

La modélisation de la ségrégation peut être faite à une échelle macroscopique via des équations moyennées. Les équations nécessaires sont : les équations de conservation de l'énergie, de la masse et de la quantité de mouvement ainsi que l'équation de transport du soluté. Ce système d'équations doit être couplé à des modèles de ségrégation microscopiques.

### I.3.3.1 Modélisation de la micro-ségrégation

Les modèles, ou lois, de la micro-ségrégation permettent de relier les valeurs des fractions solide et liquide aux compositions solide et liquide au niveau de l'interface. Plusieurs modèles avec différentes suppositions ou approches existent.

Le modèle le plus simple, basé sur la condition d'équilibre des phases solide et liquide prédite par le diagramme des phases, est la règle des leviers. Celle-ci suppose des diffusivités infinies du soluté dans les deux phases. Les fractions solide et liquide,  $g_s$  et  $g_l$ , sont données par l'Eq. I.17. La concentration liquide alors est exprimée comme suit :

$$c_l^* = \frac{c_0^*}{(1 - k_p)g_l + k_p} \quad (\text{I.18})$$

Un second modèle, dit modèle de Scheil-Gulliver [50], suppose une diffusivité infinie du soluté dans la phase liquide, mais nulle dans le solide. Ce modèle part du constat que la solidification se produit très souvent hors de l'équilibre supposé dans la règle des leviers. Le soluté ne diffuse pas de la même manière dans le liquide que dans le solide. Dans ce dernier, les temps caractéristiques de diffusion sont très grands par rapport au temps de solidification. L'hypothèse d'une homogénéité du soluté dans la phase solide à tout moment n'est plus tenable. Par contre, dans le liquide, avec ce modèle, l'homogénéisation est toujours supposée

se faire instantanément grâce à une diffusivité infinie du soluté ou à la supposition d'un fort régime convectif. Le relation de Scheil-Gulliver permet alors d'exprimer la fraction liquide  $g_l$  comme suit :

$$g_l = \left( \frac{c_l^*}{c_0^*} \right)^{\frac{1}{k_p-1}}. \quad (\text{I.19})$$

La diffusivité du soluté n'étant pas forcément nulle dans le solide, Brody et Flemings [51] proposent un modèle à mi chemin entre la règle des leviers et la loi de Scheil-Gulliver, *i.e.* un modèle prenant en compte une diffusivité partielle du soluté dans la phase solide, mais seulement sur une certaine épaisseur  $\delta_0$  de l'interface solide-liquide vers le solide. Clyne et Kruz [62] ont amélioré ce modèle pour y inclure une plus grande gamme de diffusivité du soluté dans le solide. La fraction liquide,  $g_l$ , est alors exprimée comme suit :

$$g_l = \frac{2k_p\alpha' - \left( \frac{c_l^*}{c_0^*} \right)^{\frac{2k_p\alpha'-1}{1-k_p}}}{2k_p\alpha' - 1}, \quad (\text{I.20})$$

avec

$$\alpha' = \alpha_0 \left( 1 - \exp\left(\frac{-1}{\alpha_0}\right) \right) - \frac{1}{2} \exp\left(\frac{-1}{2\alpha_0}\right),$$

et où  $\alpha_0 = D_s t_s / \delta_0^2$  est une constante adimensionnelle assimilable à un nombre de Fourier.  $D_s^*$ , est le coefficient de diffusion du soluté dans la phase solide,  $t_s^*$  est le temps caractéristique de solidification locale. Ce dernier modèle permet de retrouver les deux modèles précédents, la règle des leviers et la loi de Scheil-Gulliver. Pour cela il suffit de prendre respectivement,  $\alpha' = 0.5$  et  $\alpha' = 0$ .

D'autres modèles existent encore pour la modélisation de la micro-ségrégation. On peut en citer deux qui ont été étudiés par Combeau *et al.* [63] : celui de Onhaka qui consiste à supposer une forme donnée pour la courbe de la concentration solide ; celui de Mo [63] qui, au lieu de directement donner une relation entre  $g_s$  et  $c_s^*$ , donne une équation d'évolution de  $c_s^*$  en fonction de plusieurs paramètres (diffusivité du soluté dans le solide, coefficient de partage, espacement interdendritique secondaire...). Kobayashi [64] (qui donne d'ailleurs dans ce papier la solution exacte du modèle de Brody-Flemings) compare plusieurs des modèles de micro-ségrégation précédents (règle des leviers, Scheil-gulliver, Clyne-Kruz, Brody-Flemings et Onhaka) avec une résolution analytique et montre que très souvent les résultats obtenus avec ces modèles ne sont pas suffisants. Voller [65], quant à lui, montre que les modèles de Brody-Flemings et Onhaka donnent de bons résultats quand un taux de refroidissement constant est appliqué. Bien que ces modèles intermédiaires (entre la règle des leviers et la loi de Scheil-Gulliver, *i.e.* avec diffusivité partielle du soluté dans le solide ou avec un profil donné de concentration dans le solide) peuvent donner de meilleurs résultats, il est plus commun de s'appuyer sur la règle des leviers ou la loi de Scheil-Gulliver pour, d'abord, leur simplicité, mais aussi comme première approximation relativement fiable.

Ces modèles de micro-ségrégation sont aussi utilisables pour les alliages ternaires ou multi-composés [66–68].

### I.3.3.2 Modélisation de la macro-ségrégation

Comme mentionné précédemment, la modélisation de la macro-ségrégation se fait à une plus grande échelle que la micro-ségrégation. Les cinétiques de croissance, la variété des échelles caractéristiques des différents phénomènes physiques et l'extrême complexité des morphologies de l'interface solide-liquide, apparaissant lors de la solidification des alliages binaires, rendent très difficile, voire impossible, d'essayer de suivre la forme et la position de l'interface solide-liquide tout le temps avec des méthodes multi-domaines. Des modèles de croissance macroscopiques ont donc été développés pour étudier la solidification de ces alliages sur un domaine global unique. En effet, pour un alliage se solidifiant dans un creuset, la modélisation peut se faire avec des équations de conservation moyennées macroscopiques. Un tel système d'équations doit être fermé avec l'un des modèles de micro-ségrégation qui sera appliqué au niveau de chaque maille de calcul. La fermeture du système d'équations de conservation moyennées par les modèles de micro-ségrégation est normalement suffisante pour décrire qualitativement et même quantitativement les macro-ségrégations obtenues en fin de solidification (à condition d'appliquer des conditions aux limites bien représentatives des conditions expérimentales et de bien connaître les propriétés thermo-physiques du matériau solidifié). Ces modèles macroscopiques continus ('continues' implique l'application des équations de conservation de manière continue à travers l'interface solide-liquide sans condition de saut ou de discontinuité et cela sur tout domaine de calcul) se divisent en deux grandes familles.

La première rassemble les modèles de continuum basés sur la théorie des mélanges initialement proposée par Bennon & Incropera [5]. Dans cet article, les auteurs donnent un développement avec lequel, à partir des équations exprimées pour les deux phases de manières distinctes, ils aboutissent à des équations macroscopiques moyennes valables pour le mélange composé des deux phases solide et liquide. Dans ce développement, la règle des leviers est utilisée, les phases solide et liquide sont localement à l'équilibre thermique et la diffusion macroscopique du soluté dans le solide ainsi que la vitesse du solide sont nulles. La zone pâteuse est supposée être cohérente et continue. Les propriétés thermo-physiques du mélange sont les moyennes des propriétés des phases solide et liquide pondérées par leur fraction volumique. Ce système d'équations est utilisé pour simuler la solidification d'une solution aqueuse de chlorure d'ammonium dans une cavité rectangulaire [6].

La seconde famille regroupe les modèles de continuums macroscopiques proposés par Ni & Beckermann [8]. Dans celle-ci, la technique de prises de moyennes volumiques sur un volume élémentaire représentatif (VER) est utilisée pour établir les équations macroscopiques. Ce VER (de l'ordre du millimètre) est plus petit que la taille du système (qui est l'échelle du creuset allant d'une dizaine de centimètres au mètre), mais supérieur à l'échelle des microstructures (qui est de l'ordre d'une dizaine de micro-mètres). Il est donc suffisamment grand pour être caractéristique des macro-structures recherchées. La température et la densité sont considérées comme uniformes dans le VER. Les auteurs déterminent les valeurs moyennes des différentes variables recherchées, de manière à se débarrasser de leurs variations aux plus petites échelles, et expriment un système unique d'équations macroscopiques dont les variables sont les valeurs moyennées. Une approche similaire a été proposée par Ganesan *et al.* [69], puis utilisée dans le travail de Felicelli *et al.* [70] pour montrer la formation de 'freckles' à cause de la convection thermo-solutale durant la solidification d'alliages binaires.

Ahmad *et al.* [71] comparent la résolution de ces mêmes équations avec une méthode de volumes finis et une méthode aux éléments finis pour deux alliages d'étain-plomb et comparent ensuite les résultats numériques avec les résultats expérimentaux de Hebditch *et al.* [72]. Une bonne correspondance est trouvée entre les résultats. Les auteurs y proposent aussi une discussion sur l'influence de la concurrence ou de la superposition des convections thermiques et solutales (quand le soluté rejeté est plus léger ou plus lourd que le solvant, *i.e.* respectivement l'étain dans le plomb ou l'inverse) sur la forme et l'intensité des 'freckles' de ségrégation. Ce système d'équations a été proposé pour résolution avec différentes méthodes dans un benchmark de solidification dans le cadre du projet ANR SMACS (numerical Simulation of MACrosegregation and Structure) [73] et dont les résultats ont été résumés dans [74]. Plus récemment Boussaa *et al.* [75,76] ont montré que cette approche couplée à la règle des leviers donne des résultats numériques en bon accord avec des résultats expérimentaux obtenus avec le benchmark 'Afrodite' pour la solidification d'un alliage étain-plomb.

Ce système d'équations de conservation ainsi que les différentes considérations et simplifications considérées sont détaillés à la section IV.2 de ce travail où une étude portant sur la ségrégation lors de la solidification d'un alliage étain-plomb est menée.

Des approfondissements de cette approche de prises de moyennes volumiques ont été aussi proposés pour prendre en considération le mouvements de la phase solide durant la solidification [77–79,90]. En effet le détachement de grains solides de la zone pâteuse et leur mouvement au sein de la phase liquide sont souvent des facteurs qui contribuent de façon assez conséquente aux macro-ségrégations.

## I.4 Étude expérimentale de la solidification

En ce qui concerne l'étude expérimentale de la solidification des corps purs et des alliages métalliques, un nombre considérable de configurations, de techniques, de procédés et d'approches sont utilisées et des efforts conséquents sont à chaque fois mis en œuvre pour voir l'influences des différents phénomènes physiques sur les cinétiques de solidification dans le but de maîtriser et d'améliorer les procédés de solidification. Les procédés industriels sont aussi aussi diverses que variés. On retrouve les procédés de solidification dirigée en Bridgman horizontal ou vertical, où les deux constituants phares sont le creuset et les éléments de chauffage ou de refroidissement. Généralement avec ce procédé, l'un des deux constituants est translaté par rapport à l'autre et on parle alors de vitesses de tirage. On parle aussi de tirage dans les procédés de Czochralski et de Kyropoulos. Des procédés de solidification en coulée continue ou en moulage sont aussi utilisés.

Dans les expériences de solidification de référence, les efforts sont généralement concentré sur la compréhension des phénomènes physiques et de leur influence sur les différents phénomènes de transfert ainsi que leur impact sur les structures obtenues. Il est aussi commun d'essayer d'isoler un phénomène physique particulier pour voir son influence seule, indépendamment des autres phénomènes, ou encore d'observer l'influence de combinaisons de phénomènes physiques couplés. Ces études nécessitent des outils de mesure et des moyens d'observation assez pointus. La précision des techniques de mesure et leur fiabilité sont des facteurs déterminants.

Pour le changement de phase solide-liquide des corps purs, parmi les benchmarks les

plus utilisés pour la validation des codes de solidification, on retrouve les deux expériences de Wolf et Viskanta [48] (étain pur) et celle de Gau et Viskanta [80] (gallium pur). Les deux observent l'influence de la convection naturelle sur l'évolution du front solide-liquide. Des expériences de solidification dirigée en micro-gravité ont été aussi réalisées pour éliminer les effets convectifs et n'étudier que l'influence des effets diffusifs. Liu et al. [81] proposent un tel benchmark pour l'alliage Al-7wt.%Si (les expériences sont menées à bord de la station spatiale internationale). D'autres études regardent l'influence de l'application de champs magnétiques sur la cinétique de solidification [82–84].

Dans la partie suivante nous présentons le dispositif expérimental de référence sur lequel nous nous appuyons pour valider nos résultats numériques. Les constituants de ce montage ainsi que les principes et moyens de mesure y sont décrits.

### I.4.1 Montage expérimental 'Afrodite'

Dans le cadre de notre travail, on s'intéresse particulièrement au dispositif expérimental 'Afrodite' réalisé au sein du laboratoire SIMAP/EPM à Grenoble pour l'étude de la solidification de métaux purs et de la ségrégation dans les alliages métalliques. Ce montage s'inspire du dispositif proposé par Hebditch *et al* [72,85] pour l'observation de la ségrégation lors de la formation de lingots d'alliages (Sn-5 wt.%Zn, Sn-5 wt.%Pb et Pb-48 wt.%Sn) dans un creuset de 10 cm de longueur, 6 cm de hauteur et 1 ou 3 cm de largeur et qui n'est refroidi qu'à partir d'une seule paroi via une circulation d'eau ou d'air. La première version de l'expérience nommée 'Afrodite I' fut réalisée par Quillet *et al* [86]. Les échantillons étaient solidifiés dans un creuset de  $5 \times 6 \times 1 \text{ cm}^3$  dont toutes les parois étaient adiabatiques, sauf une seule par laquelle se faisait le refroidissement (voir fig. I.7). Cette première version a permis la réalisation d'une série d'expériences de solidification d'étain pur et de l'alliage métallique Sn-5 wt.%Bi [87].

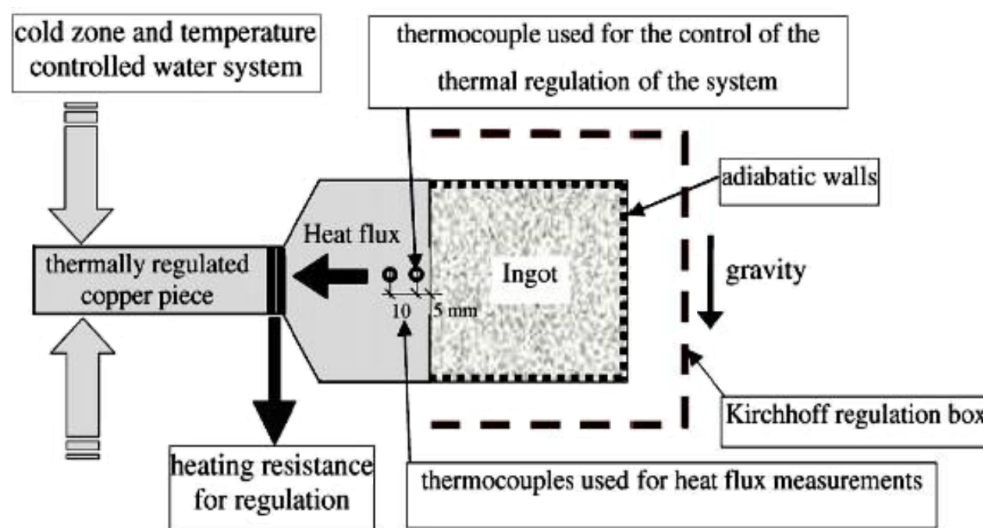


FIGURE I.7 : Schéma de l'installation expérimentale 'Afrodite I' [87].

Le montage expérimentale ('Afrodite I') a été modifié par Wang pour aboutir à une deuxième version nommée 'Afrodite II'. Dans cette dernière, la taille des échantillons solidifiés est de

## I.4. ÉTUDE EXPÉRIMENTALE DE LA SOLIDIFICATION

$10 \times 6 \times 1 \text{ cm}^3$ . Elle inclut aussi un deuxième échangeur de chaleur positionné sur le côté opposé de l'échangeur initial. Ces deux échangeurs permettent d'imposer un gradient thermique horizontal entre les parois du creuset contenant l'échantillon, permettant ainsi l'application de différentes configurations thermiques de chauffage et de refroidissement. Wang a aussi amélioré l'isolation thermique de l'installation et a augmenté le nombre de thermocouples qui permettent l'acquisition des cartes thermiques au niveau des parois latérales du creuset. Le dispositif 'Afrodite II' est bien décrit et documenté par Wang *et.al* [87, 91–93] et a servi de référence de validation pour plusieurs travaux de simulations numériques [78, 90, 94–98]. Dans cette deuxième version du dispositif, l'estimation de la température des parois chauffées (ou refroidies) du creuset qui sont en contact avec les deux échangeurs de chaleur reste compliquée. En effet le nombre de thermocouples a été seulement augmenté sur les parois latérales du creuset mais pas au niveau des échangeurs de chaleur. Le contrôle des conditions aux limites thermiques ainsi que leur bonne estimation pour leur utilisation dans les validations numériques se sont avérés impossibles.

Une troisième version du dispositif, nommée 'Afrodite III', a été proposée par Hachani *et.al* [88, 99, 102]. Dans celle-ci le nombre total de thermocouples a été porté à 86, dont 18 uniquement au niveau des échangeurs de chaleur pour une meilleure estimation de la température à la fois au niveau des échangeurs et du creuset. Les flux thermiques extraits au niveau de ces parois sont mieux contrôlés. Cette dernière version de l'expérience est représentée sur la fig. I.8, on s'y référera dans la suite de ce travail par 'Afrodite'.

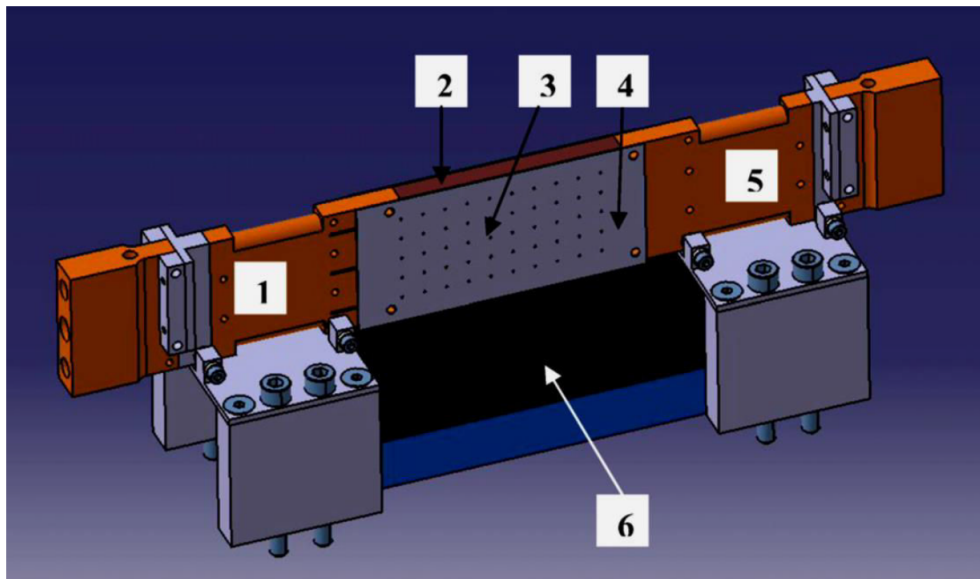


FIGURE I.8 : Schéma de l'installation expérimentale 'Afrodite' [91] avec ses principales parties. 1,5 : échangeur de chaleur gauche et droit, 2 : échantillon du matériau étudié, 3 : matrice de thermocouples, 4 : le creuset en acier inoxydable et 6 : moteur linéaire.

Ce dispositif se compose de cinq parties principales :

- Un creuset de forme parallélépipédique, d'une longueur  $L^* = 10 \text{ cm}$ , une profondeur  $W^* = 1 \text{ cm}$  et d'une hauteur  $H^* = 6 \text{ cm}$ . Il est représenté en gris clair sur la fig. I.9.

Il est fabriqué avec des feuilles d'acier inoxydable (pour une neutralité chimique vis-à-vis de l'échantillon à solidifier [88]) de 0.5 mm d'épaisseur et contient l'échantillon métallique à solidifier.

- Deux échangeurs de chaleur latéraux en cuivre (**1** et **5** sur la [fig. I.8](#) et représentés en gris foncé sur la [fig. I.9](#)) avec une grande conductivité thermique, chacun avec une partie chauffante et un circuit pour l'eau de refroidissement. Ces deux échangeurs ont une section transversale ( $1 \times 6 \text{ cm}^2$ ) et forment les deux parois chauffées (ou refroidies) du creuset pour assurer un apport ou une extraction plus homogène des flux de chaleur. Ils sont donc directement en contact avec le bain fondu (ou l'échantillon solide). Comme le cuivre présente des contraintes chimiques, du fait de son interaction avec l'étain qui est le matériau principalement étudié, une mince couche de chrome et un spray de nitrure de bore sont appliqués sur les faces des échangeurs.
- Une série de 88 thermocouples type-K, avec une fréquence d'enregistrement de 1 Hz, pour la mesure de la température aux parois latérales du creuset et des échangeurs de chaleur. Soixante-huit d'entre eux sont pointés par soudage laser sur les parois latérales du creuset et dix-huit sur les deux échangeurs de chaleur. Sur les soixante-huit thermocouples des parois du creuset, cinquante sont disposés en un quadrillage régulier à 5 lignes ( $5 \times 10$ ) avec un espacement horizontal et vertical constant de 1 cm sur une même paroi latérale (leur emplacement est représenté par les points oranges libellés de  $L_1$  à  $L_{50}$  sur la [fig. I.9](#)), et dix-huit sont disposés sur la paroi latérale opposée pour vérifier la symétrie des mesures par rapport au plan de coupe central de la cavité. Ces thermocouples donnent un aperçu de l'évolution temporelle du champ de température au sein de l'échantillon pendant le processus de solidification. Les dix-huit thermocouples restant sont répartis de manière égale entre les deux échangeurs de chaleur, libellés respectivement de FR1 à FR9 et de FL1 à FL9 pour les échangeurs de chaleur droit et gauche (voir [fig. I.12](#)). Ils permettent l'estimation des flux de chaleur échangés avec l'échantillon lors des processus de solidification et le contrôle de la température aux parois du creuset. Ils sont représentés par des points bleus sur la [fig. I.9](#).
- Une boîte de Kirchoff englobant le creuset et qui sert à minimiser les pertes de chaleur par rayonnement sur les surfaces latérales du creuset. En effet, ces parois montent à des températures assez élevées et du fait de l'émissivité du cuivre et de l'acier, des pertes par rayonnement sont constatées. La boîte de Kirchoff limite ces pertes.
- Une enceinte sous vide englobant les différentes parties (l'échantillon à solidifier, les échangeurs de chaleur, le creuset et la boîte de Kirchoff) pour éliminer tout transfert de chaleur supplémentaire par convection d'air et assurant ainsi l'isolation totale et finale de l'installation.

Une description plus détaillée de l'ensemble de ces composants est donnée dans la thèse de Hachani [88] et dans les publications de Hachani *et al.* [99–102].

La disposition des thermocouples au sein du creuset et des échangeurs de chaleur est illustrée sur la [figure I.9](#). Leur répartition a été choisie afin de permettre une acquisition optimale des champs de température au cours des différentes étapes de solidification. Cette acquisition permet le tracé des isothermes (contours de la température) ainsi que celle des gradients thermiques locaux au sein de l'échantillon durant les processus de solidification. Deux exemples de résultats expérimentaux obtenus avec ces thermocouples sont illustrés sur les [figures I.10](#) et

## I.4. ÉTUDE EXPÉRIMENTALE DE LA SOLIDIFICATION

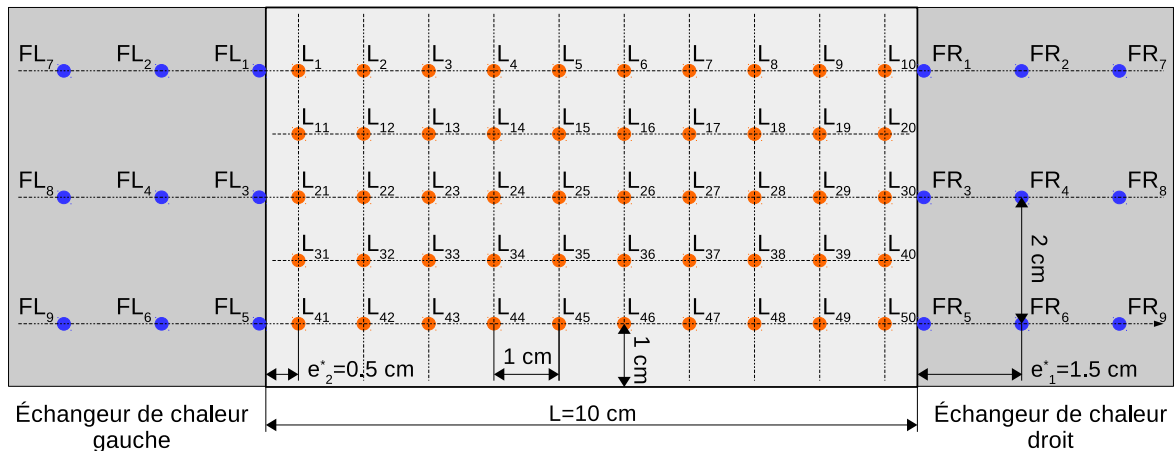


FIGURE I.9 : Schéma du benchmark expérimental avec le creuset (gris clair) au milieu et les positions ainsi que l'espacement entre les cinquante thermocouples de la face latérale du creuset (points oranges). Les deux échangeurs de chaleur latéraux (gris foncé) contiennent chacun neuf thermocouples additionnels avec un positionnement spécifique (points bleus).

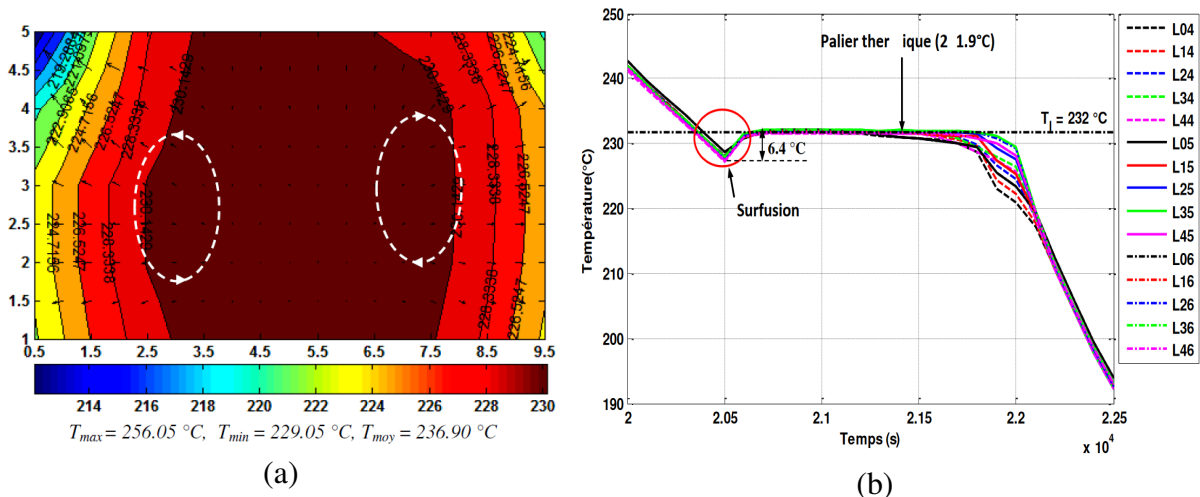


FIGURE I.10 : Résultats expérimentaux de la solidification de l'étain pur (Sn) avec  $\Delta T^* = 0$  K et  $Cr^* = -0.03$  K/s. (a) champ de température au sein de l'échantillon avec les vecteurs proportionnels à la densité du flux thermique à un instant donné du processus de solidification. (b) évolution temporelle de la température sur quelques thermocouples pendant toute la durée du processus de solidification [88].

I.11 pour des cas de solidification, respectivement, d'étain pur (Sn) et de l'alliage métallique (Sn-3 wt.%Pb).

Dans la première expérience, de l'étain pur en fusion est refroidi de manière symétrique et simultanée à partir des deux parois en contact avec les échangeurs. L'écart de température entre ces deux parois est  $\Delta T^* = 0$  K et le taux de refroidissement est  $Cr^* = -0.03$  K/s. Deux fronts de solidification apparaissent au niveau des deux parois refroidies, puis croissent vers le centre de la cavité où se trouve l'étain liquide restant dont le volume décroît progressivement.



L'acquisition des données de température au moyen des thermocouples permet de visualiser les isothermes et de repérer les fronts solide-liquide (voir fig. I.10-a). L'évolution temporelle de la température au sein du creuset durant tout le processus est aussi obtenue avec les thermocouples (voir fig. I.10-b). On y constate bien les différentes étapes de solidification avec les deux refroidissements linéaires quand l'échantillon est totalement solide ou liquide et le pallier isotherme de changement de phase entre ces deux états. De la surfusion est aussi observée pour ce cas de refroidissement symétrique.

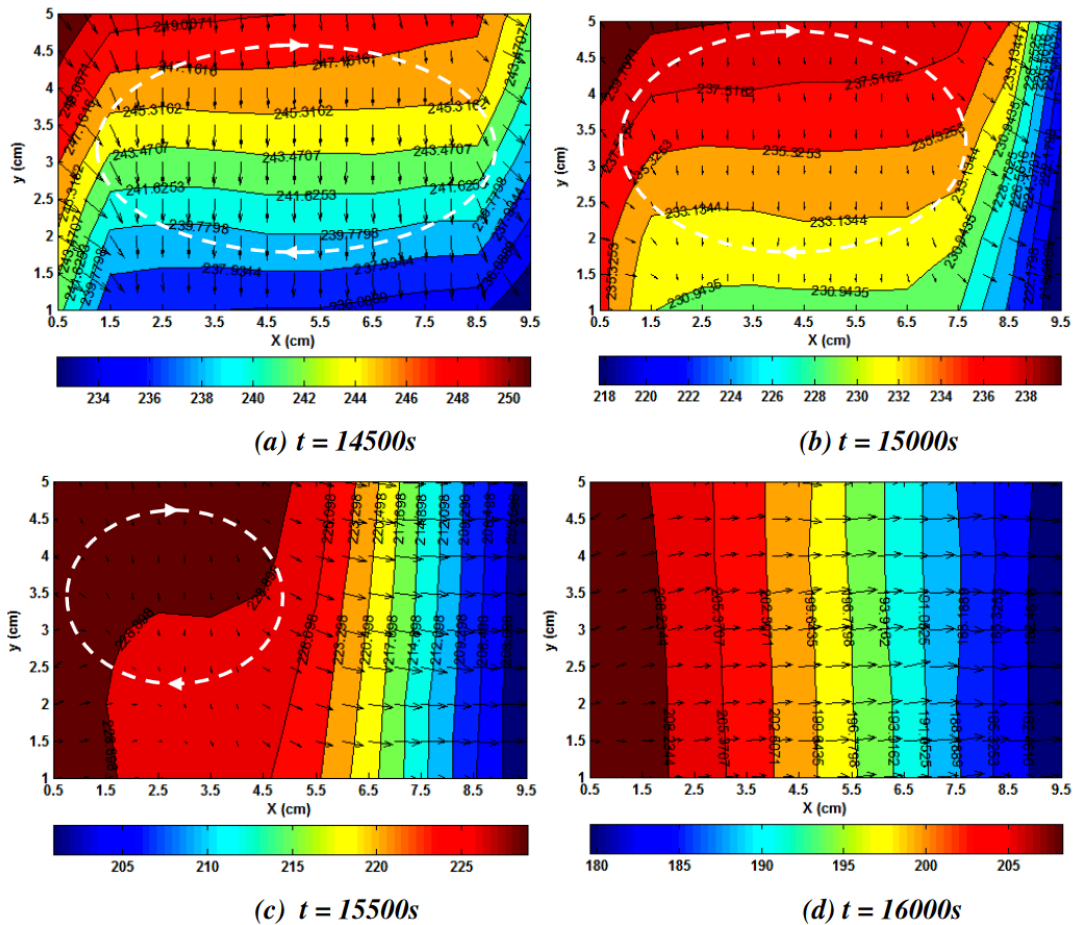


FIGURE I.11 : Champs expérimentaux de température au sein de la cavité à quatre instants successifs durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3wt.%Pb.  $\Delta T^* = 40$  K et  $C_r^* = -0.03$  K/s. La température des colorbars est en degrés Celcius et les vecteurs noirs sont proportionnels aux flux thermiques [88].

Dans le deuxième cas rapporté sur la figure I.11, l'effet de la convection naturelle sur la solidification de l'alliage métallique (Sn-3wt.%Pb) est étudié. Dans ce cas une différence de température  $\Delta T^* = 40$  K est imposée entre les parois refroidies pour déclencher la convection naturelle. Le taux de refroidissement est  $C_r^* = -0.03^*$  K/s. La visualisation des champs de température et la déformations des isothermes indiquent bien la présence d'une boucle d'écoulement convectif. Cet écoulement impacte le type de structure obtenu dans l'alliage solidifié.

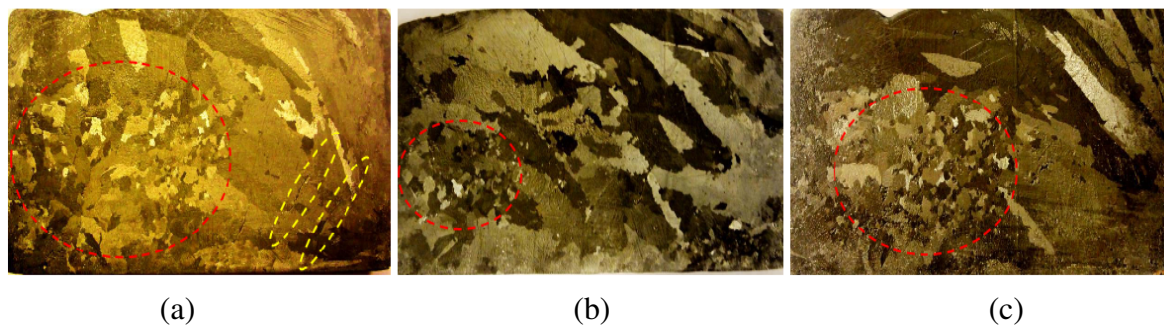


FIGURE I.12 : Macrostructures observées sur les faces latérales des lingots de l'alliage Sn-3wt.%Pb obtenus avec les taux de refroidissement suivants : (a)  $-0.03$  K/s, (b)  $-0.02$  K/s et (c)  $-0.04$  K/s [88].

Dans ces différentes expériences de solidification [88, 99–101], Hachani a mentionné la présence d'une résistance thermique de contact entre les échangeurs de chaleur et l'échantillon à solidifier. Cette résistance perturbe les conditions aux limites thermiques et rend les flux de chaleur échangés non uniformes le long des parois refroidies. Elle affecte aussi le gradient thermique effectif réellement constaté entre ces deux parois. Les données brutes de température acquises au niveau des parois refroidies ne sont donc pas directement exploitables comme conditions aux limites fiables lors des simulations numériques. Leur traitement est nécessaire afin de reconstruire les bonnes conditions aux limites thermiques représentatives de l'expérience lors des simulations numériques. Ce traitement qui met à profit les données de températures est détaillé dans le troisième chapitre de ce travail où les résultats numériques, obtenus avec des modèles développés pour la simulation du changement de phase solide-liquide de corps purs, sont confrontés aux résultats expérimentaux.

Outre l'acquisition des données expérimentales de température au sein de l'échantillon et des échangeurs de chaleur durant les processus de solidification des différents matériaux, différentes analyses *post-mortem* des échantillon solides ont été réalisées [88, 99–102]. La première analyse a pour but la mise en évidence de la nature des macrostructures en observant les tailles des grains et la répartition des canaux ségrégués. Cette analyse est effectuée en appliquant une succession de polissage aux faces du lingot, puis une attaque chimique avec une solution chimique appropriée (le procédé suivi est bien détaillé dans la thèse de Hachani [88]). Des vues qualitatives des structures obtenues en fonction des taux de refroidissement appliqués sont données sur la figure I.12, pour des lingots de Sn-3wt.%Pb.

Une deuxième analyse couplant une méthode chimique à l'ICP (Plasma à Couplage Inductif) est appliquée pour avoir la distribution quantitative de la concentration en plomb. Cette concentration est estimée, avec une erreur relative de  $\pm 3\%$ , sur les mêmes positions que celles des thermocouples en réalisant un carottage. L'exemple d'un lingot carotté et de la carte de concentration correspondante sont donnés sur la figure I.13.

Une dernière analyse *post-mortem* est effectuée en réalisant des radiographies aux rayons X des lingots solidifiés. Le principe derrière ces radiographies est qu'une différence d'absorption des rayons X existe entre l'élément d'alliage qui est le plomb et l'étain, du fait, entre autres, de la différence de leur densité. Des cartes en niveaux de gris, dans lesquelles des contrastes entre les zones plus ou moins riches en plomb apparaissent, sont obtenues. Au

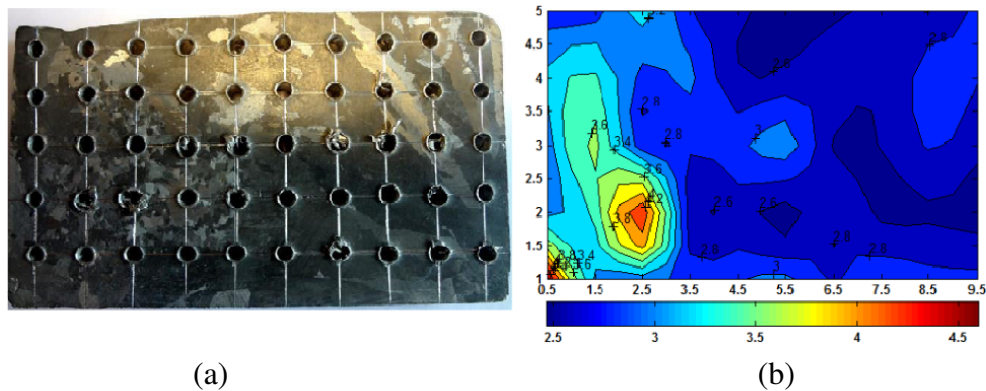


FIGURE I.13 : (a) : Photo du lingot carotté aux mêmes emplacements que ceux des thermocouples. (b) : Champ de concentration final du lingot de Sn-3wt.%Pb obtenu après analyse *post-mortem* [88, 101].

moyen d'un traitement d'image, il est possible de retrouver le champ de concentration en plomb moyenné sur la petite épaisseur du lingot. Cela est particulièrement utile pour la mise en évidence des canaux ségrégués ainsi que de leurs tailles et répartitions en fonction de la concentration nominale de l'alliage considéré et du taux de refroidissement appliqué lors de sa solidification. La figure I.14(a) montre la radiographie X d'un lingot de Sn-10wt.%Pb solidifié en imposant une différence de température  $\Delta T^* = 0$  K et un taux de refroidissement  $C_r^* = -0.04$  K/s. La figure I.14(b) montre la carte de concentration en plomb obtenue après traitement de l'image radiographique. L'exemple d'un canal ségrégué est mis en évidence en pointillés sur les deux figures.

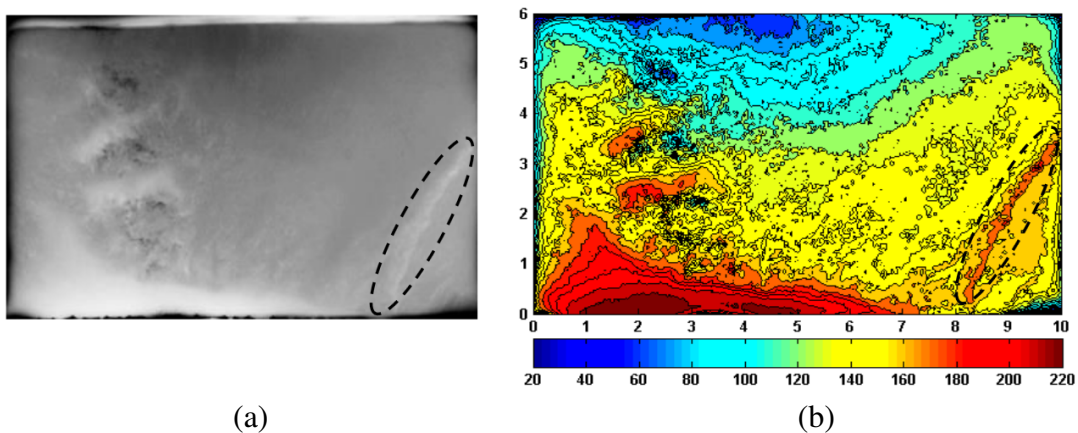


FIGURE I.14 : Radiographie X (a) et son traitement d'image (b) du lingot de l'alliage Sn-10wt.%Pb obtenu en appliquant une différence de température  $\Delta T^* = 40$  K et un taux de refroidissement  $C_r^* = -0.04$  K/s [88].

Des cartes de concentration plus détaillées sont obtenues en découpant les lingots transversalement en petites lamelles qui sont ensuite radiographiées. Ces nouvelles cartes ainsi obtenues permettent d'avoir la variation de la concentration du plomb suivant l'épaisseur du lingot.

Le montage expérimental 'Afrodite' permet donc l'obtention de données à la fois qualita-

tives et quantitatives sur le processus de solidification et les lingots obtenus. Plusieurs séries de mesures ont été effectuées, que ce soit pour la solidification de l'étain pur ou de différents alliages d'étain-plomb. Les données expérimentales acquises serviront de référence lors de la validation des modèles numériques élaborés dans la suite de ce travail.

### I.5 conclusion

Cette revue bibliographique des différentes approches possibles pour modéliser le changement de phase solide-liquide de corps purs montre la variété des méthodes et des modèles disponibles, ainsi que la complexité des nombreux phénomènes physiques y apparaissant. Ce champ d'étude reste vaste (englobant beaucoup de phénomènes physiques et multiphysiques), d'actualité (des études et des projets récents traitent encore cette problématique) et avec à la clef non seulement des enjeux de compréhension, mais aussi des domaines d'applications industriels variés et très compétitifs. Le besoin d'outils numériques efficaces, facilitant la résolution et la simulation de différents procédés et processus, est présent.

La modélisation numérique peut se faire avec deux principales approches, différentes les unes des autres, et qui présentent, chacune, des avantages propres mais restent appropriées à un certain type d'étude. La première est la méthode multi-domaines, qui permet le suivi explicite de l'interface solide-liquide. Elle est appropriée à l'étude des changements de phase isothermes des corps purs. Elle sera donc utilisée pour simuler le changement de phase solide-liquide de l'étain pur au sein du benchmark 'Afrodite'. La deuxième méthode, la méthode enthalpique, permet la résolution d'un système unique d'équations sur tout le domaine étudié (contenant à la fois les deux phases solide et liquide), est mieux adaptée à l'étude des changements de phase non isothermes avec zone pâteuse. Elle sera utilisée pour modéliser les changements de phase des alliages binaires étudiés. Dans ce cadre là, des modèles de ségrégation lui seront associés, avec aussi un certain nombre d'hypothèses et de suppositions qui seront discutées au cas par cas.

Une remarque importante qui a été mentionnée par Hachani *et al.* [102] porte sur la reproductibilité des expériences de solidification. En effet, une étude statistique, portant sur la solidification de 8 lingots identiques de Sn-3wt.%Pb sous les mêmes conditions expérimentales, a permis de conclure que, bien que les résultats globaux de la solidification soient identiques (en termes de macrostructures globales), des différences non moindres subsistent entre les 8 lingots. Des fluctuations de la température dans le bain liquide en fin de solidification ainsi que des différences entre les répartitions des canaux ségrégés sont observées. En réalité, du fait du fort couplage entre les différents phénomènes physiques complexes mis en jeu (convection thermo-solutales, transferts de chaleurs et de masse, équilibre thermodynamique aux interfaces solide-liquide, rejet de chaleur latente...), des petites fluctuations de composition, même locales, et/ou des fluctuations des conditions aux limites peuvent entraîner des variations notables des champs de température et de concentration observés. Les simulations numériques pleinement 3D d'un tel processus, avec autant de phénomènes physiques couplés, restent onéreuses (en termes de moyen/temps de calcul) et de ce fait inappropriées aux études paramétriques qui elle nécessitent des modèles rapides et légers en termes de résolution, tout en gardant des résultats fiables. Dans la suite de ce travail, les chapitres II et III sont consacrés à l'expression et l'adaptation de modèles semi-empiriques, prenant en considérations

la tri-dimensionnalité des phénomènes dissipatifs, tout en gardant une formulation 2D. Ces modèles ont pour but d'être des outils fiables, avec une grande facilité/vitesse de résolution pour se prêter aux études paramétriques et/ou statistiques.



# Chapitre II

## Les Modèles $2D^{1/2}$ pour la Convection Naturelle

### Sommaire

---

<b>II.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>37</b>
<b>II.2</b>	<b>Présentation du modèle général 3D</b>	<b>38</b>
II.2.1	Configuration géométrique étudiée	38
II.2.2	Équations générales du modèle 3D	38
<b>II.3</b>	<b>Les modèles 2D et leurs limitations</b>	<b>40</b>
<b>II.4</b>	<b>Les modèles <math>2D^{1/2}</math></b>	<b>42</b>
<b>II.5</b>	<b>Ajustement du paramètre <math>\delta</math> dans le modèle <math>2D_H^{1/2}</math></b>	<b>45</b>
<b>II.6</b>	<b>Domaine de validité des modèles <math>2D^{1/2}</math></b>	<b>51</b>
<b>II.7</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>54</b>
<b>II.8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>59</b>

---

### II.1 Introduction

Dans ce chapitre nous nous intéressons à la convection naturelle se produisant au sein de la phase liquide quand celle-ci est soumise à un chauffage différentiel au sein du creuset du dispositif expérimental 'Afrodite'. Les modèles 3D pour la simulation de la convection naturelle en cavité confinée différentiellement chauffée se révèlent être très fiables là où les modèles 2D classiques captent mal la physique des phénomènes étudiés. Cependant, ces modèles 3D restent bien plus coûteux en temps de calcul. Pour prendre en compte la tridimensionnalité du champ de vitesse, une alternative aux simulations entièrement 3D est obtenue en intégrant les équations de mouvement le long de la direction transverse en supposant des formes bien déterminées pour les profils de vitesse, de température et de pression. Cette approche permet de réduire le problème 3D en un problème dit  $2D^{1/2}$ . Les différents modèles  $2D^{1/2}$  obtenus en fonction de la forme du profil de vitesse transverse supposé seront ici présentés. Un paramètre  $\delta$  permettant de faire varier ces profils est présenté. Contrairement à ce qui a été fait précédemment où une seule valeur de ce paramètre était considérée comme un compromis

entre un nombre limité de simulations, on montre dans ce chapitre que, pour chaque cas pratique, une seule valeur de ce paramètre permet d'optimiser les résultats des modèles  $2D^{1/2}$ . Les valeurs optimales  $\delta_{optimal}$  du paramètre  $\delta$  sont recherchées sur une large gamme de variation des paramètres de contrôle, recouvrant plusieurs situations pratiques. Une loi générale donnant l'évolution de  $\delta_{optimal}$  en fonction des paramètres de contrôle est finalement donnée, permettant directement l'utilisation optimale des modèles  $2D^{1/2}$  pour l'étude de la convection naturelle, mais aussi pour des cas de changement de phase solide-liquide qui sont reportés au chapitre suivant. Avant d'aboutir à cette loi générale, plusieurs comparaisons qualitatives et quantitatives sont faites entre les différents résultats obtenus avec les différents modèles 3D, 2D et  $2D^{1/2}$ . Un résultat important rapporté aussi dans ce chapitre est la définition d'un domaine de validité, sur l'espace de variation des paramètres de contrôle, des modèles  $2D^{1/2}$ . Dans ce domaine, les hypothèses permettant d'aboutir aux modèles  $2D^{1/2}$  sont respectées selon des critères plus rigoureux.

## II.2 Présentation du modèle général 3D

### II.2.1 Configuration géométrique étudiée

La configuration géométrique considérée dans cette étude est présentée sur la [figure II.1](#). C'est une cavité parallélépipédique différentiellement chauffée. Les dimensions sont choisies pour correspondre au creuset du benchmark expérimental 'Afrodite'. L'une des principales caractéristiques de cette cavité est son confinement dans la direction transverse  $x_3$ . Ses proportions fixes sont les suivantes :  $A_w = W/H = 1/6$  et  $A_l = L/H = 10/6$ , où  $L$  est la longueur suivant la direction  $x_1$  ( $L = 10$  cm),  $H$  est la hauteur suivant la direction  $x_2$  ( $H = 6$  cm) et  $W$  est la largeur suivant la direction  $x_3$  ( $W = 1$  cm). Les parois supérieure, inférieure et latérales sont adiabatiques, tandis que les deux parois verticales d'extrémité à  $x_1 = 0$  cm et  $x_1 = 10$  cm sont à des températures constantes imposées. La paroi d'extrémité à gauche (en rouge sur la [fig. II.1](#)) est à une température chaude  $T_h^*$  et la paroi d'extrémité à droite (en bleu sur la [fig. II.1](#)) est à une température froide  $T_c^*$ .

Un intérêt majeur est porté sur les matériaux à faible nombre de Prandtl (typiquement le cas des métaux liquides) qui seront pris en compte tout au long de cette étude. Dans un premier temps, c'est la convection naturelle initiée dans la cavité contenant exclusivement une phase liquide des matériaux choisis qui sera étudiée. Des cas de changement de phase solide-liquide seront ensuite examinés.

### II.2.2 Équations générales du modèle 3D

Le problème traité est défini par les équations de conservation de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la masse. Les seuls paramètres de contrôle pour l'étude de la convection naturelle au sein de la géométrie présentée sont le nombre de Prandtl :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}, \quad (\text{II.1})$$



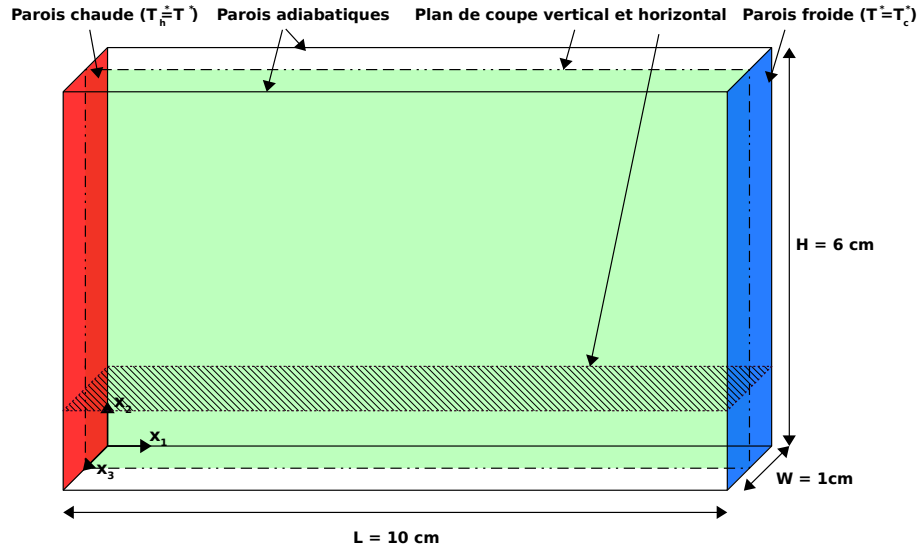


FIGURE II.1 : Configuration géométrique étudiée : Cavité parallélépipédique différentiellement chauffée où les parois d'extrémité verticales à droite et à gauche sont maintenues à des températures constantes,  $T_c^*$  et  $T_h^*$  respectivement. Les autres parois sont adiabatiques. Les plans caractéristiques sont le plan de coupe vertical central (vert) et un plan de coupe horizontal (noir hachuré).

et le nombre de Grashof :

$$Gr = \frac{g\beta(\Delta T^*/L)H^4}{\nu^2}, \quad (\text{II.2})$$

où  $\nu$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  sont respectivement la viscosité cinématique, la diffusivité thermique et le coefficient d'expansion thermique. La différence de température entre la paroi chaude et la paroi froide de la cavité est notée  $\Delta T^* = T_h^* - T_c^*$ .

Les équations de conservation 3D sont exprimées sous leur forme adimensionnelle, obtenue en utilisant respectivement  $\nu/H$ ,  $H$ ,  $H^2/\nu$ ,  $\rho(\nu/H)^2$  et  $\Delta T^*$  comme grandeurs caractéristiques pour la vitesse, la longueur, le temps, la pression et la température. Pour un fluide newtonien incompressible sous l'approximation de Boussinesq, elles sont :

— L'équation de conservation de la masse :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{II.3})$$

où  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$  est la vitesse adimensionnelle.

— L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla u_i = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + A_i Gr \theta \delta_{i,2} + \nabla^2 u_i \quad \text{pour } i = 1, 2 \text{ et } 3, \quad (\text{II.4})$$

où  $t$  et  $p$  sont respectivement le temps et la pression adimensionnels. Le terme de flottabilité fait apparaître le nombre de Grashof, et la proportion longueur/hauteur ; il n'intervient que sur la direction verticale  $x_2$  ce qui est traduit ici grâce au symbole de

Kronecker  $\delta_{i,2}$ .

— L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta, \quad (\text{II.5})$$

où le terme diffusif contient le nombre de Prandtl et où  $\theta$  est la température adimensionnelle :

$$\theta = [T^* - 1/2(T_h^* + T_c^*)]/\Delta T^*$$

Les conditions aux limites thermiques pour  $\theta$  sont les suivantes :  $\theta = 0.5$  sur la paroi chaude en  $x_1 = 0$ ,  $\theta = -0.5$  sur la paroi froide en  $x_1 = L/H = A_l$  et  $\frac{\partial \theta}{\partial n} = 0$  sur toutes les autres parois.

### II.3 Les modèles 2D et leurs limitations

Les équations du problème précédemment définies peuvent être résolues en 2D dans le plan  $(x_1, x_2)$  si l'on suppose que les grandeurs sont invariantes selon  $x_3$ . Pour cela il suffit juste de limiter la variation de l'indice  $i$  dans l'équation II.4 de 1 à 2 et d'exprimer le laplacien et la divergence dans les équations de conservation en 2D seulement. La cavité est réduite à un rectangle de hauteur  $A_H = 1$  et de largeur  $A_l = L/H = 10/6$ . Bien que le domaine ne soit pas infini selon  $x_3$ , cette simplification du problème peut paraître suffisante, car le gradient thermique imposé est longitudinal (suivant  $x_1$ ). Elle est implicitement proposée par Fautrelle *et al.* [91, 92, 99] qui présentent leur benchmark comme étant une expérience quasi-2D du fait du confinement latéral de la cavité 3D. Pour vérifier la validité de cette approche les résultats du modèle 2D et celui du modèle 3D sont comparés. Deux cas sont rapportés ci-dessous, dans le premier  $Pr = 0.01$   $Gr = 10^7$  (fig. II.2) et dans le second  $Pr = 0.001$   $Gr = 10^7$  (fig. II.3).

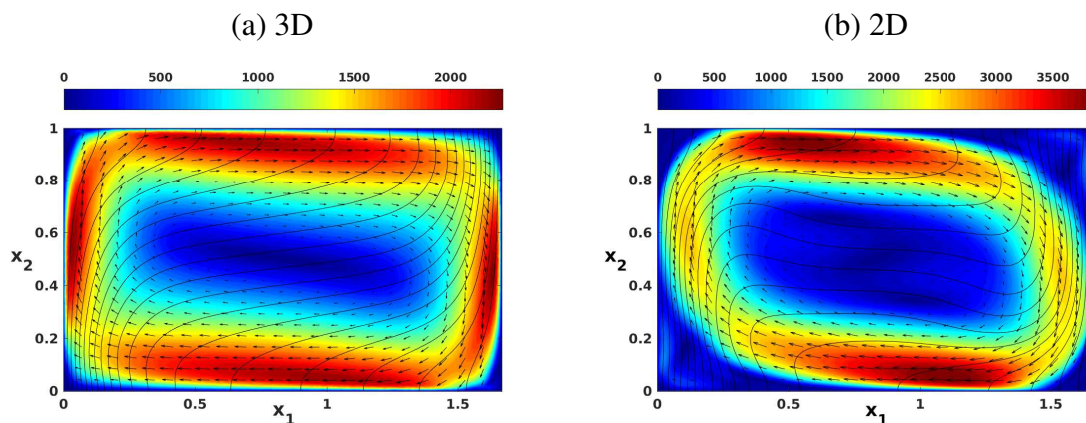


FIGURE II.2 : Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes) pour  $Pr = 10^{-2}$  et  $Gr = 10^7$  obtenus avec : (a) modèle 3D moyenné suivant la direction  $x_3$  et (b) modèle 2D. La solution obtenue avec le modèle 3D est stationnaire alors que la solution 2D ne l'est pas.

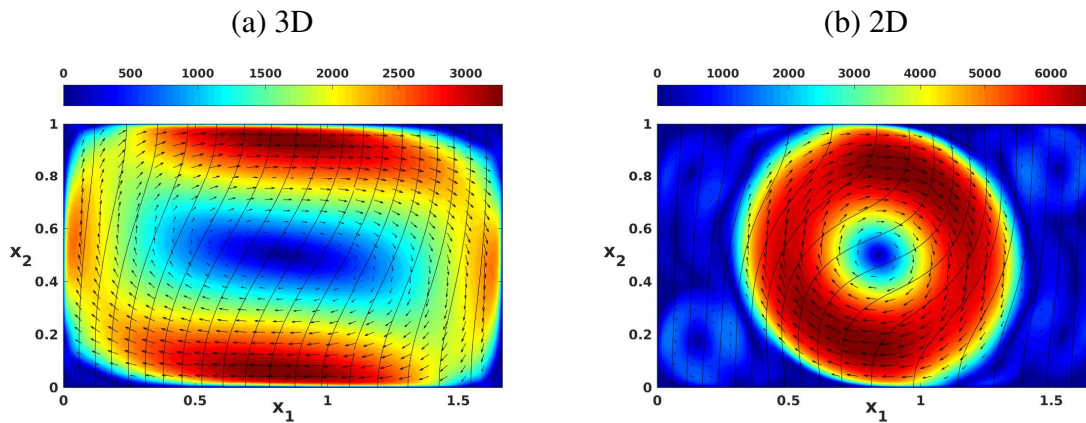


FIGURE II.3 : Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes) pour  $Pr = 10^{-3}$  et  $Gr = 10^7$  obtenus avec : (a) modèle 3D moyenné suivant la direction  $x_3$  et (b) modèle 2D. Les deux solutions sont stationnaires.

Les figures II.2(a) et II.3(a) rapportent les résultats obtenus avec le modèle 3D et moyennés suivant la direction  $x_3$ , tandis que les figures II.2(b) et II.3(b) montrent les résultats obtenus avec le modèle 2D. Sur toutes ces figures les champs de vitesse sont indiqués en niveaux d'intensité colorés et en vecteurs, et les champs de température sont représentés par des isothermes noires.

Pour les deux cas considérés, le contraste entre les résultats 2D et 3D est très marqué. Dans les deux cas, le modèle 2D donne un écoulement hautement convectif avec des intensités de vitesse nettement supérieures à celle du modèle 3D. En plus de cela, le modèle 2D donne à chaque fois des zones de recirculation de tailles importantes. Pour le cas  $Pr = 0.01$ , deux zones principales apparaissent, l'une dans le coin supérieur droit près de la paroi froide et l'autre dans le coin inférieur gauche près de la paroi chaude (voir fig. II.2(b)) ; tandis que pour  $Pr = 0.001$ , elles sont encore plus nombreuses et se situent près des parois (voir fig. II.3(b)). Ces zones de recirculation et leur nombre affectent la forme de la boucle de convection principale qui change nettement entre  $Pr = 0.01$  et  $Pr = 0.001$ . Le modèle 3D donne, dans les deux cas, des circulations convectives plus allongées avec des amplitudes de vitesse inférieures à celles obtenues avec le modèle 2D. La différence de la structure de l'écoulement entre ces deux cas est moins prononcée que celle du modèle 2D. En effet la structure de l'écoulement reste plus ou moins similaire pour les deux résultats 3D où elle est allongée. Ces différences dans les champs de vitesse entre les modèles entraînent également des différences dans les champs de température. En effet, les isothermes 2D sont très déformées par rapport aux isothermes 3D, notamment dans les régions où la vitesse est maximale dans les résultats 2D. De plus, à ces valeurs des paramètres de contrôle, les solutions 2D restent instationnaires alors que les simulations 3D atteignent des états stationnaires. L'incapacité du modèle 2D à prédire les champs de vitesse et de température (comme déjà rapporté par Botton *et al.* [103]) est clairement illustrée ici. Cela confirme que le modèle 2D, bien qu'intéressant en termes de temps de simulation, n'est pas fiable pour l'étude de la convection naturelle dans une telle cavité confinée. Les parois latérales affectent très nettement la structure de l'écoulement obtenu. L'adhérence du liquide à ces parois induit des effets dissipatifs qui modifient

à la fois le champ de vitesse et le champ de température. Ces effets dissipatifs sont bien pris en compte dans le modèle 3D, mais sont absents du modèle 2D.

## II.4 Les modèles 2D<sup>1/2</sup>

Afin de prendre en compte les effets dissipatifs induits par les parois latérales sans perdre les principaux avantages de la modélisation 2D en termes de temps et de coût de calcul, des modèles 2D<sup>1/2</sup> sont proposés [103]. Ces modèles ouvrent la possibilité de faire des études paramétriques à grande échelle. Ils sont obtenus en moyennant les équations de conservation de la quantité de mouvement, de la masse et de la chaleur (Éqs II.4 et II.5) dans la direction  $x_3$ . Pour cela, on suppose à la fois une température constante dans cette direction et un profil de vitesse transverse bien défini.

Supposer que la température est constante sur  $x_3$  est réaliste pour les faibles valeurs du nombre de Prandtl correspondant aux métaux liquides et aux alliages métalliques, et cela l'est encore plus du fait que la cavité est confinée et que le gradient thermique imposé est longitudinal. Cette hypothèse est vérifiée plus en détail dans la section II.6. La figure II.4 montre le champ de température (isothermes rouges) et les variations de  $u_1$ , la première composante de la vitesse, sur le plan de coupe horizontal (plan en hachuré sur la figure II.1). Ces champs sont ceux obtenus avec le modèle 3D pour les deux cas ( $Pr = 0.01$ ,  $Gr = 10^7$ ) et ( $Pr = 0.001$ ,  $Gr = 10^7$ ). On voit bien que les isothermes restent quasi-constantes sur  $x_3$ , indiquant que le champ de température est principalement 2D, dépendant seulement de  $x_1$  et  $x_2$ .

Pour la vitesse  $u_1$ , les choses sont différentes, car elle est nulle aux parois (en  $x_3 = 0$  et  $x_3 = A_w$ ) et croît en s'éloignant d'elles pour atteindre une valeur qui reste quasi-uniforme sur le reste de l'épaisseur. Dans les modèles 2D<sup>1/2</sup>, les vitesses  $u_1$  et  $u_2$  sont exprimées sous la forme du produit d'une fonction  $f(x_3)$  donnant la forme de leur profil transverse et d'une fonction de  $x_1$  et  $x_2$  donnant leur variation dans le plan vertical longitudinal (Éq. II.6). La figure II.5 montre les différentes fonctions  $f(x_3)$  utilisées dans les modèles 2D<sup>1/2</sup> et qui permettent d'approcher différents profils allant du profil parabolique de Poiseuille à des profils plus aplatis se rapprochant plus des formes obtenues par le modèle 3D et représentées sur la figure II.4. La formulation de ces fonctions est donnée plus loin ci-dessous.

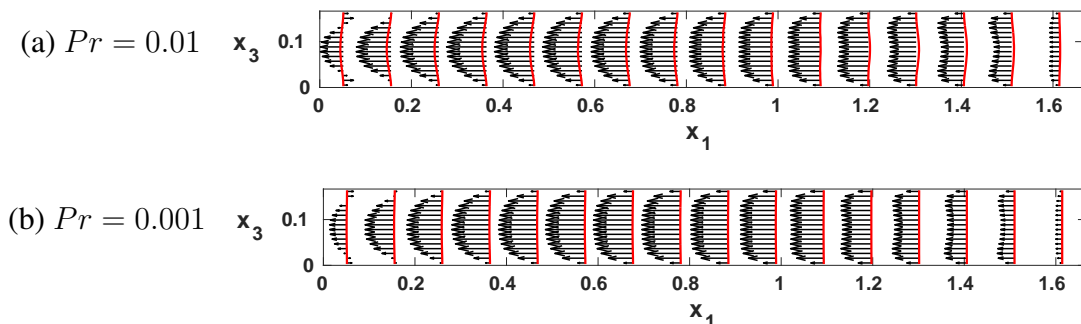


FIGURE II.4 : Champs de la première composante de vitesse  $u_1$  (vecteurs) et de température (isothermes en rouge) obtenus avec le modèle 3D sur le plan de coupe horizontal (voir figure II.1). (a) :  $Gr = 10^7$  et  $Pr = 0.01$ , (b) :  $Gr = 10^7$  et  $Pr = 0.001$ .

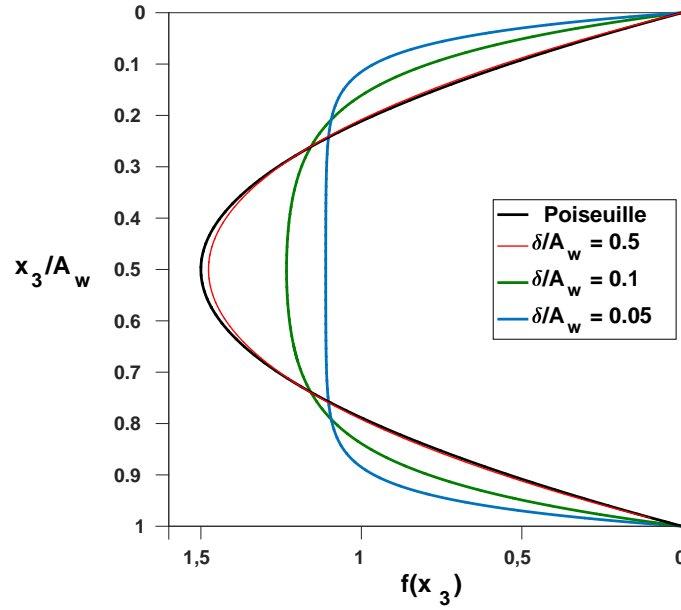


FIGURE II.5 : Différents profils utilisés pour modéliser les variations de la vitesse le long de la direction transverse.

Grâce aux hypothèses considérées, les variables des équations de conservation 3D (Éq. II.3, II.4 et II.5) s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 \theta(x_1, x_2, x_3, t) &= \bar{\theta}(x_1, x_2, t), \\
 u_i(x_1, x_2, x_3, t) &= \bar{u}_i(x_1, x_2, t) f(x_3) \text{ pour } i = 1 \text{ et } 2, \\
 u_3 &= 0, \\
 p(x_1, x_2, x_3, t) &= \bar{p}(x_1, x_2, t) g(x_3),
 \end{aligned}
 \tag{II.6}$$

où  $\bar{u}$ ,  $\bar{p}$  et  $\bar{\theta}$  sont les valeurs moyennes de la vitesse, de la pression et de la température le long de la direction  $x_3$ , et sont des fonctions de  $x_1$ ,  $x_2$  et  $t$  seulement. Les fonctions  $f(x_3)$  et  $g(x_3)$  donnent respectivement la forme des profils transverses de vitesse et de pression. On a pour chacune des deux :

$$\frac{1}{A_w} \int_0^{A_w} f(x_3) dx_3 = \frac{1}{A_w} \int_0^{A_w} g(x_3) dx_3 = 1.
 \tag{II.7}$$

En remplaçant les variables  $\theta$ ,  $u_i$  et  $p$  des équations 3D (Éq. II.3, II.4 et II.5) par leur définition dans l'Éq. II.6 et en intégrant ces équations sur l'épaisseur  $x_3$ , on aboutit aux équations des modèles 2D<sup>1/2</sup> :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{u}_i = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + A_l Gr \bar{\theta} \delta_{i,2} + \nabla^2 \bar{u}_i + S_i \text{ pour } i = 1, \text{ et } 2,
 \tag{II.8}$$

$$\frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\theta} = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \bar{\theta},
 \tag{II.9}$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0, \quad (\text{II.10})$$

où le terme  $S_i$  dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Éq. II.8) est la seule différence entre le modèle 2D classique et les modèles 2D<sup>1/2</sup>. Ce terme source résultant de l'intégration est exprimé par :

$$S_i = \left[ 1 - \frac{1}{A_w} \int_0^{A_w} f^2(x_3) dx_3 \right] \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{u}_i + \frac{1}{A_w} \left[ \frac{\partial f(x_3)}{\partial x_3} \right]_0^{A_w} \bar{u}_i. \quad (\text{II.11})$$

Le terme  $S_i$  dépend donc de la fonction  $f(x_3)$  choisie. Deux modèles 2D<sup>1/2</sup> différents ont été testés, basés sur différentes fonctions  $f(x_3)$  pour le profil de vitesse le long de  $x_3$ . Le premier modèle (appelé modèle 2D<sub>P</sub><sup>1/2</sup> où l'indice  $P$  fait référence à Poiseuille) est basé sur le profil parabolique de Poiseuille (voir fig. II.5 et II.11) et est donné par :

$$f_P(x_3) = \frac{6}{A_w^2} (A_w - x_3)x_3. \quad (\text{II.12})$$

En utilisant cette fonction dans l'équation II.11 on calcule le terme source  $S_i$ , notée  $S_{P,i}$ , du modèle 2D<sub>P</sub><sup>1/2</sup> :

$$S_{P,i} = -\frac{1}{5} \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{u}_i - \frac{12}{A_w^2} \bar{u}_i. \quad (\text{II.13})$$

Le second modèle (appelé modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> où l'indice  $H$  fait référence à Hartmann) est basé sur un profil de type Hartmann présentant deux régions assimilables à des couches limites le long des parois latérales et une vitesse quasi-uniforme entre les deux. La fonction  $f(x_3)$  pour ce modèle est notée  $f_H(x_3)$  et s'exprime comme suit :

$$f_H(x_3) = F \left[ 1 - \frac{\cosh\left(\frac{x_3 - \frac{A_w}{2}}{\delta}\right)}{\cosh\left(\frac{A_w}{2\delta}\right)} \right] \text{ où } F = \frac{1}{1 - \frac{2\delta}{A_w} \tanh\left(\frac{A_w}{2\delta}\right)}. \quad (\text{II.14})$$

Dans cette fonction apparaît un paramètre ajustable  $\delta$  qui permet de définir plusieurs formes de profils transverses (voir fig. II.5 et II.11). En utilisant cette fonction  $f_H(x_3)$  dans l'équation II.11, on calcule le terme source  $S_i$ , notée  $S_{H,i}$ , du modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> :

$$S_{H,i} = \left\{ 1 - F^2 \left[ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \tanh^2\left(\frac{A_w}{2\delta}\right) - \frac{3\delta}{A_w} \tanh\left(\frac{A_w}{2\delta}\right) \right] \right\} \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{u}_i - F \left[ \frac{2}{\delta A_w} \tanh\left(\frac{A_w}{2\delta}\right) \right] \bar{u}_i. \quad (\text{II.15})$$

Cette approche a permis de réduire le problème d'une formulation 3D à des modèles 2D<sup>1/2</sup> très similaires au modèle 2D classique, mais avec des termes sources bien définis en plus. Ces termes sources permettent la prise en compte de la variation transverse de la vitesse. Dans ces modèles 2D<sup>1/2</sup>, toutes les dépendances en  $x_3$  des variables ont disparu. Cette formulation 2D<sup>1/2</sup> est du même type que la formulation shallow-water, utilisée en particulier dans le domaine de l'hydraulique à surface libre.

Dans ce chapitre, tous les modèles 3D, 2D, 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> et 2D<sub>P</sub><sup>1/2</sup> ont été implémentés sous *COMSOL Multiphysics 5.0*. Les équations sont discrétisées en utilisant des éléments finis du

premier ordre pour la vitesse, la pression et la température. Les options 'streamline' et 'cross-wind diffusion' sont utilisées comme méthodes de stabilisation. Le générateur de maillage 'Delaunay-based' est utilisé pour générer les différentes mailles : la triangulation de Delaunay est utilisée pour les modèles 2D et la tétraédrisation de Delaunay pour le modèle 3D. La méthode implicite d'itération utilisée par le solveur temporel est 'Free BDF' (free backward differentiation formula). Pour les modèles 2D, un solveur 'Fully coupled' est utilisé. À chaque pas de temps, le problème non linéaire est résolu par une méthode de Newton avec une matrice jacobienne actualisée, les corrections linéaires de Newton sont obtenues avec le solveur PARDISO (Parallel Sparse Direct Solver). En revanche pour les modèles 3D, un solveur ségrégué est utilisé. La méthode de Newton est toujours appliquée à chaque pas de temps, mais séparément pour les différentes variables et avec une actualisation minimale de la matrice Jacobienne. Les corrections de Newton sont obtenues par le solveur itératif (GMRES) pour les vitesses et la pression et par le solveur direct (PARDISO) pour la température. Plusieurs raffinements de maillage ont été utilisés dans les différents modèles, et le raffinement minimum assurant l'indépendance de la solution obtenue par rapport aux raffinements de maillage supplémentaires a été utilisé.

Les résultats obtenus avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  et le modèle  $2D_P^{1/2}$  pour le cas  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^7$  sont respectivement présentés sur la [figure II.6\(c\)](#) et la [figure II.6\(d\)](#). Une amélioration des champs de vitesse et de température, qui sont maintenant plus proches des champs 3D, est constatée pour les deux modèles  $2D^{1/2}$ . La plus grande intensité de vitesse observée dans le modèle purement 2D est réduite et les zones de recirculation ont disparu. La prise en compte de la dissipation d'énergie supplémentaire induite par l'adhérence aux parois latérales dans ces modèles  $2D^{1/2}$  a considérablement amélioré les résultats. Une autre comparaison des résultats montre que le modèle  $2D_H^{1/2}$  donne une prédiction plus précise du champ de vitesse et du champ de température que le modèle  $2D_P^{1/2}$ . En effet, un examen plus attentif des isothermes montre qu'il existe encore des différences entre le champ de température  $2D_P^{1/2}$  et le champ de température 3D, tandis qu'une prédiction presque parfaite est obtenue avec le modèle  $2D_H^{1/2}$ . Comme indiqué par Botton et al. [103], le modèle  $2D^{1/2}$  avec un profil de type Hartmann pour décrire la variation transverse de la vitesse est plus adapté à l'étude de la convection naturelle de fluides à faible nombre de Prandtl dans une telle cavité confinée que le profil de Poiseuille. Cependant, il est important de noter que le profil de type Hartmann utilisé dans ce cas précis a été ajusté en choisissant une valeur optimale pour le paramètre  $\delta$ . La méthode d'ajustement de ce paramètre est expliquée dans la section suivante.

## II.5 Ajustement du paramètre $\delta$ dans le modèle $2D_H^{1/2}$

Pour les fluides à faible nombre de Prandtl, quelle que soit la valeur du nombre de Grashof, le paramètre  $\delta$  peut être optimisé afin d'obtenir la meilleure correspondance possible entre les résultats du modèle  $2D_H^{1/2}$  et les résultats du modèle 3D. Le but est d'obtenir une carte, de la forme :  $\delta_{optimal} = h(Pr, Gr)$ , donnant les valeurs de  $\delta_{optimal}$  en fonction des paramètres de contrôle. Pour des nombres de Prandtl et Grashof ( $Pr, Gr$ ) donnés, nous examinons donc l'influence du paramètre  $\delta$  sur la précision du modèle  $2D_H^{1/2}$  par rapport au modèle 3D. La comparaison est effectuée via l'erreur relative entre les champs de température 2D et 3D. Cette erreur relative est estimée sur les valeurs de la température adimensionnelle  $\theta$  sur un

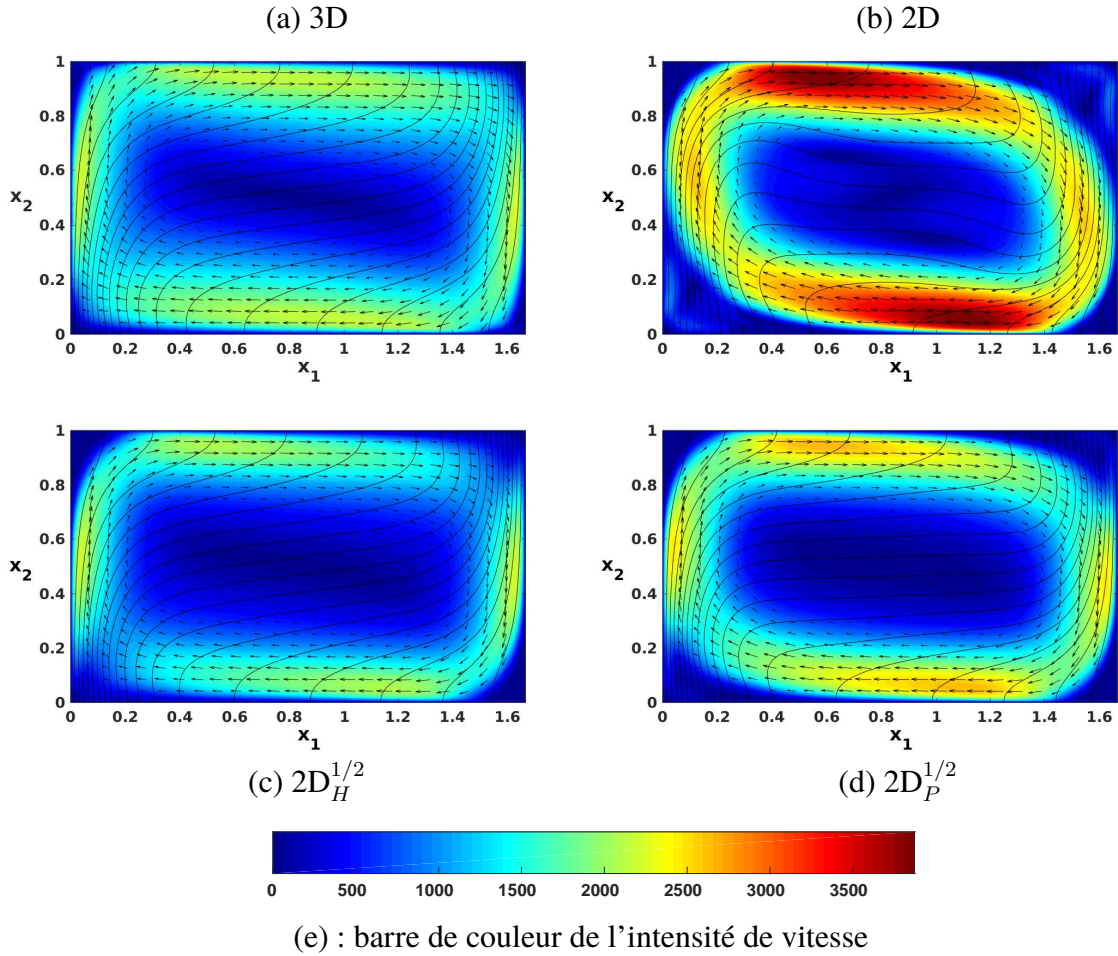


FIGURE II.6 : Champs de vitesse (niveaux d'intensité et vecteurs) et champs de température (isothermes noires) pour  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^7$  obtenus avec les différents modèles : (a) modèle 3D (moyenné suivant  $x_3$ ), (b) modèle 2D (snapshot), (c) modèle  $2D_H^{1/2}$  avec un profil de vitesse transverse de type Hartmann et (d) modèle  $2D_P^{1/2}$  avec un profil de Poiseuille pour la vitesse transverse. Les solutions obtenues avec les modèles 3D,  $2D_H^{1/2}$  et  $2D_P^{1/2}$  sont stationnaires, alors que la solution 2D ne l'est pas.

ensemble de points de comparaison.

En pratique, cet ensemble de points de comparaison consiste en une grille régulière de  $50 \times 30$ , définie dans le plan de la simulation 2D d'un côté et dans le plan médian vertical des simulations 3D de l'autre. La grille utilisée a été testée et elle est suffisamment fine pour permettre une comparaison précise. L'erreur relative est donnée par le champ 2D  $\Delta(2D)$  défini sur la grille par :

$$\Delta_i(2D) = \{|\theta_{3D}(i) - \theta_{2D}(i)|\} = \left\{ \frac{|T_{3D}^*(i) - T_{2D}^*(i)|}{\Delta T^*} \right\} \text{ pour } i = 1, 1500 \quad (\text{II.16})$$

où  $i$  est l'indice des points de la grille. Cette erreur est estimée pour le modèle purement 2D, le modèle  $2D_P^{1/2}$  et le modèle  $2D_H^{1/2}$ .

La figure II.7 donne les contours de  $\Delta$  (l'erreur relative en température entre le modèle choisi



et le modèle 3D) des trois modèles  $2D$ ,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$  pour le cas  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^7$ . La [figure II.7\(a\)](#) donne les contours de  $\Delta(2D)$  au sein de la cavité. Cette erreur varie entre 0 et 18% et est assez importante. Cela confirme encore la faiblesse du modèle  $2D$  à prédire de bons résultats et se rapprocher au mieux des résultats 3D. La [figure II.7\(b\)](#) montre les contours de  $\Delta(2D_P^{1/2})$ . Avec le modèle  $2D_P^{1/2}$ , l'erreur en température est réduite, l'écart maximum avec les résultats 3D n'est plus que de 8%.

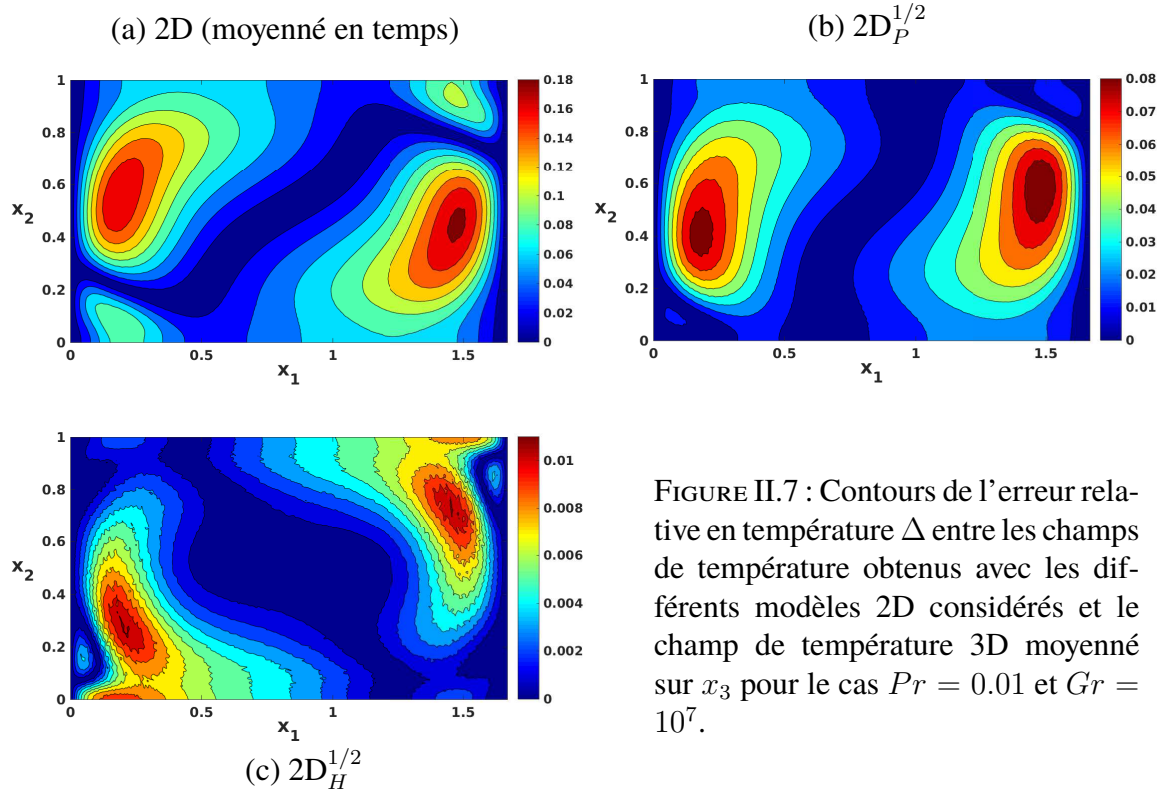


FIGURE II.7 : Contours de l'erreur relative en température  $\Delta$  entre les champs de température obtenus avec les différents modèles  $2D$  considérés et le champ de température  $3D$  moyenné sur  $x_3$  pour le cas  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^7$ .

La [figure II.7\(c\)](#) montre les contours de  $\Delta(2D_H^{1/2})$ . L'erreur en température par rapport au modèle  $3D$  est réduite avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  à sa plus faible valeur, l'écart maximum avec les résultats  $3D$  n'est plus que de 1.1%.

Le modèle  $2D_H^{1/2}$  utilisé pour cette figure est celui prenant en compte la valeur optimale du paramètre  $\delta$ . Quand  $\delta$  varie, les profils transverses considérés varient aussi ([figure II.5](#)), cela aboutit à autant de contours de l'erreur en température  $\Delta$  que de valeurs du paramètre  $\delta$  utilisées. On définit ici l'erreur relative maximale en température entre le modèle considéré et le modèle  $3D$  comme étant la valeur maximale de  $\Delta$  sur l'ensemble des points de comparaison de la grille définieci-dessus, et elle est donc donnée par :

$$\Delta_{max}(2D) = \text{Max}(\Delta_i(2D)) \text{ pour } i = 1, 1500 \quad (\text{II.17})$$

La variation de  $\Delta_{max}$  avec  $\delta$  pour le modèle  $2D_H^{1/2}(\delta)$  est indiquée sur la [figure II.8](#) pour  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^6$  et sur la [figure II.9](#) pour  $Pr = 0.004$  et  $Gr = 10^7$ . Ces figures montrent aussi, pour chaque cas, les erreurs maximales obtenues avec le modèle purement  $2D$  et le modèle  $2D_P^{1/2}$  (droites noire et rouge respectivement).

Les [figures II.8](#) et [II.9](#) montrent qu'il n'y a qu'une seule valeur de  $\delta$  minimisant l'erreur

## II.5. AJUSTEMENT DU PARAMÈTRE $\delta$ DANS LE MODÈLE $2D_H^{1/2}$

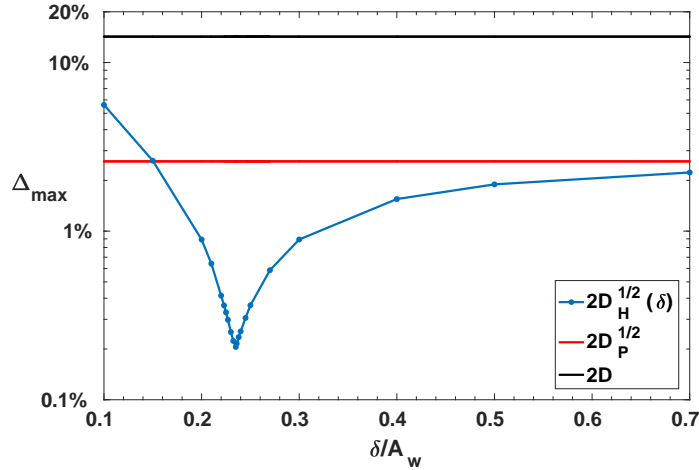


FIGURE II.8 : Erreurs relatives maximales en température  $\Delta_{max}$  des différents modèles comparés au champ de température 3D sur le plan de coupe central pour  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^6$ . Courbe bleue : variation de  $\Delta_{max}$  avec la variation du paramètre  $\delta$  pour le modèle  $2D_H^{1/2}$  ; ligne orange :  $\Delta_{max}$  pour le modèle  $2D_P^{1/2}$  ; ligne noire :  $\Delta_{max}$  pour le modèle 2D.

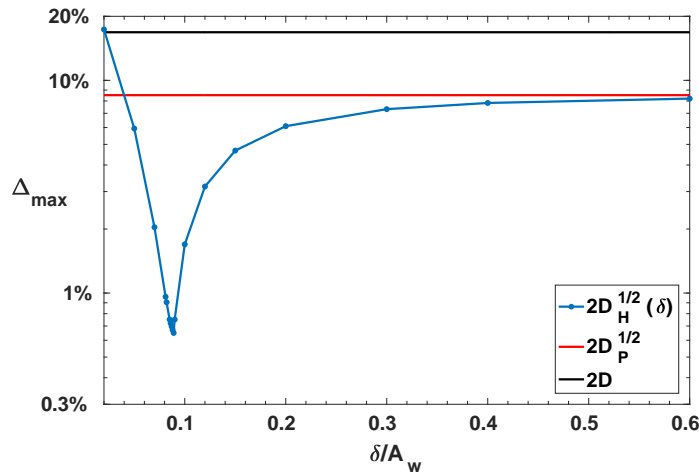


FIGURE II.9 : Erreurs relatives maximales en température  $\Delta_{max}$  des différents modèles comparés au champ de température 3D sur le plan de coupe central pour  $Pr = 0.004$  et  $Gr = 10^7$ . Courbe bleue : variation de  $\Delta_{max}$  avec la variation du paramètre  $\delta$  pour le modèle  $2D_H^{1/2}$  ; ligne orange :  $\Delta_{max}$  pour le modèle  $2D_P^{1/2}$  ; ligne noire :  $\Delta_{max}$  pour le modèle 2D.

relative maximale en température  $\Delta_{max}$ . Cette valeur de  $\delta$  est notée  $\delta_{optimal}$ . Pour le cas  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^6$ ,  $\delta_{optimal} = 0.235 \times A_w$ . Le modèle  $2D_H^{1/2}(\delta_{optimal})$  donne un champ de température avec une erreur relative maximale  $\Delta_{max}$  de 0.206% par rapport au champ de température 3D, alors que le  $2D_P^{1/2}$  et les modèles purement 2D donnent respectivement une erreur relative maximale en température de 2.6% et 14.2%. Ce constat est le même pour le second cas  $Pr = 0.004$  et  $Gr = 10^7$  où on trouve  $\delta_{optimal} = 0.089 \times A_w$ . Le modèle  $2D_H^{1/2}(\delta_{optimal})$  donne un champ de température avec une erreur relative maximale  $\Delta_{max}$  de 0.65%

par rapport au champ de température 3D, alors que le modèle  $2D_P^{1/2}$  et le modèle purement 2D donnent respectivement une erreur relative maximale en température de 8.5% et 16.8%.

Pour ce second cas ( $Pr = 0.04$  et  $Gr = 10^7$ ) et afin de mieux visualiser la différence entre les résultats obtenus avec les différents modèles, on trace les profils de température à mi-hauteur de la cavité ( $x_2 = 0.5$ ) le long de  $x_1$ . Ces profils sont représentés sur la [figure II.10](#). La valeur de  $\delta$  utilisée dans le modèle  $2D_H^{1/2}$  est la valeur optimale  $\delta_{optimal} = 0.089 \times A_w$  trouvée précédemment.

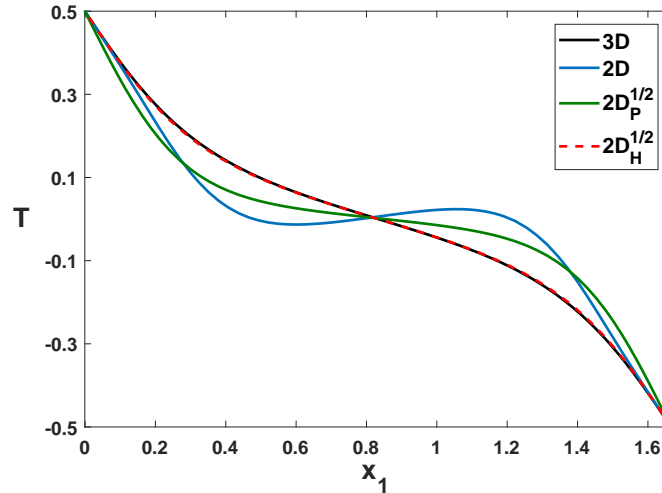


FIGURE II.10 : Profils de température le long de  $x_1$  à mi-hauteur de la cavité ( $x_2 = 0.5$ ), obtenus avec les différents modèles étudiés.

La [figure II.10](#) confirme bien que le modèle  $2D_H^{1/2}$  est celui qui prédit le mieux les résultats 3D. En effet le profil  $2D_H^{1/2}$  et le profil 3D sont en très bon accord et quasiment superposés. Le profil 2D est très différent du profil 3D et présente même une inversion du signe du gradient horizontal de température dans la partie centrale de la cavité. Cette inversion est due à la forte intensité convective dans le résultat 2D. La [figure II.10](#) montre aussi que le modèle  $2D_P^{1/2}$  donne un profil de température plus proche du profil 3D que ne l'est le profil 2D, mais une différence non négligeable est toujours présente.

Le changement de la valeur du paramètre  $\delta$  modifie la forme du profil de vitesse transverse supposé dans la formulation  $2D_H^{1/2}$ . Les différentes formes de ce profil impliquent une contribution différente de l'effet de paroi sur l'intensité de l'écoulement convectif dans la cavité. Comme dans le cas présenté sur les [figures II.8](#) et [II.9](#), pour toutes les valeurs de  $Gr$  et  $Pr$ , il n'existe qu'une seule valeur de  $\delta$ ,  $\delta_{optimal}$ , optimisant la prise en compte des effets des parois latérales et minimisant donc l'écart avec les résultats 3D.

Botton et al. [103] n'ont donné que deux valeurs de  $\delta_{optimal}$ ,  $\delta_{optimal} = 0.1 \times A_w$  pour le cas  $Gr = 1.296 \times 10^7$  et  $Pr = 0.0047$ , et  $\delta_{optimal} = 0.15 \times A_w$  pour le cas  $Gr = 4.34 \times 10^6$  et  $Pr = 0.0129$ . Ils ont également suggéré d'utiliser la deuxième valeur de  $\delta_{optimal}$  pour les autres cas ( $Gr, Pr$ ), la présentant comme un bon compromis pour mieux approcher les autres résultats 3D. La [figure II.8](#) montre que, pour la valeur  $\delta = 0.1 \times A_w$  pour le cas  $Pr = 0.01$  et  $Gr = 10^7$ , l'erreur  $\Delta_{max}$  obtenue avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  est de 6.7%. Bien que cette erreur soit inférieure à celle donnée par le modèle 2D, elle est supérieure à celle donnée par le modèle

## II.5. AJUSTEMENT DU PARAMÈTRE $\delta$ DANS LE MODÈLE $2D_H^{1/2}$

$2D_P^{1/2}$  et bien plus grande que celle obtenue avec  $\delta_{optimal}$  ajusté pour ce cas là. La différence entre les valeurs optimales du paramètre  $\delta$  d'un cas à un autre indiquent que  $\delta_{optimal}$  est bien fonction du cas considéré, *i.e.* de la valeur des paramètres de contrôle que sont le nombre de Prandtl et le nombre de Grashof.

Dans le présent travail, une large gamme de nombres de Grashof et de Prandtl est étudiée. Le nombre de Prandtl est incrémenté de  $Pr = 10^{-3}$  à  $Pr = 10$ , incluant une grande variété de fluides, des métaux liquides aux gaz, tandis que le nombre de Grashof est compris dans la gamme de  $10^3 \leq Gr \leq 5 \times 10^7$ . Pour obtenir la carte  $\delta_{optimal} = g(Pr, Gr)$ , la valeur de  $\delta_{optimal}$  est d'abord déterminée comme décrit sur la [figure II.8](#) pour chaque paire  $(Pr, Gr)$ .

La [figure II.5](#) est reprise ici dans la [figure II.11](#). Elle donne la forme des profils supposés pour modéliser les différents profils de vitesse transverse le long de  $x_3$ . Le profil de Poiseuille parabolique donné par l'Éq. II.12, ainsi que différents profils de type Hartmann exprimés par l'Éq. II.14 et obtenus pour plusieurs valeurs de  $\delta$ , sont tracés. On observe qu'en faisant varier la valeur de  $\delta$ , on peut passer de profils très plats (comme pour  $\delta/A_w = 0.052$ ) à des profils proches du profil de Poiseuille (comme pour  $\delta/A_w = 0.5$ ). Un examen plus approfondi des profils sur la [figure II.11\(b\)](#) révèle que de légères différences par rapport au profil de Poiseuille subsistent pour  $\delta = 0.5$ . et que ces différences peuvent encore être diminuées pour de plus grandes valeurs de  $\delta$ . Les variations des profils choisis affectent le terme source noté  $S_i$  dans

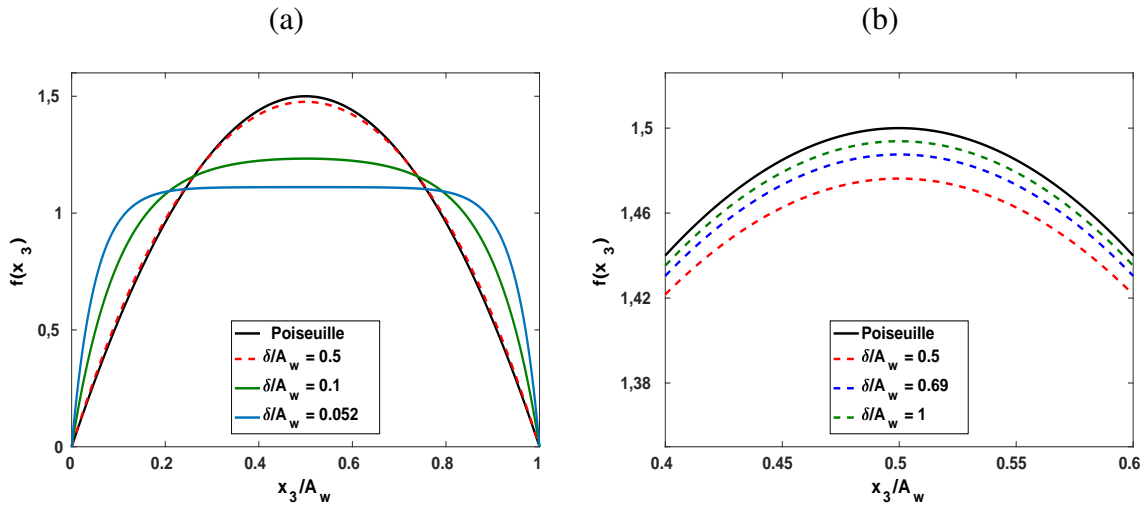


FIGURE II.11 : Les profils utilisés lors de l'approche  $2D^{1/2}$  pour modéliser les variations de vitesse le long de la direction transverse  $x_3$  : Le profil parabolique de Poiseuille utilisé dans le modèle  $2D_P^{1/2}$  et les profils de type Hartmann (dépendant de la valeur de  $\delta$ ) utilisés dans le modèle  $2D_H^{1/2}$ . (a) Vue générale des profils ; (b) zoom pour de plus grandes valeurs de  $\delta$ .

l'Éq. II.8 et exprimé par l'Éq. II.15 pour le modèles  $2D_H^{1/2}$  et l'Éq. II.13 pour le modèle  $2D_P^{1/2}$ . L'expression de  $S_i$  peut s'écrire sous une forme plus générale :

$$S_i = a \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{u}_i + b \bar{u}_i, \quad (\text{II.18})$$

où  $a$  et  $b$  sont des constantes dans le cas du modèle  $2D_P^{1/2}$  et sont des fonctions de  $\delta$  dans le modèle  $2D_H^{1/2}$ .

Le [Tableau II.1](#) compare les valeurs de  $a$  et  $b$  dans l'Éq. II.18 pour les valeurs élevées de  $\delta$  et celles du modèle de type Poiseuille. Les légères différences montrées sur la [figure II.11\(b\)](#) influencent les valeurs de  $a$  et  $b$ . Ces valeurs, en modifiant  $S_{H,i}$ , ont un effet direct sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Éq. II.8). Ceci justifie le fait que  $\delta_{optimal}$

constantes \ $2D^{1/2}$	$\delta/A_w = 0.5$	$\delta/A_w = 0.75$	$\delta/A_w = 1$	Poiseuille
$a$	-0.1893	-0.1951	-0.1972	-0.2
$b$	-460.01	-444.64	-439.15	-432

Tableau II.1 : Évolution des variables  $a$  et  $b$  dans  $S_i$  (donné par l'Éq. II.11)) avec l'augmentation de  $\delta$  dans le modèle  $2D_H^{1/2}$  et comparées avec les valeurs constantes dans le modèle  $2D_P^{1/2}$ .

soit supérieur à  $A_w/2$  dans certains cas, permettant alors que l'erreur relative maximale  $\Delta_{max}$  ainsi obtenue est encore améliorée par rapport à celle trouvée avec le modèle  $2D_P^{1/2}$ . Par exemple, pour le cas où  $Pr = 0.4$  et  $Gr = 10^5$ , nous obtenons  $\delta_{optimal} = 0.57 \times A_w$  avec une erreur  $\Delta_{max}$  de 0.72 %, tandis que celle obtenue avec le modèle  $2D_P^{1/2}$  est de 1.39%. D'autres valeurs de  $\delta_{optimal}$  atteignent  $0.69 \times A_w$  et  $\Delta_{max}$  est toujours améliorée par rapport au modèle  $2D_P^{1/2}$ . Ces résultats indiquent que  $\delta$  ne peut être interprété comme une épaisseur de couche limite que pour les petites valeurs de  $\delta$  traduisant des profils plats. Il ne s'agit sinon que d'un paramètre de réglage permettant d'ajuster les profils de type Hartmann à la variation transversale de la vitesse dans nos résultats 3D.

## II.6 Domaine de validité des modèles $2D^{1/2}$

L'intérêt principal des modèles  $2D_{H,P}^{1/2}$  est de prédire le champ de température 3D avec une formulation 2D. Parmi les hypothèses qui ont été considérées lors de la formulation de ces modèles  $2D^{1/2}$  se trouve le fait de supposer que la température reste uniforme le long de la direction transverse  $x_3$ . Pour de faibles valeurs du nombre de Prandtl, des nombres de Grashof modérés et dans notre cavité confinée suivant la direction  $x_3$ , la température devrait en effet être indépendante de  $x_3$ . Pour de plus grands nombres de Prandtl et Grashof, cela n'est pas si clair et on s'attend à ce que le champ de température dépende aussi de  $x_3$ . Dans cette partie, on explore l'espace  $(Gr, Pr)$  afin de définir la plage de variation des paramètres de contrôle dans laquelle la variation de la température le long de  $x_3$  reste suffisamment petite pour que la modélisation  $2D^{1/2}$  soit toujours valable.

Un premier aperçu qualitatif de l'évolution des champs de température 3D avec la variation des paramètres de contrôle est donné sur la [figure II.12](#). Les contours de la température adimensionnelle  $\theta$ , obtenus avec le modèle 3D, dans le plan de coupe horizontal à  $x_2 = 0.2$  (voir [fig. II.1](#)), sont donnés pour un nombre de Prandtl égal à 0.01 et des nombres de Grashof allant de  $10^3$  à  $5 \times 10^7$ . Pour chaque cas, nous donnons également  $C$ , la flèche maximale des contours  $\theta$  le long de la direction  $x_3$ .  $C$  est définie comme étant la différence maximale de la

température adimensionnelle  $\theta$  entre le plan médian vertical de la cavité 3D (représenté en vert sur la [fig. II.1](#)) et la paroi latérale et peut être exprimée par :

$$C = \text{Max}\{|\theta_{center}(i) - \theta_{wall}(i)|\} = \text{Max}\left\{\left|\frac{(T_{center}^*(i) - T_{wall}^*(i))}{\Delta T^*}\right|\right\}. \quad (\text{II.19})$$

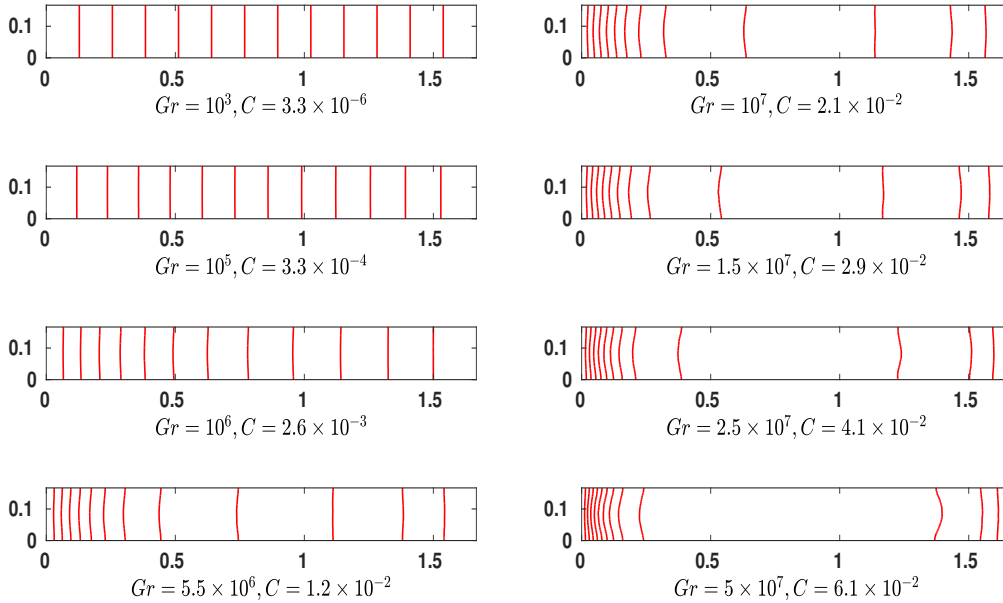


FIGURE II.12 : Vue qualitative des contours de température transverses obtenus avec le modèle 3D sur le plan de coupe horizontal à  $x_2 = 0.2$  (voir [fig. II.1](#)) pour  $Pr = 0.01$  et différents nombres de Grashof. Pour chaque nombre de Grashof, la flèche maximale  $C$  des isothermes le long de la direction  $x_3$  est donnée.

Comme indiqué sur la [figure II.12](#), la valeur de  $C$  augmente avec la croissance du nombre de Grashof. Les faibles valeurs de  $C$  (généralement 1% ou moins) indiquent que les isothermes sont des lignes presque droites le long de la direction  $x_3$ . C'est le cas pour  $Gr = 10^3$ ,  $Gr = 10^5$ ,  $Gr = 10^6$  et même pour  $Gr = 5.5 \times 10^6$ , où on a respectivement  $C$  égal à 0.00033%, 0.033%, 0.26% et 1.2%. Les valeurs plus grandes du nombre Grashof telles que  $Gr = 1.5 \times 10^7$ ,  $Gr = 2.5 \times 10^7$  et  $Gr = 5 \times 10^7$  donnent respectivement une flèche maximale  $C$  de 2.9% , 4.1% et 6.1%, indiquant de plus grandes courbures des isothermes et un champ de température moins uniforme le long de  $x_3$ .

Le changement de la nature du transfert de chaleur dans la cavité entre les deux parois avec la variation du nombre de Grashof est également visible sur la [figure II.12](#). Le transfert de chaleur évolue de principalement diffusif pour la plus faible valeur du nombre de Grashof ( $Gr = 10^3$ ) où les isothermes sont droites et équidistantes, à très convectif pour  $Gr \leq 10^7$  où les isothermes sont plus courbées et resserrées près des parois différentiellement chauffées.

En se basant sur les résultats présentés sur la [figure II.12](#),  $C = 2.5\%$  est choisi de manière arbitraire pour définir la limite en dessous de laquelle l'utilisation des modèles 2D<sup>1/2</sup> est appropriée. Nous utilisons le fait que la vue qualitative du cas à  $Gr = 10^7$  (qui donne

$C = 2.1\%$ ) montre que la flèche des isothermes reste encore modérée, même si le transfert de chaleur est déjà très convectif. Il faut aussi noter que  $C$  est une valeur maximale de la flèche obtenue à partir de tous les points de la grille de comparaison situés dans le plan médian vertical et de ceux situés sur les parois latérales.  $C$  est alors une valeur locale beaucoup plus grande que la flèche moyenne  $C_{moyenne}$  obtenue en faisant la moyenne des différences de température sur tous les points de la grille. Par exemple, pour  $Gr = 10^7$ ,  $C = 2.1\%$  alors que  $C_{moyenne} = 0.29\%$ .

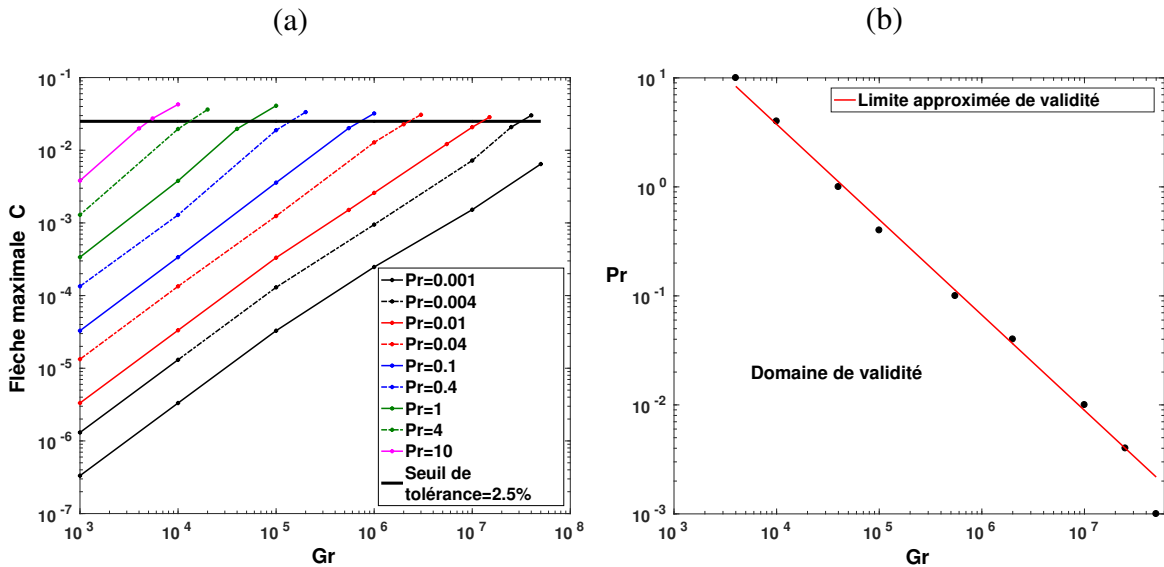


FIGURE II.13 : (a) Variations de  $C$  (la flèche maximale des isothermes 3D suivant  $x_3$ ) en fonction du nombre de Grashof  $Gr$  pour différents nombres de Prandtl de  $Pr = 0.001$  à  $Pr = 10$ . La ligne noire en gras représente le seuil de tolérance choisi pour la flèche  $C$ . (b) points limites dans l'espace de paramètres  $(Pr, Gr)$  pour la validité des modèles 2D<sup>1/2</sup>. Ces points sont extraits de (a) et correspondent, pour chaque valeur de  $Pr$ , au dernier point en dessous du seuil de tolérance. Ligne rouge : limite de validité approchée dans le plan  $(Gr, Pr)$ .

En utilisant le niveau de tolérance défini ( $C = 2.5\%$ ) et pour les valeurs considérées de  $Pr$ , on peut estimer le nombre de Grashof critique en dessous duquel l'utilisation des modèles 2D<sup>1/2</sup><sub>H,P</sub> est approprié. Par exemple, sur la figure II.12, on remarque que pour  $Pr = 0.01$ , la valeur critique du nombre de Grashof est comprise entre  $Gr = 10^7$  et  $Gr = 1.5 \times 10^7$ . Le même travail est effectué pour les autres valeurs choisies du nombre de Prandtl comprises dans l'intervalle  $[0.001, 10]$ , à savoir 0.001, 0.004, 0.01, 0.04, 0.1, 0.4, 1, 4 et 10. Pour chaque cas, le nombre de Grashof est augmenté par palier de  $Gr = 10^3$  jusqu'à atteindre des valeurs pour lesquelles la flèche  $C$  dépasse le seuil de tolérance  $C = 2.5\%$ .

La figure II.13(a) présente la variation de  $C$  (la flèche maximale des isothermes 3D le long de  $x_3$ ) avec l'augmentation du nombre de Grashof jusqu'à ce que le seuil de tolérance de 2.5% soit dépassé. La figure II.13(a) montre que, comme attendu, l'augmentation du nombre de Grashof augmente la flèche  $C$  pour tous les nombres de Prandtl. Elle montre également que le niveau de tolérance est plus rapidement dépassé pour des nombres de Prandtl plus élevés. Ceci est justifié par le fait que dans l'équation de conservation de l'énergie (Éq. II.5),

le terme convectif responsable de la déformation des isothermes est d'autant plus efficace que la contribution du terme diffusif diminue, ce qui est le cas quand la valeur de  $Pr$  est plus grande.

Les nombres de Grashof critiques (définis comme les plus grands  $Gr$  atteints avec une flèche maximale  $C$  toujours en dessous du seuil de tolérance) sont associés à leurs nombres de Prandtl correspondants et présentés sur la [figure II.13\(b\)](#) sous forme de points noirs, donnant une estimation de la limite de validité pour l'approche  $2D^{1/2}$ . Cette limite peut être assez bien approximée par une ligne droite (ligne rouge sur la [figure II.13\(b\)](#)) obtenue par une régression linéaire appliquée sur tous les points critiques tracés en échelle logarithmique. La condition de validité ainsi obtenue est :

$$Pr \times Gr^{0.8749} < 10^{4.074}. \quad (\text{II.20})$$

## II.7 Résultats et discussion

Dans les sous-sections précédentes, plusieurs comparaisons qualitatives entre les résultats obtenus avec les différents modèles 3D, 2D,  $2D_H^{1/2}$  et  $2D_P^{1/2}$  ont été présentées. Pour le cas ( $Pr = 0.01$ ,  $Gr = 10^7$ ), les contours de vitesse et de température sont donnés sur la [figure II.6](#) et les contours de  $\Delta$  alors obtenus sont donnés sur la [figure II.7](#). Les différents profils de température à mi-hauteur de la cavité sont aussi donnés sur la [figure II.10](#) pour le cas ( $Pr = 0.004$ ,  $Gr = 10^7$ ). Des erreurs quantitatives ont été données pour les deux cas ( $Pr = 0.01$ ,  $Gr = 10^6$ ) et ( $Pr = 0.004$ ,  $Gr = 10^7$ ) sur la [figure II.8](#) et la [figure II.9](#) respectivement.

Dans cette partie de l'étude, l'erreur relative maximale en température,  $\Delta_{max}$ , obtenue par les différents modèles 2D et  $2D^{1/2}$ , est présentée, d'abord pour  $Pr = 0.01$  ([fig. II.14](#)), puis pour  $Pr = 0.001$  ([fig. II.15](#)), et finalement pour l'ensemble des cas considérés sur toute la plage de variation des paramètres de contrôle ( $Pr$ ,  $Gr$ ) dans le domaine de validité ([fig. II.16](#)).

Pour tous les nombres de Grashof considérés, de  $10^3$  à  $10^7$  ( $Pr = 0.01$  [fig. II.14](#)) et de  $10^3$  à  $5 \times 10^7$  ( $Pr = 0.001$  [fig. II.15](#)), l'erreur relative obtenue avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  est inférieure à celle obtenue avec le modèle  $2D_P^{1/2}$ , elle-même inférieure à celle du modèle 2D. En effet pour  $Pr = 0.01$ , bien que pour  $Gr = 10^3$  l'erreur 2D n'est que de 0.25% et qu'elle reste acceptable, elle dépasse rapidement 10% pour  $Gr = 10^5$  pour atteindre une erreur de 18.5% pour  $Gr = 10^7$ . Cette erreur est réduite avec le modèle  $2D_P^{1/2}$ . Elle n'est que de  $9.5 \times 10^{-6}$  pour  $Gr = 10^3$ , elle ne dépasse 1% que quand  $Gr > 4 \times 10^5$ , mais elle atteint 7., 9% pour  $Gr = 10^7$ . Le modèle  $2D_H^{1/2}$  réduit toujours cette erreur de presque un ordre de grandeur : l'erreur est  $1.2 \times 10^{-6}$  pour  $Gr = 10^3$  et ne dépasse pas 1.1% pour le nombre Grashof le plus élevé considéré pour  $Pr = 0.01$ , c'est-à-dire  $Gr = 10^7$ . Cette allure est confirmée sur la [figure II.15](#) où le modèle  $2D_H^{1/2}$  est le modèle donnant l'erreur relative la plus faible pour tous les nombres de Grashof considérés.

Au lieu de tracer d'autres courbes ( $\Delta_{max}$  fonction de  $Gr$ ), pour toutes les autres valeurs du nombre de Prandtl, toutes les valeurs de  $\Delta_{max}$  obtenues pour les tous les cas ( $Gr$ ,  $Pr$ ) étudiés sont réunies et utilisées pour tracer les iso-contours de  $\Delta_{max}$  en fonction des paramètres de contrôle ( $Gr$ ,  $Pr$ ). Les résultats obtenus pour chaque type de modélisation sont présentés sur la [figure II.16](#).

Les [figures II.16](#) (a), (b) et (c) donnent respectivement les contours de l'erreur rela-



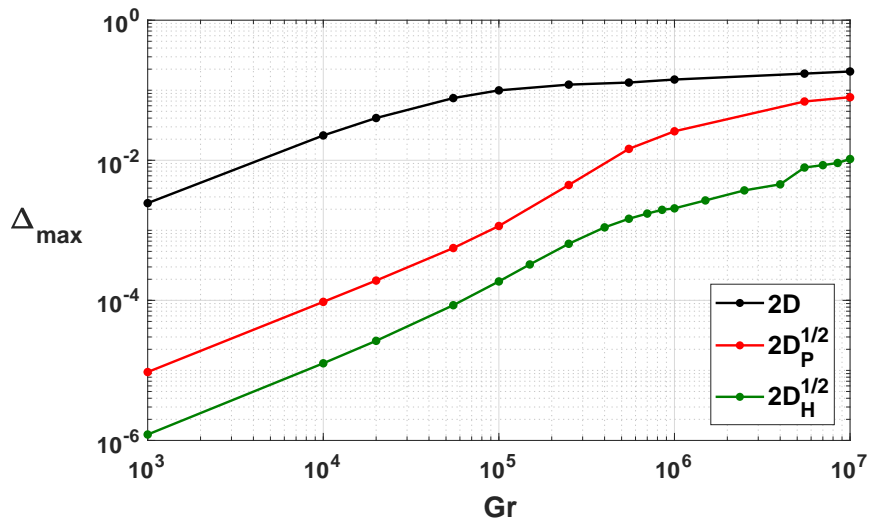


FIGURE II.14 : Erreur relative maximale en température  $\Delta_{max}$  (donnée par l'Éq. II.17) obtenue avec les modèles 2D (courbe noire),  $2D_P^{1/2}$  (courbe rouge) et  $2D_H^{1/2}$  (courbe verte) en fonction du nombre de Grashof pour  $Pr = 0.01$ .

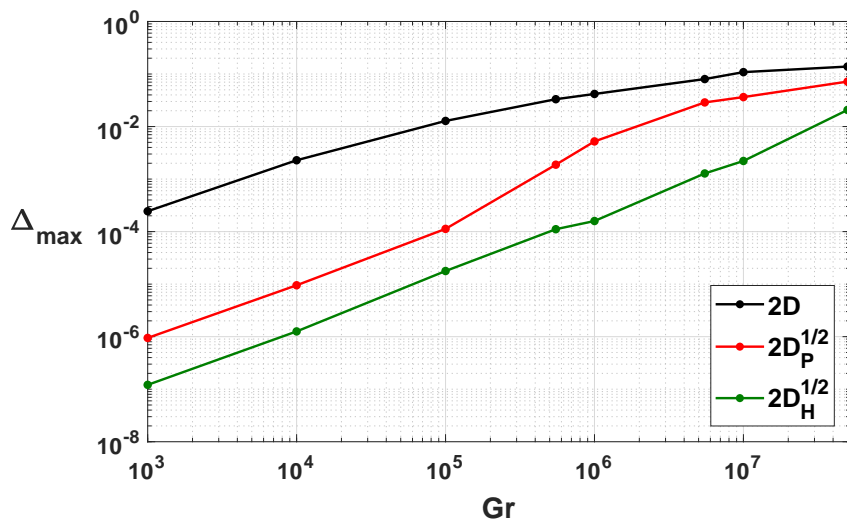


FIGURE II.15 : Erreur relative maximale en température  $\Delta_{max}$  (donnée par l'Éq. II.17) obtenue avec les modèles 2D (courbe noire),  $2D_P^{1/2}$  (courbe rouge) et  $2D_H^{1/2}$  (courbe verte) en fonction du nombre de Grashof pour  $Pr = 0.001$ .

tive maximale en température  $\Delta_{max}$  des différents modèles 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ . Chaque cas  $(Gr, Pr)$  est associé à la valeur de  $\Delta_{max}$  obtenue avec le modèle considéré, ce qui donne un ensemble de points  $(Gr, Pr, \Delta_{max})$ , qui peuvent être aussi présentés comme  $\Delta_{max}$  fonction de  $Gr$  et  $Pr$ , une forme qui peut être facilement manipulée pour obtenir les contours donné sur la figure. Il convient de noter qu'à cause des larges variations de  $\Delta_{max}$  (de  $10^{-7}$  à plus de 0.25) une échelle logarithmique est utilisée pour ces contours et que les nombres sur les iso-lignes (représentés par des lignes minces noires) correspondent aux puissances

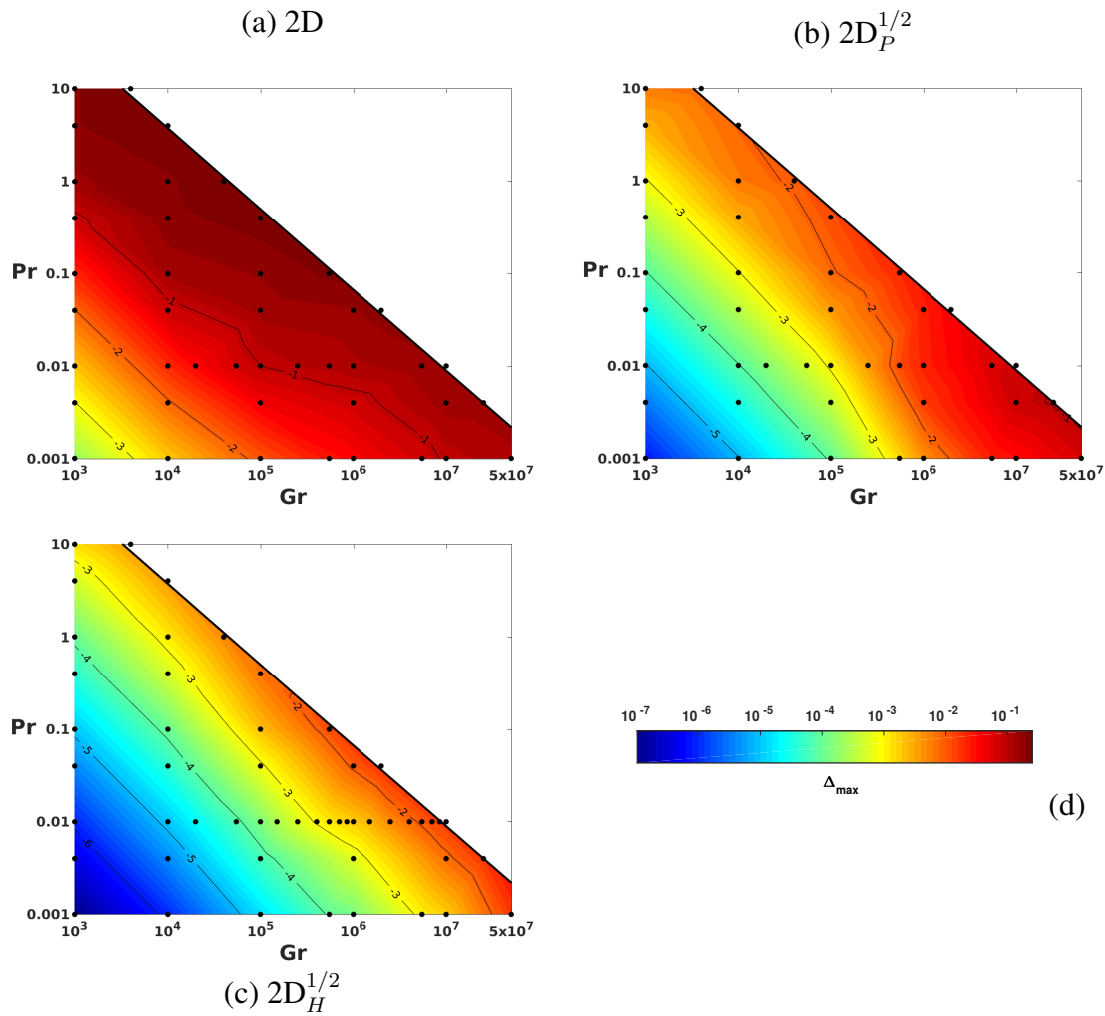


FIGURE II.16 : Contours de  $\Delta_{max}$  obtenus avec les modèles étudiés et présentés dans le plan  $(Gr, Pr)$ , restreint à la région de validité des approches  $2D^{1/2}$ . Les points noirs dans (a), (b) et (c) représentent les cas  $(Gr, Pr)$  étudiés. La ligne noire en gras représente la limite de validité des modèles  $2D^{1/2}$ , et les lignes noires fines correspondent aux exposants de  $\Delta_{max}$  en puissance de 10. (a) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle 2D, (b) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle  $2D_P^{1/2}$ , (c) : contours de  $\Delta_{max}$  obtenus par le modèle  $2D_H^{1/2}$  et (d) : barre de couleur donnant les valeurs de  $\Delta_{max}$ .

de 10 correspondantes (par exemple, la ligne intitulée '-3' correspond à un iso-contour  $\Delta_{max} = 10^{-3} = 0.1\%$ ).

La figure II.16(a) donne les contours de  $\Delta_{max}$  obtenus avec le modèle 2D.  $\Delta_{max}$  est supérieur à 10% pour une grande partie des cas  $(Gr, Pr)$  étudiés et dépasse 25% près de la limite de validité des modèles  $2D^{1/2}$ . Une fois de plus, ceci illustre le manque de fiabilité du modèle 2D pour étudier la convection naturelle dans ce type de cavité confinée.

Comme indiqué sur la figure II.16(b), le modèle  $2D_P^{1/2}$  permet une meilleure prédiction du champ de température 3D que le modèle 2D classique. Cependant,  $\Delta_{max}$  dépasse toujours 7% lorsque  $Gr > 5.5 \times 10^6$  pour les deux valeurs du nombre de Prandtl qui sont  $Pr = 0.004$

et  $Pr = 0.01$  et atteint une valeur maximale de 10.5% pour ( $Pr = 0.004, Gr = 2.5 \times 10^7$ ). Le modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> quant à lui donne une meilleure prédiction des résultats 3D que le modèle 2D<sub>P</sub><sup>1/2</sup> et, comme montré sur la [figure II.16\(c\)](#), ceci est valable pour tous les cas ( $Gr, Pr$ ) considérés. La valeur la plus élevée de l'erreur relative maximale n'est que de  $\Delta_{max} = 2.2\%$ , et elle est atteinte seulement pour  $Gr = 2 \times 10^6$  et  $Pr = 0.04$ . Sinon, ailleurs sur l'ensemble du domaine étudié, cette erreur reste bien inférieure à 2%. La comparaison entre la [figure II.16\(b\)](#) et la [figure II.16\(c\)](#) montre qu'un choix approprié du profil de vitesse transverse permet de mieux prendre en compte les effets dissipatifs induits par les parois latérales et d'avoir ensuite une meilleure prédiction du champ de température 3D.

En plus de sa fiabilité avérée pour la prédiction de résultats suffisamment proches des résultats 3D, le modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> présente aussi l'avantage de conserver une formulation 2D, nécessitant donc des temps de résolution bien inférieurs au modèle 3D. Le [Tableau II.2](#) résume les temps de calcul des modèles 2D, 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> et 3D, sur une même machine, pour trois différents cas. Dans ces trois cas rapportés, le nombre de Prandtl est constant ( $Pr = 0.01$ ) tandis que le nombre de Grashof varie. Les nombres d'éléments de maillage, de degrés de liberté ainsi que les temps de résolution, sont assez équivalents entre le modèle 2D et le modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> (même si les temps de résolution sont légèrement plus petits dans le modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup>). Par contre, ces nombres et ces durées augmentent largement avec le modèle 3D. Le modèle 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup>, en plus de donner des résultats satisfaisants, nécessite des temps de calcul beaucoup plus faibles que le modèle 3D.

Modèle numérique	Nombre d'éléments	Degrés de liberté	Temps de résolution ( $Pr = 0.01$ )		
			$Gr = 10^5$	$Gr = 10^6$	$Gr = 10^7$
2D	9066	22256	36s	56s	1m 18s
2D <sub>H</sub> <sup>1/2</sup>	9066	22256	28s	35s	37s
3D	200043	302065	18mn 1s	21mn et 1s	54mn 53s

Tableau II.2 : Comparaison entre les nombres d'éléments constituant le maillage, les degrés de liberté et les temps de résolution des différents modèles numériques (2D, 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup> et 3D) pour trois différents cas (avec des valeurs différentes des paramètres de contrôle).

Dans les modèles 2D<sub>H</sub><sup>1/2</sup>, un coût supplémentaire lors du choix du profil de type Hartmann adéquat (pour chaque cas défini par les valeurs des paramètres de contrôle) est engendré par le fait que le paramètre  $\delta$  doit être ajusté à sa valeur optimale. Il est alors intéressant de trouver une corrélation générale donnant la valeur de  $\delta_{optimal}$  pour n'importe quelle valeur des paramètres de contrôle ( $Gr, Pr$ ) dans le domaine de validité défini. Pour cela, toutes les valeurs de  $\delta_{optimal}$  obtenues à partir de tous les cas considérés sur la [figure II.16\(c\)](#), sont regroupées et présentées sur la [figure II.17](#) comme fonction du nombre de Grashof (en points rouges).

La [figure II.17](#) montre que la dépendance de  $\delta_{optimal}$  (points rouges) par rapport au nombre

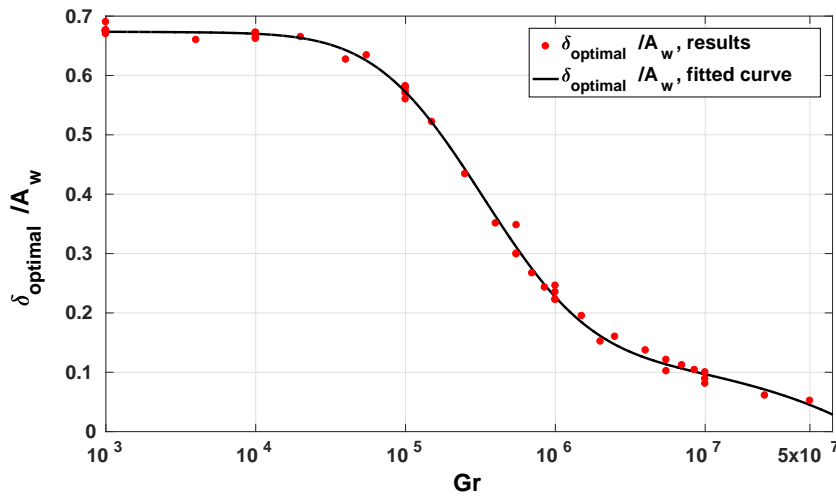


FIGURE II.17 :  $\delta_{\text{optimal}}$  obtenu pour tous les cas étudiés ( $Gr, Pr$ ) comme fonction du nombre de Grashof (points rouges). La présence de plus d'un point pour le même nombre de Grashof est liée aux différents nombres de Prandtl étudiés ; Le fait que ces points soient tous proches d'une unique courbe maîtresse montre la faible influence du nombre de Prandtl. La courbe noire correspondant à (Éq. II.12) donne un bon fit pour tous ces points.

de Prandtl est si petite que toutes les données semblent assez bien ajustées par une seule courbe  $\delta_{\text{optimal}} = f(Gr)$  (ligne noire). L'équation de cette courbe est :

$$\delta_{\text{optimal}}/A_w = a \operatorname{erf}(b (\operatorname{Log}(Gr) - 3) + c) - \exp(\operatorname{Log}(Gr) - 3 - d) + e, \quad (\text{II.21})$$

où  $a = -0.2662$ ,  $b = 1.256$ ,  $c = -3.158$ ,  $d = 7.018$  et  $e = 0.04084$ .

La valeur de  $\delta_{\text{optimal}}$  varie de  $0.69 \times A_w$  pour la plus petite valeur du nombre de Grashof étudiée ( $Gr = 10^3$ ), correspondant à un profil de vitesse transverse assez proche du profil de Poiseuille, à  $0.052 \times A_w$  pour ( $Pr = 0.001$ ,  $Gr = 5 \times 10^7$ ), correspondant à un profil de vitesse transverse de type Hartmann très aplati (voir les profils sur la figure II.11).

L'équation II.21 permet une estimation directe de  $\delta_{\text{optimal}}$  et cela en prenant en considération les caractéristiques du fluide considéré et les conditions aux limites thermiques imposées pour cette géométrie donnée. Elle permet donc une utilisation directe et optimale du modèle  $2D_H^{1/2}$  : ceci peut s'avérer particulièrement utile pour des études paramétriques où de bonnes prédictions peuvent être obtenues rapidement sans avoir à faire de simulations 3D, exigeantes en temps et/ou en ressources de calcul. Cette même équation sera directement utilisée dans la suite de ce travail pour l'estimation de  $\delta_{\text{optimal}}$  lors de l'étude de cas de changement de phase solide-liquide avec le modèle  $2D_H^{1/2}$ .

## II.8 Conclusion

Différents modèles numériques pour l'étude de la convection naturelle au sein d'une cavité confinée différentiellement chauffée ont été présentés. La configuration géométrique considérée a été choisie de manière à correspondre au creuset du montage expérimental de référence 'Afrodite'. L'une des particularités de cette configuration est son confinement le long de la direction transverse  $x_3$ . Ses proportions suivant  $x_1$ ,  $x_2$  et  $x_3$  sont respectivement  $10/6$ ,  $1$ , et  $1/6$ . Le gradient de température imposé est horizontal suivant  $x_1$ . L'incapacité des modèles 2D classiques à bien prédire les champs de vitesse et de température, lors de l'étude de la convection naturelle en phase liquide, a d'abord été mise en évidence *via* différentes comparaisons avec les résultats 3D. En effet, ces modèles ne prennent pas en considération les parois latérales de la cavité, alors même que les effets dissipatifs qu'elles induisent sont non négligeables. Pour quelques cas considérés, le modèle 2D donne même des solutions instationnaires, alors que les solutions 3D stationnaires sont visiblement stables.

Afin de prendre en considération les effets dissipatifs induits par les parois latérales de la cavité, tout en gardant une formulation 2D, des modèles  $2D^{1/2}$  sont présentés. Ces modèles sont obtenus en moyennant les équations de conservation de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la chaleur sur la direction transverse  $x_3$ . L'intégration des équations est réalisée en supposant une température constante le long de  $x_3$ , ce qui est réaliste dans une telle cavité confinée et pour de faibles valeurs du nombre de Prandtl correspondant aux métaux liquides et aux alliages métalliques ; cela l'est d'autant plus que le gradient de température imposé est horizontal suivant  $x_1$ . Lors de cette intégration, un profil transverse de vitesse doit également être défini. Deux profils de vitesse ont été utilisés, le profil parabolique de Poiseuille aboutissant au modèle  $2D_P^{1/2}$  et le profil de type Hartmann (comportant deux couches limites sur les côtés, de taille  $\delta$  ajustable, et un cœur uniforme) donnant le modèle  $2D_H^{1/2}$ . Une méthode d'ajustement du paramètre  $\delta$  pour optimiser les résultats obtenus a été utilisée. En effet, on trouve que, pour chaque cas considéré correspondant à un couple de valeurs des paramètres de contrôle ( $Pr$ ,  $Gr$ ), une seule valeur de  $\delta$ ,  $\delta_{optimal}$ , minimise l'erreur relative par rapport aux résultats 3D. L'unicité de cette valeur optimale montre bien que pour chaque cas ( $Pr$ ,  $Gr$ ) une seule forme du profil transverse permet de prendre en considération de manière optimale les effets dissipatifs qu'induisent les parois latérales et donc d'aboutir à des résultats plus pertinents.

La première hypothèse énonçant l'uniformité de la température le long de la direction transverse  $x_3$  a été vérifiée en regardant de plus près les variations de la température 3D. Cette vérification a été faite sur une large plage de variation des paramètres de contrôle ( $Pr$ ,  $Gr$ ). Un seuil de tolérance contraignant pour les variations transverse de la température 3D a été défini. Ce seuil a alors permis de délimiter un domaine de validité, sur lequel l'hypothèse considérée est respectée, et donc un domaine d'application potentiel des modèles  $2D^{1/2}$ .

Des comparaisons qualitatives, mais également quantitatives, entre les résultats obtenus avec les modèles 2D,  $2D_P^{1/2}$ ,  $2D_H^{1/2}$  et le modèle 3D ont été présentées. Le modèle purement 2D, captant mal la physique de l'écoulement convectif, conduit à des erreurs relatives maximales par rapport aux résultats 3D supérieures à 10% pour une grande partie du domaine ( $Pr$ ,  $Gr$ ) étudié. Ces erreurs dépassent même les 25 % pour certains cas. Le modèle  $2D_P^{1/2}$  améliore les résultats, en réduisant les écarts par rapport aux résultats 3D, mais des erreurs relatives en température supérieures à 10% sont toujours obtenues pour certains cas.

## II.8. CONCLUSION

---

Le modèle  $2D_H^{1/2}$ , avec le choix adéquat du paramètre  $\delta$ , est le modèle s'avérant être le plus efficace. L'écart relatif maximum en température par rapport aux résultats 3D, sur tout le domaine de variation des paramètres de contrôle étudié, ne dépasse pas 2.2%. Cela prouve bien sa capacité à se substituer de manière fiable aux modèles 3D pour la prédiction du champ de température lors de l'étude de la convection naturelle. En plus de sa fiabilité, le modèle  $2D_H^{1/2}$  reste une formulation 2D du problème, gardant ainsi des coûts de calcul beaucoup moins importants que ceux des modèles 3D. Pour les cas de convection naturelle qu'on a étudiés, sur les mêmes machines de calcul, les modèles  $2D_H^{1/2}$  sont résolus en moyenne quarante fois plus vite que les modèles 3D. Une relation empirique est obtenue en interpolant toutes les valeurs de  $\delta_{optimal}$  trouvées en fonction du paramètre de contrôle ( $Gr$ ) sur l'ensemble du domaine étudié. Les modèles  $2D_H^{1/2}$  sont donc directement prêts à l'emploi et peuvent se révéler être très pratiques pour des études paramétriques nécessitant des modèles fiables avec un faible temps de résolution.

Dans la suite de ce travail, les modèles  $2D_H^{1/2}$  seront directement mis à contribution pour l'étude de cas de changement de phase solide-liquide. Leur capacité à bien prédire à la fois les formes et les positions des fronts solide-liquide, lors de différents cas de solidification, sera étudiée.

# Chapitre III

## Étude du Changement de Phase Solide-Liquide de Corps Purs

### Sommaire

---

<b>III.1 Cas d'équilibre de phases solide-liquide</b> . . . . .	<b>62</b>
III.1.1 Géométrie et matériau considérés . . . . .	62
III.1.2 Mise en équation du problème . . . . .	62
III.1.2.1 Écriture du terme source $S_i^*$ sous forme dimensionnelle . . . . .	64
III.1.2.2 Calcul de $\delta_{optimal}^*$ dans le modèle $2D_H^{1/2}$ . . . . .	64
III.1.3 Implémentation sous Comsol avec un maillage déformable . . . . .	66
III.1.4 Résultats et discussions . . . . .	68
<b>III.2 Processus de solidification</b> . . . . .	<b>75</b>
III.2.1 Processus expérimental avec 'Afrodite' . . . . .	75
III.2.2 Détermination des conditions aux limites thermiques . . . . .	76
III.2.3 Maillage utilisé . . . . .	78
III.2.4 Résultats et discussion . . . . .	80
<b>III.3 Conclusion</b> . . . . .	<b>84</b>

---

L'efficacité des modèles  $2D^{1/2}$  pour l'étude de la convection naturelle dans une cavité confinée par rapport aux modèles 2D classiques a été mise en évidence dans le chapitre précédent. La comparaison entre les différents modèles proposés et le modèle 3D a été principalement faite sur le champ de température. Ceci est justifié par notre intérêt au changement de phase solide-liquide où, de fait, c'est le champ de température qui régit le processus de solidification. Dans le présent chapitre, on cherche à montrer la capacité des modèles  $2D^{1/2}$  à prédire la forme et la position du front solide-liquide au cours de différents cas de changement de phase d'un corps pur, à savoir, l'étain. Dans un premier temps, nous présentons des cas d'équilibre de phases solide-liquide obtenus lorsque les parois chaude et froide du creuset sont, respectivement, maintenues à des températures constantes supérieure et inférieure à la température de fusion. Nous comparons alors les différents résultats obtenus en régime permanent avec les différents modèles numériques précédemment définis et qui ont été adaptés pour le changement de phase. Dans un second temps, la capacité du modèle  $2D_H^{1/2}$  à simuler

un processus complet de solidification d'un lingot d'étain pur est étudiée. Les résultats numériques du modèle sont alors directement confrontés aux résultats expérimentaux obtenus avec le dispositif expérimental 'Afrodite'.

L'adaptation des différents modèles numériques pour inclure le changement de phase, leur mise sous forme dimensionnelle et les différentes hypothèses simplificatrices considérées sont détaillées dans ce chapitre. La méthode numérique faisant appel à un maillage dynamique pour le suivi du front solide-liquide y est aussi présentée.

## III.1 Cas d'équilibre de phases solide-liquide

Dans cette partie nous nous intéressons à des cas d'équilibre de phases solide-liquide. Ces cas sont obtenus quand la paroi chaude du creuset est à une température constante supérieure à la température de fusion et la paroi froide à une température constante inférieure à la température de fusion. On aura alors, en régime permanent, coexistence des phases solide et liquide séparées par un front dont la forme et la position sont fixes. La pertinence et la fiabilité des différents modèles 2D ( $2D$ ,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ ) à bien prédire les résultats 3D, sur la position et la forme des fronts solide-liquide obtenus, sont examinées.

### III.1.1 Géométrie et matériau considérés

La géométrie définie au chapitre précédent et présentée sur la [figure II.1](#) est reprise ici. Elle correspond au creuset du dispositif expérimental 'Afrodite'. Dans cette partie de l'étude et dans les simulations numériques, cette géométrie est prise sous sa forme dimensionnelle. Dans les modèles 3D, le creuset est représenté par une cavité parallélépipédique avec une longueur  $L = 0.1$  m, une hauteur  $H = 0.06$  m et une profondeur  $W = 0.01$  m. Les parois latérales sont adiabatiques, alors que les parois à gauche et à droite sont à des températures constantes mais différentes selon les cas considérés. Dans les modèles 2D, la cavité se résume à une cavité rectangulaire de longueur  $L = 0.1$  m et de hauteur  $H = 0.06$  m. Le matériau choisi pour les simulations est l'étain pur. Sa température de fusion est  $T_f = 505$  K. Deux cas d'équilibre de phase sont rapportés. Dans le premier, nommé cas (1), la température de la paroi chaude est  $T_h = 512$  K et celle de la paroi froide est  $T_c = 502$  K. Dans le second, nommé cas (2),  $T_h = 507.5$  K et  $T_c = 503.5$  K. Les propriétés physiques choisies pour modéliser l'étain sont indiquées dans le [tableau III.1](#).

### III.1.2 Mise en équation du problème

L'étude de ces cas avec changement de phase solide-liquide nécessite la prise en considération des échanges thermiques convecto-diffusifs dans la phase liquide et des échanges thermiques diffusifs dans la phase solide. Dans cette dernière, seule l'équation de la chaleur est résolue et elle se résume à l'équation de conduction thermique :

$$\frac{\partial T_s^*}{\partial t^*} = \frac{k_s}{\rho c_{p_s}} \nabla^{*2} T_s^*, \quad (\text{III.1})$$



Symboles	Valeurs	Descriptions
$\nu$	$2.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$	viscosité cinématique
$\rho$	$7070 \text{ kg}/\text{m}^3$	densité
$\beta$	$2.2 \times 10^{-5} \text{ 1/K}$	coefficient d'expansion thermique
$k_s$	$60 \text{ W}/(\text{m} \times \text{K})$	conductivité thermique de la phase solide
$k_l$	$30 \text{ W}/(\text{m} \times \text{K})$	conductivité thermique de la phase liquide
$c_{p_s}$	$228 \text{ J}/(\text{kg} \times \text{K})$	capacité thermique à pression constante du solide
$c_{p_l}$	$242 \text{ J}/(\text{kg} \times \text{K})$	capacité thermique à pression constante du liquide
$\Delta H_f$	$59.6 \text{ kJ}/\text{kg}$	chaleur latente de fusion
$T_f^*$	$505 \text{ K}$	température de fusion

Tableau III.1 : Propriétés physiques utilisées pour modéliser l'étain au voisinage de sa température de fusion  $T_f^*$ . La densité  $\rho$  est considérée constante entre les deux phases pour assurer la conservation de la masse totale.

avec  $T_s^*$  la température dans le solide,  $\nabla^{*2}$  l'opérateur laplacien dimensionnel et  $t^*$  le temps en seconde.

Dans la phase liquide par contre, l'équation de conservation de l'énergie est couplée aux équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse. En se basant sur les résultats de Assael *et al.* [108] indiquant une variation linéaire de la densité  $\rho$  sur une large plage de variation de la température au dessus de la température de fusion  $T_f^*$ , l'approximation de Boussinesq est appliquée dans le domaine liquide pour décrire la variation de la densité dans le terme de flottabilité. La densité est considérée comme constante partout ailleurs. Les équations de conservation dans la phase liquide pour les modèles  $2D^{1/2}$  sont les suivantes :

— L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial t^*} + \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \nabla^* \bar{u}_i^* = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i^*} + g \beta (\bar{T}_l^* - T_f^*) \delta_{i,2} + \nu \nabla^{*2} \bar{u}_i^* + S_i^* \text{ pour } i = 1 \text{ et } 2, \quad (\text{III.2})$$

où  $\bar{u}_i^*$  est la vitesse dimensionnelle moyennée sur la petite épaisseur ( $x_3$ ) dans le liquide,  $\nabla^*$  l'opérateur divergence dimensionnel,  $\bar{p}^*$  la pression dimensionnelle moyennée et  $\bar{T}_l^*$  la température dimensionnelle moyennée.

— L'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \bar{T}_l^*}{\partial t^*} + \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \nabla^* \bar{T}_l^* = \frac{k_l}{\rho c_{p_l}} \nabla^{*2} \bar{T}_l^*, \quad (\text{III.3})$$

— L'équation de conservation de la masse :

$$\nabla^* \cdot \bar{\mathbf{u}}^* = 0. \quad (\text{III.4})$$

Le terme  $S_i^*$  de l'équation III.2 fait référence au terme source des modèles  $2D^{1/2}$ , mais exprimé sous sa forme dimensionnelle qui est donnée dans la section suivante. En le supprimant, on

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

retrouve les équations de conservation 2D classiques et en laissant varier l'indice  $i$  de 1 à 3 et en supprimant les barres sur les variables vitesses, pression et température (ces barres signifient que ce sont des valeurs moyennées sur l'épaisseur de la cavité), nous obtenons les équations de conservation 3D.

Les régions solide et liquide sont séparées par le front de changement de phase solide-liquide. Le bilan énergétique sur ce front est exprimé par la condition de Stefan [48] :

$$\rho \Delta H_f v_f^* \cdot \mathbf{n}^* = (\phi_l^* - \phi_s^*) \cdot \mathbf{n}^*, \quad (\text{III.5})$$

où  $\Delta H_f$  est la chaleur latente de fusion,  $v_f^*$  est la vitesse du front solide-liquide,  $\phi_l^*$  et  $\phi_s^*$  sont les flux de chaleur provenant respectivement des régions liquides et solides, et  $\mathbf{n}^*$  est le vecteur normal au front de changement de phase.

#### III.1.2.1 Écriture du terme source $S_i^*$ sous forme dimensionnelle

Pour utiliser les modèles  $2D^{1/2}$ , le terme  $S_i^*$  de l'équation III.2 doit être exprimé. Il peut être déduit de sa forme adimensionnelle  $S_i$  déjà définie dans les équations. [II.11, II.13, II.15] au chapitre précédent. En effet peut écrire :

$$S_i^* = \frac{\nu^2}{H^3} S_i = a \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \nabla^* \bar{u}_i^* + \frac{\nu}{H^2} b \bar{u}_i^* \quad (\text{III.6})$$

À partir de  $A_w = W/H$  et  $\delta = \delta^*/H$ , on peut exprimer  $a$  et  $b$  en fonction de  $W$  et  $\delta^*$  et obtenir finalement pour le modèle  $2D_H^{1/2}$  :

$$S_{H,i}^* = \left\{ 1 - F^2 \left[ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \tanh^2\left(\frac{W}{2\delta^*}\right) - \frac{3\delta^*}{W} \tanh\left(\frac{W}{2\delta^*}\right) \right] \right\} \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \nabla^* \bar{u}_i^* - F \left[ \frac{2}{\delta^* W} \tanh\left(\frac{W}{2\delta^*}\right) \right] \nu \bar{u}_i^* \quad (\text{III.7})$$

avec

$$F = \left[ 1 - \frac{2\delta^*}{W} \tanh\left(\frac{W}{2\delta^*}\right) \right]^{-1}$$

et pour le modèle  $2D_P^{1/2}$

$$S_{P,i}^* = -\frac{1}{5} \bar{\mathbf{u}}^* \cdot \nabla^* \bar{u}_i^* - \frac{12}{W^2} \nu \bar{u}_i^* \quad (\text{III.8})$$

Ainsi l'ensemble des termes nécessaires pour les différents modèles sont donc exprimés. Pour le modèle  $2D_H^{1/2}$ , comme indiqué dans le chapitre précédent, le choix de  $\delta$  doit être optimisé pour obtenir des résultats fiables. Cette optimisation a été faite sur une large gamme de variation des paramètres de contrôle pour des cas de convection naturelle. Elle a abouti à l'expression  $\delta_{optimal}/A_w = \delta_{optimal}^*/W$  donnée par l'équation II.21 et exprimée uniquement comme fonction du nombre de Grashof  $Gr$ .

#### III.1.2.2 Calcul de $\delta_{optimal}^*$ dans le modèle $2D_H^{1/2}$

La détermination de  $\delta_{optimal}^*$  pour chacun des cas d'équilibre de phases étudié n'est plus faite ici en faisant varier le paramètre  $\delta^*$  jusqu'à minimiser les erreurs avec les résultats 3D, mais directement en mettant à contribution la relation  $\delta_{optimal}^*/W = f(Gr)$  obtenue précé-

demment et donnée par l'équation II.21. Pour chaque cas donc, la détermination de  $\delta_{optimal}^*$  passe par l'estimation du nombre de Grashof correspondant.

Le calcul de  $Gr$  (équation II.2) nécessite la connaissance du gradient thermique  $\Delta T^*/L$ . Dans le cas d'un changement de phase solide-liquide, cette expression doit être adaptée sous la forme  $\Delta T^*/L_l$  qui est la différence de température entre la paroi chaude et la paroi froide de la zone liquide rapportée sur la distance les séparant,  $L_l$ . Dans ces cas de changement de phase, la paroi chaude du domaine liquide abritant les effets convectifs est la paroi chaude de la cavité à  $T = T_h^*$  et la paroi froide est le front solide-liquide à la température de fusion  $T = T_f^*$ . Seule la longueur de la zone liquide  $L_l$  doit alors être estimée pour avoir le nombre de Grashof et ensuite déduire  $\delta_{optimal}^*$ .

Une méthode simple pour obtenir une estimation de la longueur liquide,  $L_l$ , dans ces premiers cas d'équilibre de phases, consiste à estimer la position du front solide-liquide en régime permanent dans le cas d'un transfert de chaleur purement diffusif. Le bilan thermique à l'état d'équilibre, caractérisé par une vitesse de déplacement du front solide-liquide nulle ( $v_f^* = 0$ ), donne :

$$\phi_{l_d}^* = \phi_s^* \Leftrightarrow k_l \frac{T_h^* - T_f^*}{L_l} = k_s \frac{T_f^* - T_c^*}{L - L_l} \Leftrightarrow L_l = \frac{L [k_l(T_h^* - T_f^*) / (k_s(T_f^* - T_c^*))]}{1 + [k_l(T_h^* - T_f^*) / (k_s(T_f^* - T_c^*))]}, \quad (III.9)$$

où  $\phi_{l_d}^*$  et  $\phi_s^*$  sont respectivement les flux de chaleur diffusifs des domaines liquide et solide.  $L$  est la longueur totale de la cavité tandis que  $L_l$  est la longueur occupée par la phase liquide.

En raison de la présence d'un transfert de chaleur convectif supplémentaire dans la région liquide,  $L_l$  calculé avec l'équation III.9 sous-estime la taille de la zone occupée par l'étain liquide. L'estimation de  $L_l$  peut être améliorée en utilisant un flux de chaleur  $\phi_{l_c}^*$  dans la région liquide prenant en compte la contribution du transfert de chaleur par convection. Bejan [109] rapporte la corrélation de Berkovsky-Polevikov donnant le nombre de Nusselt pour des cavités différentiellement chauffées similaires :

$$Nu_H = 0.18 \left( \frac{Pr}{0.2 + Pr} Ra_H \right)^{0.29} \left( \frac{L}{H} \right)^{-0.13} \quad (III.10)$$

où  $Nu_H$  et  $Ra_H$  sont les nombres de Nusselt et de Rayleigh basés sur la hauteur  $H$ , respectivement. Avec nos notations,  $Nu_H$  peut être exprimé par :

$$Nu_H = \frac{\phi_{l_c}^* H}{k_l(T_h^* - T_f^*)}, \quad (III.11)$$

et  $Ra_H$  est indépendant de  $L_l$ .

Le bilan thermique s'écrit alors :

$$\phi_{l_c}^* = \phi_s^* \Leftrightarrow k_l \frac{T_h^* - T_f^*}{H} Nu_H = k_s \frac{T_f^* - T_c^*}{L - L_l}. \quad (III.12)$$

En utilisant  $L = L_l$  dans l'équation III.10 (indiquant que la convection se fait au sein du domaine liquide uniquement), on obtient une équation pour  $L_l$  de la forme :

$$L_l^{-0.13} (L - L_l) + C_1 = 0, \quad (III.13)$$

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

où  $C_1$  est une constante. La solution de l'équation III.13 permet alors d'avoir une estimation convecto-diffusive de  $L_l$ . Le nombre de  $Gr$  peut alors être recalculé, et une nouvelle estimation de  $\delta_{optimal}^*$  est obtenue avec toujours l'équation II.21.

Pour le cas (1), on trouve :

— Avec l'approche purement diffusive :  $L_l = 0.0538$  m,  $Gr = 5.818 \times 10^6$  et  $\delta_{optimal}^*/A_w = 0.1106$ .

— Avec l'approche convecto-diffusive :  $L_l = 0.0751$  m,  $Gr = 4.174 \times 10^6$  et  $\delta_{optimal}^*/A_w = 0.1219$ .

Pour le cas (2), on trouve :

— Avec l'approche purement diffusive :  $L_l = 0.0455$  m,  $Gr = 2.461 \times 10^6$  et  $\delta_{optimal}^*/A_w = 0.1474$ .

— Avec l'approche convecto-diffusive :  $L_l = 0.0584$  m,  $Gr = 2.041 \times 10^6$  et  $\delta_{optimal}^*/A_w = 0.1596$ .

Ces résultats obtenus avec les estimations purement diffusive et convecto-diffusive pour les deux cas d'équilibre de phases (1) et (2) sont aussi résumés dans le tableau III.3.

Maintenant que la totalité des termes intervenant dans les équations des différents modèles 3D, 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ , sont déterminés, on peut construire les modèles numériques pour les simulations correspondantes.

#### III.1.3 Implémentation sous Comsol avec un maillage déformable

Les modèles 3D, 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$  pour l'étude de ces cas avec changement de phase sont donc dérivés des modèles adimensionnels présentés au chapitre précédents pour la convection naturelle. Ils ont donc été réécrits sous forme dimensionnelle. Ils permettent, en plus des modèles précédents, la prise en considération d'une phase solide et des transferts qui s'y passent. Ces modèles sont à nouveau implémentés sous le logiciel *COMSOL Multiphysics* 5.2. En plus des modules 'Laminar Flow' et 'Heat Transfer in Fluid' utilisés pour les résolutions hydrodynamique et thermique, le module 'Deformed Geometry' de la branche des maillages déformables proposée par Comsol est maintenant utilisé. Cette physique permet à la fois la déformation du maillage et le suivi du front solide-liquide une fois la condition à l'interface bien réglée. Avec cette approche, le domaine défini, correspondant à la géométrie choisie, est divisé en deux régions (sous-domaines), une région liquide et une région solide. La figure III.1(a) montre le maillage initial utilisé dans les modèles 2D. On y distingue les deux domaines, le domaine liquide représenté en rouge et le domaine solide représenté en bleu. Les proportions occupées par chacun des domaines au sein de la cavité, et cela dans les deux cas d'équilibre de phase étudiés, sont déterminées avec la solution diffusive de la température. Cette solution est utilisée comme condition initiale pour le champ de température. À l'état initial, l'interface solide-liquide séparant les deux sous-domaines est donc parfaitement verticale (figure III.1(a)). Pour le cas (2), à  $t = 0$  s, cette frontière se trouve en  $x_1^* = 0.07$  m, car elle correspond à l'isotherme  $T^* = T_f^*$ , qui est la température de fusion.

Le module 'Deformed Geometry (dg)' permet l'adaptation du maillage et la résolution du problème en fonction des changements géométriques des deux sous-domaines définis. Contrairement au module 'Moving mesh (ale)' où la géométrie change à cause d'un phénomène physique sans qu'il y ait ajout ou retrait de matière dans le domaine, les changements géométriques dans le module 'Déformé Geometry (dg)' doivent être dus à un ajout ou re-

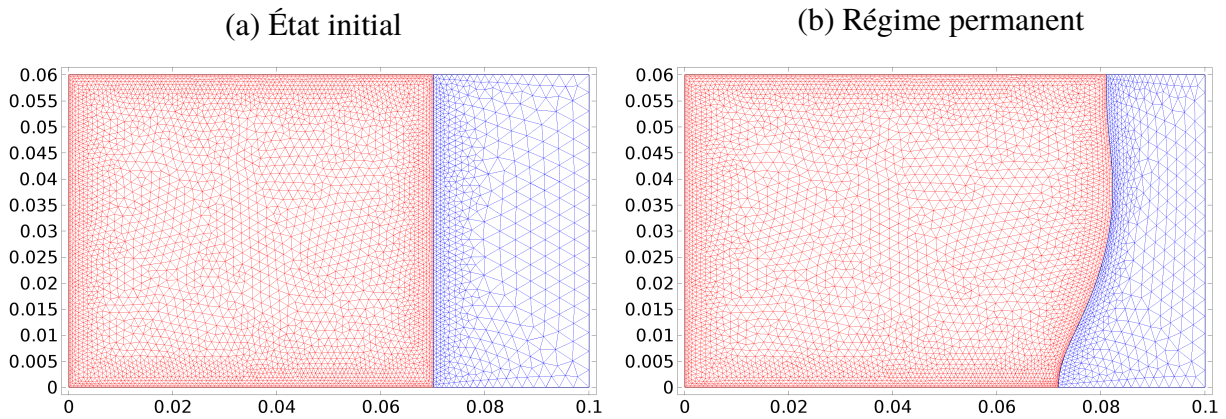


FIGURE III.1 : Maillage 2D utilisé pour l'étude des cas d'équilibre de phase. Le domaine est divisé en deux régions, la région liquide (en rouge) et la région solide (en bleu). (a) : le maillage des modèles 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$  à l'instant initial pour le cas (1). (b) : le maillage en régime établi obtenu pour le cas (1) avec le modèle 2D.

trait de matière au sein des domaines définis. Cet ajout ou retrait de matière est réalisé via le déplacement de la frontière solide-liquide séparant les deux sous-domaines. En effet, ces déplacements traduiront la croissance d'un sous-domaine et le rétrécissement de l'autre. Pour que cette interface soit représentative du front solide-liquide, la quantité de matière retirée d'un sous-domaine et celle ajoutée dans l'autre doivent correspondre à la quantité de matière ayant changé de phase. La condition de Stephan (donnée par l'équation III.5) est donc utilisée pour obtenir la vitesse de déplacement de cette interface. La température de fusion,  $T^* = T_f^*$ , est aussi imposée à cette interface mobile.

Pour assurer la conservation totale de la masse lors des déplacements de cette interface, la densité  $\rho$  est considérée comme constante entre les deux phases.

Le module 'Deformed Geometry (dg)' permet donc une libre déformation du maillage à l'intérieur des deux sous-domaines, en fonction des déplacements de l'interface solide-liquide les séparant, mais des conditions aux limites pour la déformation du maillage doivent être définies. Ces conditions aux limites pour les déplacements du maillage sont :

- Sur les parois horizontales adiabatiques de la cavité (la paroi inférieure en  $x_2^* = 0$  m et la paroi supérieure en  $x_2^* = 0.06$  m) : un déplacement vertical nul du maillage est imposé ( $dx_2^* = 0$ ).
- Sur les parois verticales de la cavité (la paroi chaude en  $x_1^* = 0$  m et la paroi froide en  $x_1^* = 0.1$  m) : un déplacement horizontal nul du maillage est imposé ( $dx_1^* = 0$ ).

Pour le modèle 3D, en plus des deux conditions précédentes (suffisantes pour les modèles 2D), cette troisième condition est nécessaire :

- Sur les parois de confinement latérales de la cavité 3D (les parois adiabatiques en  $x_3^* = 0$  m et en  $x_3^* = 0.01$  m) : un déplacement transversal nul du maillage est imposé ( $dx_3^* = 0$ ).

La séparation du domaine géométrique en deux régions, solide et liquide, ainsi que le suivi du front solide-liquide avec un maillage déformable correspond à l'approche multi-domaines proposée par Wolf *et al.* [48] et reprise par Avnaim *et al.* [44, 107]. Parmi les avantages de cette méthode, on note que les propriétés physiques des phases liquide et solide sont définies

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

séparément dans chaque région correspondante. Elle permet également l'utilisation de deux raffinements de maillage différents. Ceci est très utile car, dans la région de la phase solide, seule l'équation de la chaleur est résolue. Celle-ci ne nécessite pas un maillage très raffiné, alors que dans la région liquide, l'équation d'énergie est couplée aux équations de conservation de quantité de mouvement et de masse, ce qui nécessite un raffinement de maillage plus élevé. Cette différence sur les densités de maillage nécessaires est respectée et apparaît bien sur la [figure III.1](#). Le maillage dans la région liquide (en rouge) est plus raffiné que le maillage dans le solide (en bleu). Le [tableau III.2](#) donne le nombre total d'éléments de maillage au sein des géométries 2D et 3D pour le premier cas d'équilibre de phase considéré. Pour les modèles avec une formulation 2D ( $2D$ ,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ ) le maillage est presque six fois plus dense dans le liquide que dans le solide. Ce rapport entre les nombres d'éléments de maillage dans le liquide et le solide passe à plus de 40 dans le modèle 3D.

Modèle numérique	Nombre total d'éléments de maillage		Degrés de liberté	Temps de résolution
	Domaine liquide	Domaine solide		
2D	17446		111526	28mn 23s
	14797	2649		
$2D_H^{1/2}$	17446		111526	31mn 23s
	14797	2649		
3D	391958		1963957	2j 3h 17mn
	382481	9477		

Tableau III.2 : Comparaison entre les nombres d'éléments constituant le maillage, les degrés de liberté et les temps de résolution des différents modèles numériques (2D,  $2D_H^{1/2}$  et 3D) pour le premier cas d'équilibre de phases étudié (le cas (1)).

#### III.1.4 Résultats et discussions

On relate ici les résultats obtenus avec les différents modèles pour les deux cas d'équilibre de phases solide-liquide considérés. La fiabilité des différents modèles 2D par rapport au modèle 3D est examinée.

La [figure III.2](#) montre les états stationnaires obtenus par les différents modèles 3D, 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ , pour le premier cas d'équilibre de phases, le cas (1) où  $T_h^* = 512$  K et  $T_c^* = 502$  K. La [figure III.3](#) montre les états stationnaires obtenus avec ces mêmes modèles mais pour le cas (2) où  $T_h^* = 507.5$  K et  $T_c^* = 503.5$  K. Sur les deux figures, le champ de température dans les régions solide et liquide est donné par les isothermes noires, avec un pas de 1 K dans la première figure et un pas de 0.5 K dans la seconde. Le champ de vitesse est donné en vecteurs et niveaux de couleur dans la région liquide.

Pour une meilleure comparaison entre les modèles, en plus de la représentation dans le plan de coupe central de la cavité des résultats 3D, les champs 3D moyennés sur l'épaisseur de la cavité le long de  $x_3^*$  sont aussi donnés.

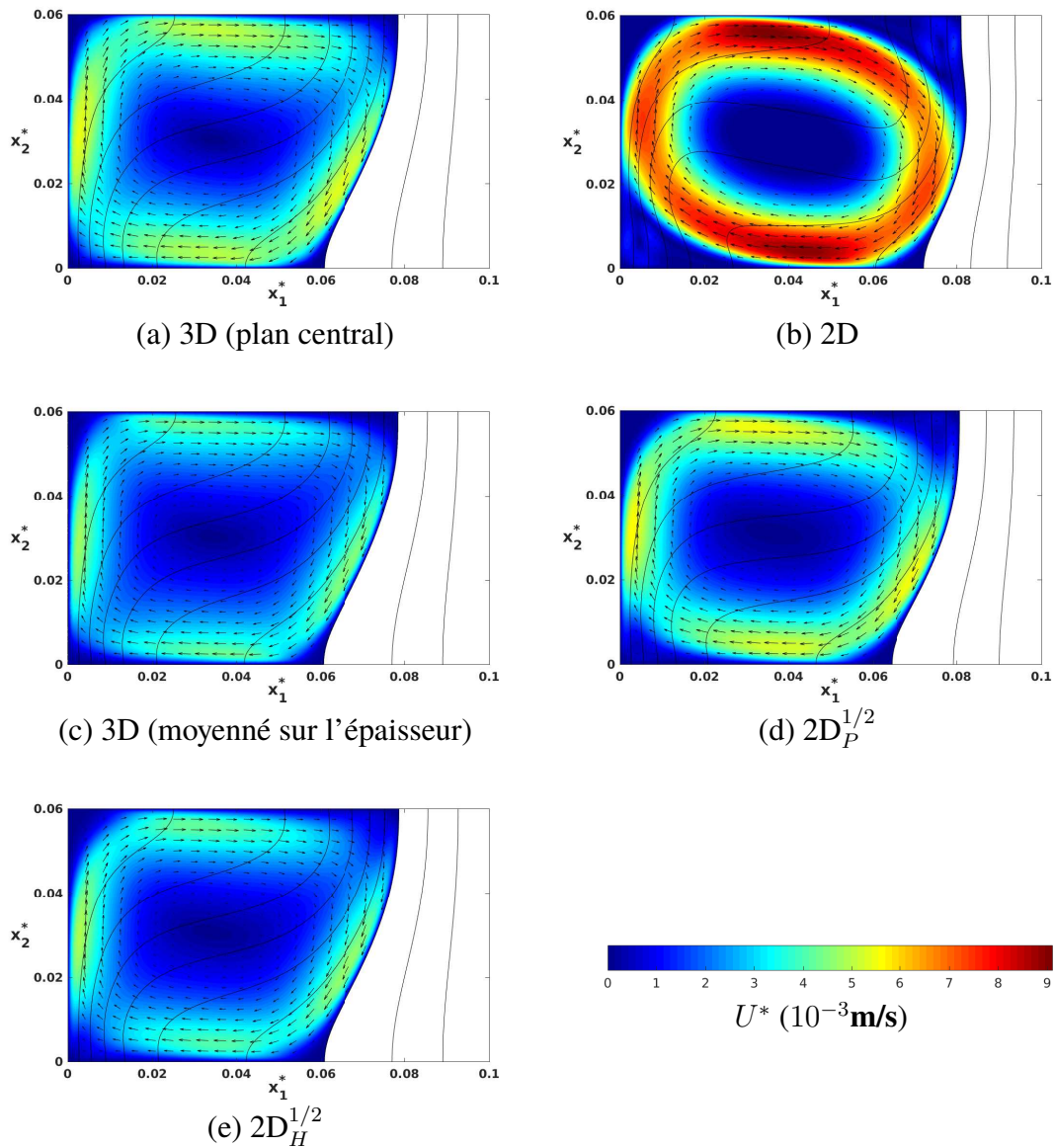


FIGURE III.2 : Champs de vitesse (niveaux d'intensité de couleur et vecteurs) dans la zone de la phase liquide et champs de température (isothermes noires (avec un pas de 1 K)) obtenus avec les différents modèles pour le premier cas, 'cas (1)', d'équilibre de phase. La position et la forme du front solide-liquide correspond à l'isotherme  $T^* = T_f^*$ . (a) : modèle 3D (dans le plan de coupe central défini sur la figure II.1), (b) : modèle 2D, (c) : modèle 3D (résultats moyennés sur l'épaisseur le long de  $x_3^*$ ), (d) : modèle  $2D_P^{1/2}$  et (e) : modèle  $2D_H^{1/2}$ .

La comparaison entre la figure III.2(b) et la figure III.2(a) (ou la figure III.2(c)), et la comparaison entre la figure III.3(b) et la figure III.3(a) (ou la figure III.3(c)), illustre à nouveau l'incapacité du modèle 2D à prédire les résultats 3D. Les intensités des vitesses données par le modèle 2D dans les régions liquides dans les deux cas étudiés sont trop élevées, bien supérieures à celles données au centre de la cavité 3D. Ces fortes intensités convectives in-

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

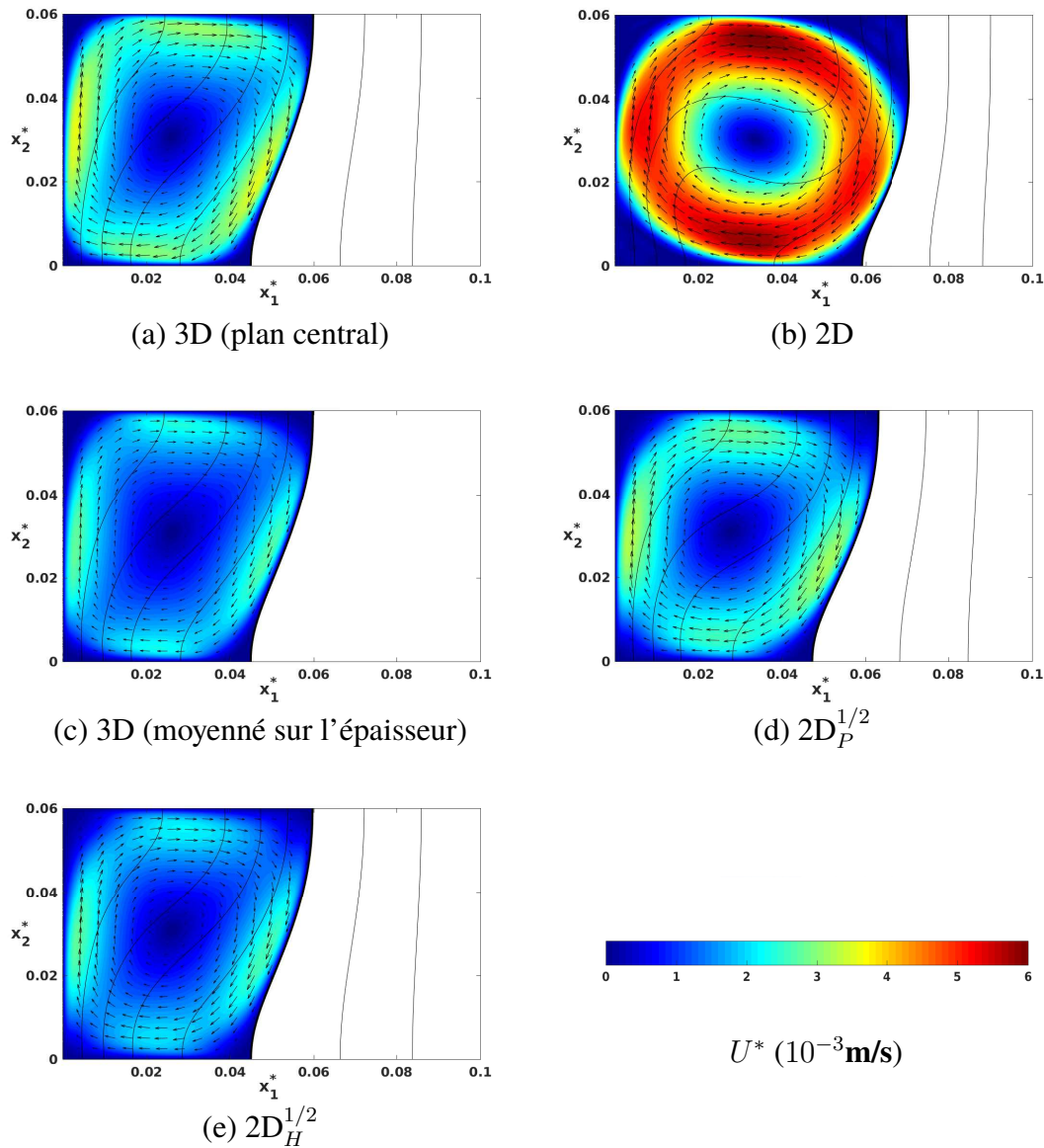


FIGURE III.3 : Champs de vitesse (niveaux d'intensité de couleur et vecteurs) dans la zone de la phase liquide et champs de température (isothermes noires (avec un pas de 0.5 K)) obtenus avec les différents modèles pour le second cas, 'cas (2)', d'équilibre de phase. La position et la forme du front solide-liquide correspond à l'isotherme  $T^* = T_f^*$ . (a) : modèle 3D (dans le plan de coupe central défini sur la figure II.1), (b) : modèle 2D, (c) : modèle 3D (résultats moyennés sur l'épaisseur le long de  $x_3^*$ ), (d) : modèle  $2D_P^{1/2}$  et (e) : modèle  $2D_H^{1/2}$ .

duisent des structures d'écoulement moins pertinentes avec, à chaque fois, deux zones de recirculation marquées, une en haut du côté du front solide-liquide et l'autre en bas du côté de la paroi chaude. Ces zones de recirculation sont plus visibles dans le cas (1). Par ailleurs, dans les deux cas, les isothermes sont trop déformées. Le transfert de chaleur par convection entre la paroi chaude et le front solide-liquide est surestimé. Les formes et les positions du



front s'en retrouvent donc affectées et ne sont pas bien prédites. Les volumes solides sont significativement plus petits que dans les résultats 3D.

La [figure III.2\(d\)](#) et la [figure III.3\(d\)](#) montrent que le modèle  $2D_P^{1/2}$ , qui impose un effet dissipatif en prenant en compte un frottement au niveau des parois latérales, réduit l'intensité de l'écoulement convectif dans la zone liquide par rapport au modèle 2D. Les prédictions du modèle  $2D_P^{1/2}$  se rapprochent plus des résultats 3D sur la structure de l'écoulement convectif. La position du front 3D est mieux prédite qu'avec le modèle 2D classique dans chacun des deux cas considérés. Toutefois, des différences subsistent encore. En effet, bien que les vitesses obtenues par le modèle  $2D_P^{1/2}$  ([figure III.2\(d\)-III.3\(d\)](#)) soient plus petites que celles obtenues avec le modèle 3D au centre de la cavité ([figure III.2\(a\)-III.3\(a\)](#)), elle restent plus grandes que les vitesses 3D moyennées sur l'épaisseur ([figure III.2\(c\)-III.3\(c\)](#)). Cela est plus visible pour le cas (2) et explique bien pourquoi les fronts  $2D_P^{1/2}$  sont plus à droite que les fronts 3D (voir aussi la [figure III.5](#)). Effectivement, à cause de cette surestimation de l'intensité convective, les isothermes obtenues sont différentes. Cela aboutit à des fronts solide-liquide différents des fronts 3D dans les deux cas étudiés. Les zones solides prédites sont à nouveau plus petites que celles obtenues avec le modèle 3D.

Les [figures III.2\(e\)](#) et [III.3\(e\)](#) illustrent les résultats obtenus avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  utilisant l'approche convecto-diffusive pour le calcul de  $\delta_{optimal}^*$ . La comparaison de ces résultats obtenus avec ce modèle et les résultats 3D montre une concordance satisfaisante. En effet, les fortes intensités convectives prédites par les autres modèles 2D dans les domaines liquides sont nettement atténuées. Le champ de température obtenu pour chaque cas est mieux estimé aussi. Les formes et les positions des fronts ainsi que l'épaisseur des zones liquides et solides prédites par le modèle 3D semblent être bien retrouvées.

Pour une comparaison qualitative et détaillée des résultats obtenus avec les différents modèles numériques (3D, 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ ), les profils de température à mi-hauteur de la cavité, en  $x_2^* = 3$  cm, sont tracés sur la [figure III.4](#). Les profils obtenus dans le cas (1) sont donnés sur la [figure III.4\(a\)](#) et ceux obtenus dans le cas (2) sont donnés sur la [figure III.4\(b\)](#). Sur ces figures, les résultats du modèle  $2D_H^{1/2}$  sont ceux obtenus en utilisant l'approche convecto-diffusive pour l'estimation de  $\delta_{optimal}^*$ .

Les positions des fronts solide-liquide données par tous les modèles, pour chacun des deux cas simulés et en régime stationnaire, sont représentées sur la [figure III.5](#). Les fronts correspondant au cas (1) sont donnés sur la [figure III.5\(a\)](#) et ceux correspondant au cas (2) sur la [figure III.5\(b\)](#). La comparaison entre les deux fronts  $2D_H^{1/2}$ , obtenus selon que l'approche considérée pour l'estimation de  $\delta_{optimal}^*$  est l'approche diffusive ou l'approche convecto-diffusive, y est aussi donnée.

Sur la [figure III.4](#), dans les deux cas étudiés et pour chaque modèle numérique, le point de discontinuité du gradient horizontal de température indique le passage d'une phase à une autre, et donc la position du front solide-liquide. En effet, en cette position, le transfert de chaleur passe d'un transfert convecto-diffusif dans le domaine liquide (à gauche du point de discontinuité) à un transfert diffusif dans le domaine solide (à droite du point de discontinuité). En observant le profil de température obtenu avec le modèle 2D (lignes bleues), la conséquence de la surestimation de l'intensité convective dans le domaine liquide par rapport à celle prédite par le modèle 3D sur le champ de température est nettement visible.

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

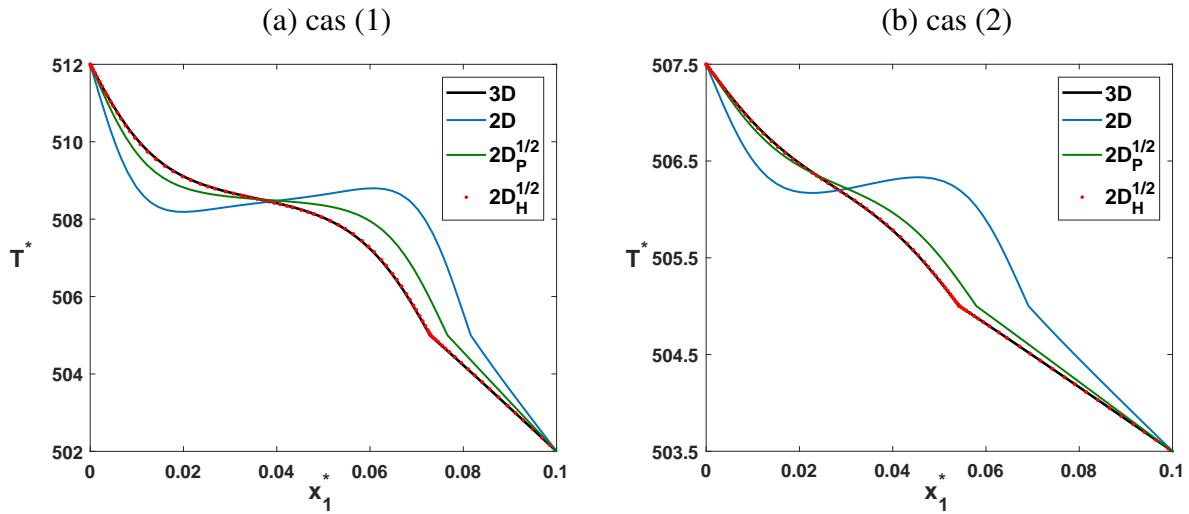


FIGURE III.4 : Profils de température à mi-hauteur de la cavité en  $x_2^* = 3$  cm obtenus avec les différents modèles (3D, 2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ ) pour les deux cas d'équilibre de phase (1) et (2) considérés.

En effet, les gradients thermiques 2D aux parois sont plus forts que ceux obtenus avec les autres modèles. Cela apparait clairement sur la pente des courbes bleues aux parois (la paroi chaude en  $x_1^* = 0$  cm et la paroi froide en  $x_1^* = 10$ ) qui est, dans les deux cas considérés, plus forte que celle donnée par les autres modèles. Le flux de la chaleur extraite de la paroi chaude et qui est complètement restituée à la paroi froide en régime permanent, est donc plus grand dans les résultats 2D qu'il ne l'est avec les autres modèles. Les fronts solide-liquide ainsi obtenus avec le modèle 2D sont plus près de la paroi froide, le volume solide 2D est donc plus petit. Ces fronts 2D ont aussi une forme différente par rapport aux autres modèles (fig. III.2 et III.3) à cause la forte intensité de la boucle de l'écoulement convectif prédite.

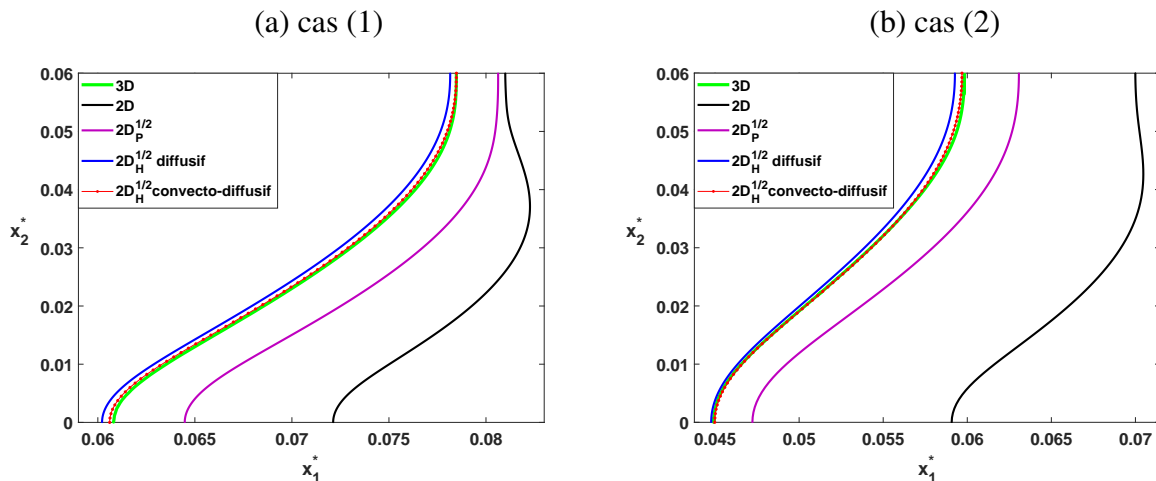


FIGURE III.5 : Positions du front solide-liquide obtenues par les différents modèles pour les deux cas d'équilibre de phase (1) et (2) considérés.

Le modèle  $2D_P^{1/2}$  donne donc des profils de température plus proches des profils 3D que

ne le sont les profils purement 2D, et cela dans les deux cas considérés (voir la [fig. III.4](#)). Les pentes aux parois du profil de température données par le modèle  $2D_P^{1/2}$  (lignes vertes sur la [fig. III.4](#)) sont plus petites que celles données par le modèle 2D (lignes bleues), mais restent supérieures à celles prédites par le modèle 3D. Les forts flux de la chaleur extraite de la paroi chaude avec le modèle 2D sont donc bien atténués par le modèle  $2D_P^{1/2}$ , mais restent supérieurs à ceux donnés par le modèle 3D. Les fronts solide-liquide, en régime permanent, ainsi prédits par le modèle  $2D_P^{1/2}$  sont donc différents des fronts 3D avec, ici encore, un volume solide plus petit (voir la [fig. III.5](#)). Les formes des fronts  $2D_P^{1/2}$  sont tout de même plus proches des formes 3D que ne le sont les fronts 2D. Le freinage minimal considéré dans les modèles  $2D_P^{1/2}$  et qui réduit l'intensité des vitesses de la structure convective ( voir la [fig. III.2](#) et la [fig. III.3](#)), permet bien d'améliorer les prédictions 2D, mais les résultats 3D ne sont pas retrouvés. Les différences entre les résultats  $2D_P^{1/2}$  et les résultats 3D sont encore considérables.

La [figure III.4](#) montre que le modèle  $2D_H^{1/2}$ , avec l'approche convecto-diffusive pour l'estimation de  $\delta_{optimal}^*$ , donne des profils de température quasiment superposés aux profils 3D. Les pentes aux parois des profils de température données par le modèle  $2D_H^{1/2}$  (points rouges sur la [fig. III.4](#)) sont plus petites que celles données par le modèle 2D (lignes bleues) et le modèle  $2D_P^{1/2}$  (lignes vertes). Les forts flux de la chaleur extraite de la paroi chaude avec ces deux précédents modèles sont donc bien atténués par le modèle  $2D_H^{1/2}$ , et semblent bien correspondre à ceux donnés par le modèle 3D. Les fronts solide-liquide ainsi obtenus avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  utilisant l'approche convecto-diffusive, en régime permanent et pour les deux cas considérés, sont en très bon accord avec les fronts 3D, que ce soit en ce qui concerne leur forme ou leur position (voir la [fig. III.5](#)).

La [figure III.5](#) montre aussi les deux fronts obtenus avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  selon que l'approche utilisée pour l'estimation de  $\delta_{optimal}^*$  est l'approche diffusive (fronts représentés en lignes bleues) ou l'approche convecto-diffusive (fronts représentés en lignes et points rouges). Les deux approches donnent des résultats plus proches des résultats 3D que ne le sont les résultats obtenus avec les autres modèles 2D (2D classiques et  $2D_P^{1/2}$ ). L'approche convecto-diffusive donne, toutefois, de meilleurs résultats que l'approche diffusive. En effet, les fronts de la méthode convecto-diffusive sont, dans les deux cas, quasiment identiques aux fronts 3D, tandis que les fronts obtenus avec la méthode diffusive présentent de légers écarts avec les fronts 3D.

Pour quantifier les écarts entre les résultats prédits par les différents modèles 2D (2D,  $2D_P^{1/2}$  et  $2D_H^{1/2}$ ) et le modèle 3D, on estime les erreurs relatives sur les positions des différents fronts de ces modèles par rapport aux positions du front 3D. L'erreur absolue sur la position du front, pour un modèle, un cas et une hauteur (suivant  $x_2$ ) donnés, est obtenue en mesurant la différence entre la position horizontale (suivant  $x_1$ ) du front donnée par ce modèle et la position du front 3D. L'erreur relative est obtenue en normalisant l'erreur absolue avec la position du front 3D. En répétant cette estimation sur plusieurs hauteurs de la cavité ( $x_2$  variant de 0 à 0.06 m) et en faisant une moyenne, on obtient l'erreur relative moyenne entre le front donné par le modèle considéré et le front 3D. On peut estimer aussi l'erreur relative maximale sur la position du front étudié par rapport au front 3D, pour cela on cherche la valeur maximale des erreurs relatives estimées sur les différentes hauteurs.

### III.1. CAS D'ÉQUILIBRE DE PHASES SOLIDE-LIQUIDE

Le modèle 2D classique donne des fronts avec des erreurs moyennes de presque 12% et 26%, et des erreurs maximales supérieures à 18% et à 32% respectivement pour les cas (1) et (2). Le modèle  $2D_P^{1/2}$  réduit ces erreurs à 4.84% et 6.00% pour les erreurs moyennes, et à 6.06% et 6.82% pour les erreurs maximales. Comme indiqué sur la [figure III.5](#), avec ces plages d'erreurs, les différences avec les fronts 3D ne sont toujours pas négligeables.

Le modèle  $2D_H^{1/2}$  avec l'approche basique (diffusive) pour l'estimation de  $\delta_{optimal}^*$  réduit considérablement les erreurs précédemment obtenues avec les autres modèles. Les erreurs moyennes sont seulement de 0.79% pour le cas (1) et 0.74% pour le cas (2). Les erreurs maximales sont quant à elles de 1.01% et 1.06% respectivement pour les deux cas. Les résultats ainsi obtenus avec cette approche sont assez satisfaisants, mais le modèle  $2D_H^{1/2}$  avec l'approche convecto-diffusive fait encore mieux et il est le plus précis pour la prédiction du front solide-liquide 3D. Les erreurs moyennes ne sont que de 0.11% et 0.14%, tandis que les erreurs maximales sont de 0.22% et 0.34%, respectivement pour les cas (1) et (2).

Le [tableau III.3](#) résume toutes les différentes erreurs obtenues avec les différents modèles, et

	2D	$2D_P^{1/2}$	$2D_H^{1/2}$ (diffusif)	$2D_H^{1/2}$ (convecto-diffusif)
$L_l$	-	-	$\frac{(1)0.0538[m]}{(2)0.0455[m]}$	$\frac{(1)0.0751 [m]}{(2)0.0584[m]}$
$Gr$	-	-	$\frac{(1)5.818 \times 10^6}{(2)2.461 \times 10^6}$	$\frac{(1)4.174 \times 10^6}{(2)2.041 \times 10^6}$
$\delta^*/A_w$	-	-	$\frac{(1)0.1106 \times H}{(2)0.1474 \times H}$	$\frac{(1)0.1219 \times H}{(2)0.1596 \times H}$
Erreur relative moyenne sur la position du front par rapport au front 3D	$\frac{(1)11.80\%}{(2)25.80\%}$	$\frac{(1)4.84\%}{(2)6.00\%}$	$\frac{(1)0.79\%}{(2)0.74\%}$	$\frac{(1)0.11\%}{(2)0.14\%}$
Erreur relative maximum sur la position du front par rapport au front 3D	$\frac{(1)18.61\%}{(2)32.39\%}$	$\frac{(1)6.06\%}{(2)6.82\%}$	$\frac{(1)1.01\%}{(2)1.06\%}$	$\frac{(1)0.22\%}{(2)0.34\%}$

Tableau III.3 : Comparaison des longueurs liquides  $L_l$  estimées, des nombres de Grashof  $Gr$  et des paramètres  $\delta_{optimal}^*$ , obtenus avec les approches  $2D_H^{1/2}$  (diffusive) et  $2D_H^{1/2}$  (convecto-diffusive). Les erreurs moyennes et maximales sur les positions des fronts solide-liquide obtenus par les modèles 2D et  $2D^{1/2}$  par rapport aux positions des fronts obtenus par le modèle 3D sont données pour les deux cas considérés. <sup>(1)</sup> fait référence au cas (1), et <sup>(2)</sup> fait référence au cas (2).

cela pour les deux cas (1) et (2) considérés. Il donne aussi les estimations de la profondeur liquide  $L_l$ , obtenues avec les approches diffusive et convecto-diffusive, et qui sont utilisées dans le modèle  $2D_H^{1/2}$ . Comme expliqué auparavant,  $L_l$  est sous-estimé avec l'approximation diffusive. Les valeurs obtenues par les deux approches pour le nombre de Grashof  $Gr$  et le paramètre  $\delta_{optimal}^*$  sont donc différentes, mais restent raisonnablement proches. Il faut noter aussi que la condition de validité des modèles  $2D^{1/2}$  donnée par l'[équation II.20](#) est satisfaite

pour ces deux approches utilisées.

Les valeurs de  $\delta_{optimal}^*$  obtenues avec l'approche diffusive sont plus petites que celles obtenues avec l'approche convecto-diffusive et cela pour les deux cas considérés. Comme montré au précédent chapitre (voir la [figure II.11](#)), les petites valeurs de  $\delta^*$  indiquent des profils transverses de vitesse plus aplatis avec une plus grande pente de variation de la vitesse aux parois. La dissipation induite par les parois latérales qui est prise en compte dans l'approche diffusive est donc plus grande que celle prise en considération par l'approche convecto-diffusive. Cette plus grande dissipation a pour effet de réduire les intensités des vitesses des boucles convectives et donc aussi les flux de la chaleur extraite de la paroi chaude. C'est pour cela que les fronts prédits par l'estimation diffusive sont plus à gauche que les fronts convecto-diffusifs, avec des volumes solides légèrement plus grands. La meilleure prise en compte de la dissipation induite par les parois latérales a pour résultat la bonne estimation de l'intensité convective qui joue sur la nature du transfert de chaleur entre les deux parois et cela aboutit à une meilleure prédiction de la position et de la forme du front solide-liquide. Les modèles  $2D_H^{1/2}$  sont donc tout aussi fiables pour l'étude de la convection naturelle que pour l'étude de ces cas de changement de phases solide-liquide. Dans la suite de ce chapitre, il sera question de mettre à profit ces modèles pour la simulation d'un processus de solidification total d'une phase liquide vers une phase solide.

## III.2 Processus de solidification

Dans cette partie de l'étude, on s'intéresse à un processus de solidification complet aboutissant à la formation d'un lingot d'étain pur. Ce processus est réalisé en faisant refroidir de l'étain liquide, initialement à une température supérieure à la température de fusion, jusqu'à ce qu'il se soit totalement solidifié. Les résultats de nos simulations numériques de ce processus sont directement comparés aux résultats expérimentaux obtenus avec le montage expérimental de référence 'Afrodite' [[91](#), [92](#), [99](#), [102](#)]. Ces résultats expérimentaux sont nouveaux et exclusivement rapportés dans cette partie de l'étude. Le modèle  $2D_H^{1/2}$  qui s'est avéré être le plus précis entre les modèles 2D et le plus à même à se substituer au modèle 3D est donc directement utilisé pour simuler ce processus. Les résultats numériques obtenus avec ce dernier seront confrontés aux résultats expérimentaux.

### III.2.1 Processus expérimental avec 'Afrodite'

L'expérience de solidification a été réalisée avec le montage expérimental 'Afrodite'. Ce dernier, développé au laboratoire SIMAP-EPM, a servi de référence pour la validation de nombreux modèles numériques traitant de la solidification de matériaux purs et d'alliages métalliques [[75](#), [76](#), [78](#), [90](#), [103–106](#)]. Ce dispositif est schématisé sur la [figure I.9](#).

Le processus expérimental de solidification de l'étain pur comprend différentes étapes. L'étain est d'abord introduit dans le creuset. Il est ensuite chauffé lentement, en utilisant à la fois les échangeurs de chaleur droit et gauche, jusqu'à ce que sa température dépasse la température de fusion de l'étain  $T_f^*$  (environ 550 K), l'échantillon est alors entièrement en phase liquide. Une différence de température de 20 K entre les deux échangeurs de chaleur est alors appliquée et maintenue constante jusqu'à la fin du processus. Les deux échangeurs de

chaleur sont d'abord maintenus à des températures constantes (toutes les deux au dessus de  $T_f^*$ ) pendant plus d'une demi-heure et cela pour permettre l'établissement de l'écoulement de convection naturelle. Ensuite, le même taux de refroidissement (-0.03 K/s) est appliqué sur les deux échangeurs de chaleur, de sorte que les températures des parois chaude et froide du creuset diminuent avec le temps. En raison de la différence de température appliquée entre les deux échangeurs (20 K), la température de la paroi froide est la première à descendre en dessous de  $T_f^*$ , suivie plus tard en temps par la paroi chaude. Les premières régions solides, qui apparaissent aux parois quand leur température descend en dessous de  $T_f^*$ , croissent ensuite progressivement (à partir de ces parois vers le centre du creuset) jusqu'à ce que l'échantillon se soit complètement solidifié.

Une évolution typique de la température à un thermocouple est montrée sur la [figure III.6](#) (ligne verte correspondant au thermocouple L<sub>26</sub>). Après le plateau initial correspondant à l'établissement de la convection naturelle, le taux de refroidissement appliqué aux parois induit une diminution régulière de la température dans le bain liquide jusqu'à atteindre la température de fusion. Une sorte de plateau de changement de phase est alors observé avant une reprise de la diminution de la température. Ce pseudo-plateau à la température de fusion, plus ou moins prononcé selon la position du thermocouple dans le creuset (voir la [figure III.10](#)), a été utilisé pour calibrer avec précision les thermocouples de l'échantillon.

### III.2.2 Détermination des conditions aux limites thermiques

Dans le modèle  $2D_{H}^{1/2}$ , le creuset du montage expérimental est modélisé par une simple cavité rectangulaire où les températures à imposer aux parois droite et gauche doivent être déterminées. Afin d'assurer la fiabilité de ces simulations numériques, la détermination de conditions aux limites thermiques appropriées qui correspondent à l'expérience doit être réalisée. Ce n'est pas une tâche évidente car, dans le dispositif expérimental, la température n'est pas directement imposée aux parois du creuset, mais aux échangeurs de chaleur. Les températures auxquelles se trouvent ces deux éléments du dispositif (parois du creuset et échangeur), au cours du processus de solidification, ne sont pas les mêmes et cela à cause de la présence d'une résistance de contact thermique variable. La détermination de la température à la paroi est réalisée en utilisant la conservation du flux de chaleur entre l'échangeur de chaleur gauche (ou droit) et la paroi chaude (ou froide) le long de la direction  $x_1^*$ . Pour le côté gauche, on peut en effet écrire :

$$\phi_{\text{échangeur gauche}} = \phi_{\text{paroi chaude}} \Leftrightarrow k_{\text{cuivre}} \left. \frac{dT^*}{dx_1^*} \right|_{0^-} = k_{\text{étain}} \left. \frac{dT^*}{dx_1^*} \right|_{0^+} \quad (\text{III.14})$$

où  $\phi_{\text{échangeur gauche}}$  est le flux de chaleur échangée entre l'échangeur gauche et la paroi gauche et  $\phi_{\text{paroi chaude}}$  est le flux de chaleur échangée entre la paroi gauche et le bain fondu en contact avec elle.  $k_{\text{cuivre}}$  et  $k_{\text{étain}}$  sont respectivement les conductivités thermiques du cuivre (composant l'échangeur) et de l'étain (contenu dans le creuset). Pour la conductivité thermique de l'étain, le choix entre les deux valeurs données par le [tableau III.1](#) (celle de la phase solide ou celle de phase liquide) est fait en fonction de la température des thermocouples du bain.

La dérivée de  $T^*$  par rapport à  $x_1^*$  de l'[équation III.14](#) est estimée en  $0^-$  avec une différence finie décentrée amont du deuxième ordre, et cela en utilisant chacun des trois thermocouples

se trouvant à la même hauteur au sein de l'échangeur de chaleur gauche, puis en faisant la moyenne des quantités obtenues aux 3 hauteurs de thermocouples. On trouve donc :

$$\left. \frac{dT^*}{dx_1^*} \right|_{0^-} = \frac{1}{3} \left[ \frac{3(T_{FL1} + T_{FL3} + T_{FL5}) - 4(T_{FL2} + T_{FL4} + T_{FL6}) + (T_{FL7} + T_{FL8} + T_{FL9})}{2e_1^*} \right], \quad (\text{III.15})$$

où  $e_1^* = 1.5$  cm est l'espacement horizontal entre les thermocouples des échangeurs de chaleur. La dérivée  $dT^*/dx_1^*$  en  $0^+$  est estimée quant à elle avec une différence finie décentrée aval du premier ordre entre  $T_h^*$ , la température recherchée à la paroi chaude, et la température au premier thermocouple dans l'échantillon, et ce aux 3 hauteurs qui sont celles des thermocouples de l'échangeur, puis en faisant à nouveau une moyenne sur les 3 quantités obtenues :

$$\left. \frac{dT^*}{dx_1^*} \right|_{0^+} = \frac{1}{3} \left[ \frac{3T_h^* - (T_{L1} + T_{L21} + T_{L41})}{e_2^*} \right], \quad (\text{III.16})$$

où  $e_2^* = 0.5$  cm est la distance entre la paroi chaude et la première colonne de thermocouples du creuset. Ces deux estimations de la dérivée de  $T^*$  de part et d'autre de la paroi chaude en  $x_1^* = 0$  sont utilisées à chaque temps discret dans l'équation III.14 pour déduire  $T_h^*$ , la température à la paroi chaude. La même méthode est utilisée pour déterminer la température de la paroi froide  $T_c^*$ .

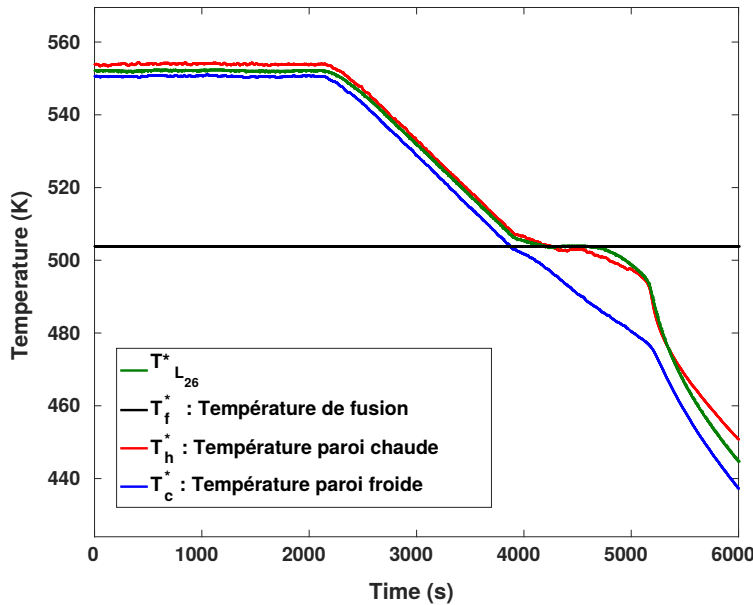


FIGURE III.6 : Évolution typique de la température à un thermocouple ( $L_{26}$ ) et des températures expérimentales  $T_h^*(t)$  et  $T_c^*(t)$  estimées respectivement aux parois chaude et froide durant le processus de solidification de l'étain pur. Le taux de refroidissement nominal est de  $-0.03$  K/s,  $T_f^*$  est la température de fusion. Les courbes de  $T_h^*(t)$  et  $T_c^*(t)$  sont utilisées comme conditions aux limites lors des simulations numériques.

Les températures estimées au niveau des parois chaude et froide avec l'approche présentée, à partir du moment où un gradient de température est imposé au niveau des échangeurs

pour induire une convection naturelle, sont tracées en fonction du temps sur la [figure III.6](#). Ces températures,  $T_h^*(t)$  et  $T_c^*(t)$ , sont utilisées comme conditions aux limites thermiques dans notre modèle numérique.

### III.2.3 Maillage utilisé

Le modèle  $2D_H^{1/2}$  pour la simulation numérique de ce processus de solidification est similaire à celui utilisé pour les cas d'équilibre de phases solide-liquide. La différence principale entre les deux processus est que, dans les cas d'équilibre de phases, les phases solide et liquide sont présentes et coexistent tout le long de la simulation, alors que, dans ce processus de solidification, seule la phase liquide est présente au sein de la cavité au début du processus. Cependant, l'utilisation de la géométrie déformable et de la méthode à maillage dynamique pour le suivi du front solide-liquide, nécessite que les deux domaines solide et liquide soient définis et présents au sein du domaine géométrique étudié et cela pendant toute la simulation. Deux régions solides doivent donc être définies dès l'instant initial du processus. Ces deux régions permettront le suivi des fronts apparaissant au niveau des parois lors de leur refroidissement. Pour répondre à cette nécessité, deux très fines couches de solide, sont ajoutées dès le départ au modèle. Elles sont placées de part et d'autre de la cavité, collées aux parois, là où la solidification devrait débiter. Leur épaisseur de 0.1 mm ne représente qu'un millième de la longueur du domaine.

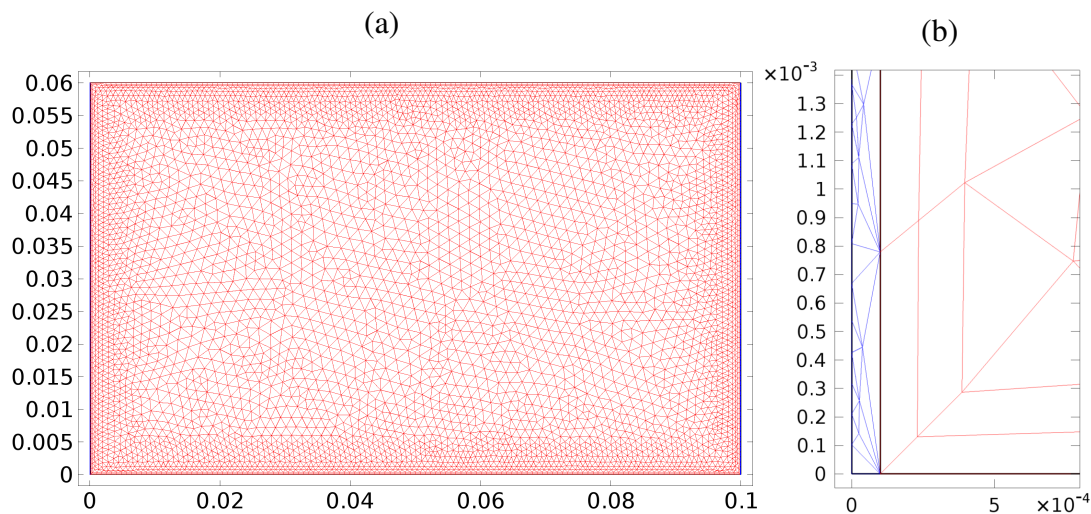


FIGURE III.7 : Le maillage utilisé dans le modèle  $2D_H^{1/2}$  pour la simulation du processus de solidification. (a) Vue du maillage initial à  $t = 0$  s dans toute la cavité : Les deux régions solide aux parois gauche et droite sont à peine remarquables. (b) Zoom sur le coin gauche en bas près de  $x_1^* = x_2^* = 0$  : La région maillée en bleu montre la couche solide ajoutée tandis que la région maillée en rouge représente la région liquide.

La [figure III.7\(a\)](#) montre le maillage initial utilisé dans le modèle  $2D_H^{1/2}$  pour l'étude de ce processus de solidification. Le domaine liquide est représenté en rouge et les domaines solides en bleu. Les deux régions solides ajoutées au niveau des parois chaude et froide sont à peine visibles. Elles apparaissent mieux sur la [figure III.7\(b\)](#) qui donne un zoom du coin



inférieur gauche de la cavité (près de  $x_1^* = x_2^* = 0$ ). De la même manière que dans les modèles précédents pour l'étude des cas d'équilibre de phases, les régions solide et liquide sont séparées par une limite représentant le front de solidification. Comme ces deux couches sont ajoutées ici dès le début pour faire fonctionner le modèle correctement, les deux frontières entre chacune d'elles et le domaine liquide doivent être correctement paramétrées afin de bien simuler le processus étudié. En effet ces deux frontières doivent seulement jouer le rôle des parois refroidies avec des vitesses de déplacement nulles tant que les températures aux parois ( $T_h^*(t)$  et  $T_c^*(t)$ ) sont supérieures à la température de fusion  $T_f^*$  (*i.e.* avant l'apparition réelle du front solide-liquide). Elles doivent ensuite représenter les fronts solide-liquide apparaissant aux parois quand les températures de ces dernières passent en dessous de la température de fusion  $T_f^*$  et avec des vitesses de déplacement données par la condition de Stefan. Comme expliqué précédemment, dans le module 'Deformed Geometry' ces frontières entre les domaines solides et le domaine liquide jouent le rôle de parois délimitant les domaines et on peut y imposer des vitesses de déplacement et des conditions aux limites thermiques. Les conditions imposées à ces deux frontières dans ce cas sont :

- Sur la première frontière qui est collée à la paroi chaude (notée 'front1') :

Tant que  $T_h^*(t) > T_f^*$ ,  $T_{front1}^* = T_h^*(t)$  et  $V_{front1}^* = 0$ .

Dès que  $T_h^*(t) < T_f^*$ ,  $T_{front1}^* = T_f^*$  et  $V_{front1}^*$  est alors estimée avec la condition de Stefan donnée par l'équation III.5.

- Sur la deuxième frontière collée à la paroi froide (notée 'front2') :

Tant que  $T_c^*(t) > T_f^*$ ,  $T_{front2}^* = T_c^*(t)$  et  $V_{front2}^* = 0$ .

Dès que  $T_c^*(t) < T_f^*$ ,  $T_{front2}^* = T_f^*$  et  $V_{front2}^*$  est alors obtenue avec la condition de Stefan donnée par l'équation III.5.

L'épaisseur de ces couches solides ajoutées a été réduite progressivement de 3 mm jusqu'à 0.1 mm, épaisseur à partir de laquelle le temps de solidification converge, *i.e.* n'est plus affecté par l'épaisseur initiale des couches solides.

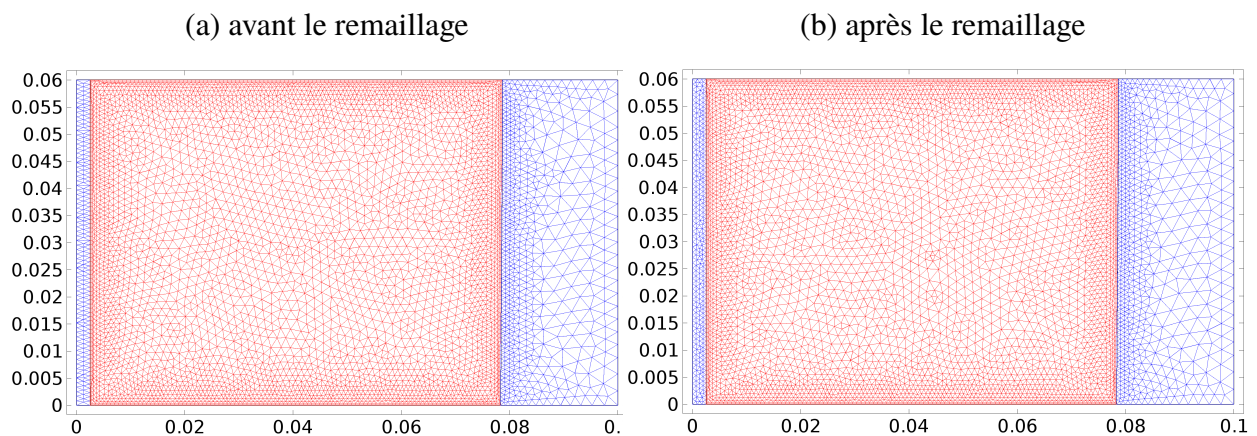


FIGURE III.8 : Deux maillages, l'un avant et l'autre après une opération de remaillage automatique utilisée au cours de la résolution numérique.

Lors de l'étude des cas d'équilibre de phases solide-liquide, les distorsions subies par les mailles entre leur état initial et leur état final à l'équilibre restaient relativement faibles, une qualité minimale de maillage était donc maintenue le long du calcul (voir la figure III.1).

Pour ce processus de solidification, comme montré sur la [figure III.7\(b\)](#), le nombre de mailles contenues dans la couche solide ajoutée est très limité. Ces mailles subiront de fortes distorsions dès que le front solide-liquide croîtra de la paroi vers le bain liquide. Afin d'assurer le maintien d'un maillage de bonne qualité et d'assurer la convergence du modèle numérique, un remaillage automatique est appliqué. Celui-ci est déclenché dès que les mailles subissent une distorsion supérieure à une limite imposée. Cela permet la génération de mailles supplémentaires dans ces régions solides au fur et à mesure de leur croissance. Cette technique permet aussi la réduction du nombre de mailles dans le domaine liquide, dont la largeur diminue avec l'avancée des fronts solide-liquide, tout en gardant une qualité de maillage suffisante. La [figure III.8](#) montre le résultat d'une opération de remaillage au cours du calcul. La [figure III.8\(a\)](#) montre le maillage juste avant le remaillage et la [figure III.8\(b\)](#) montre le nouveau maillage généré. Pour ce cas présenté, la condition sur la distorsion est effective au niveau de la partie solide provenant de la paroi de gauche (la paroi chaude). En regardant de plus près sur cette région, le remaillage automatique a permis de générer un plus grand nombre de mailles et la qualité du maillage à ce niveau est donc nettement améliorée.

Maintenant que les conditions aux limites ainsi que les autres données relatives à l'expérience sont connues, il ne reste plus qu'à déterminer la valeur du paramètre  $\delta_{optimal}^*$  utilisé dans le modèle  $2D \frac{1}{H}$ . Cette valeur est estimée avec les données expérimentales de température (les températures imposées aux parois sont données sur la [figure III.6](#)), au début du processus de solidification lorsque la température de la paroi froide,  $T_c^*$ , atteint la température de fusion  $T_f^*$ . La différence de température effective entre les parois chaude et froide est alors égale à 3.6 K. Le nombre de Grashof correspondant à cet écart de température est  $Gr = 2.06 \times 10^6$ . L'équation II.21 donne alors  $\delta_{optimal}^* = 0.1590 \times A_w$  pour ce cas de solidification.

### III.2.4 Résultats et discussion

La [figure III.9](#) présente les résultats numériques et les résultats expérimentaux du processus de solidification étudié à différents instants entre le début et la fin de la solidification. Les résultats numériques obtenus avec le modèle  $2D \frac{1}{H}$  sont alignés de manière verticale sur la gauche et les résultats expérimentaux correspondants (aux mêmes instants) sur la droite. La phase solide  $y$  est représentée en marron et la phase liquide en bleu. Il est à noter que les résultats expérimentaux sont limités à la zone couverte par le réseau des 50 thermocouples (fenêtre d'acquisition). Cette zone est également représentée sur les résultats numériques, avec un rectangle noir, pour une meilleure comparaison. La [figure III.9](#) montre un bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux. Comme la température de la paroi froide ( $T_c^*$ ) est la première température à descendre en dessous de la température de fusion ( $T_f^*$ ), la solidification de l'échantillon d'étain commence à partir du côté droit. Un deuxième front solide-liquide apparaît plus tard au cours du processus, du côté gauche de la cavité, quand la température de la paroi chaude ( $T_h^*$ ) passe elle aussi en dessous de  $T_f^*$ . Les deux fronts progressent alors vers le centre de la cavité, réduisant la largeur de la zone liquide, pour se rencontrer finalement à une position  $x_1^*$  plus proche du côté gauche de la cavité. Dans l'expérience, les deux fronts se touchent en  $x_1^* \simeq 2.5$  cm et le processus de solidification dure  $t^* = 1201$  s, tandis que dans les simulations numériques la position de rencontre des deux fronts est  $x_1^* \simeq 2,9$  cm et le temps de solidification est  $t^* = 1283$  s. On peut également noter qu'aux instants  $t^* = 4750$  s et  $t^* = 5000$  s, la forme des fronts solide-liquide dans les résul-

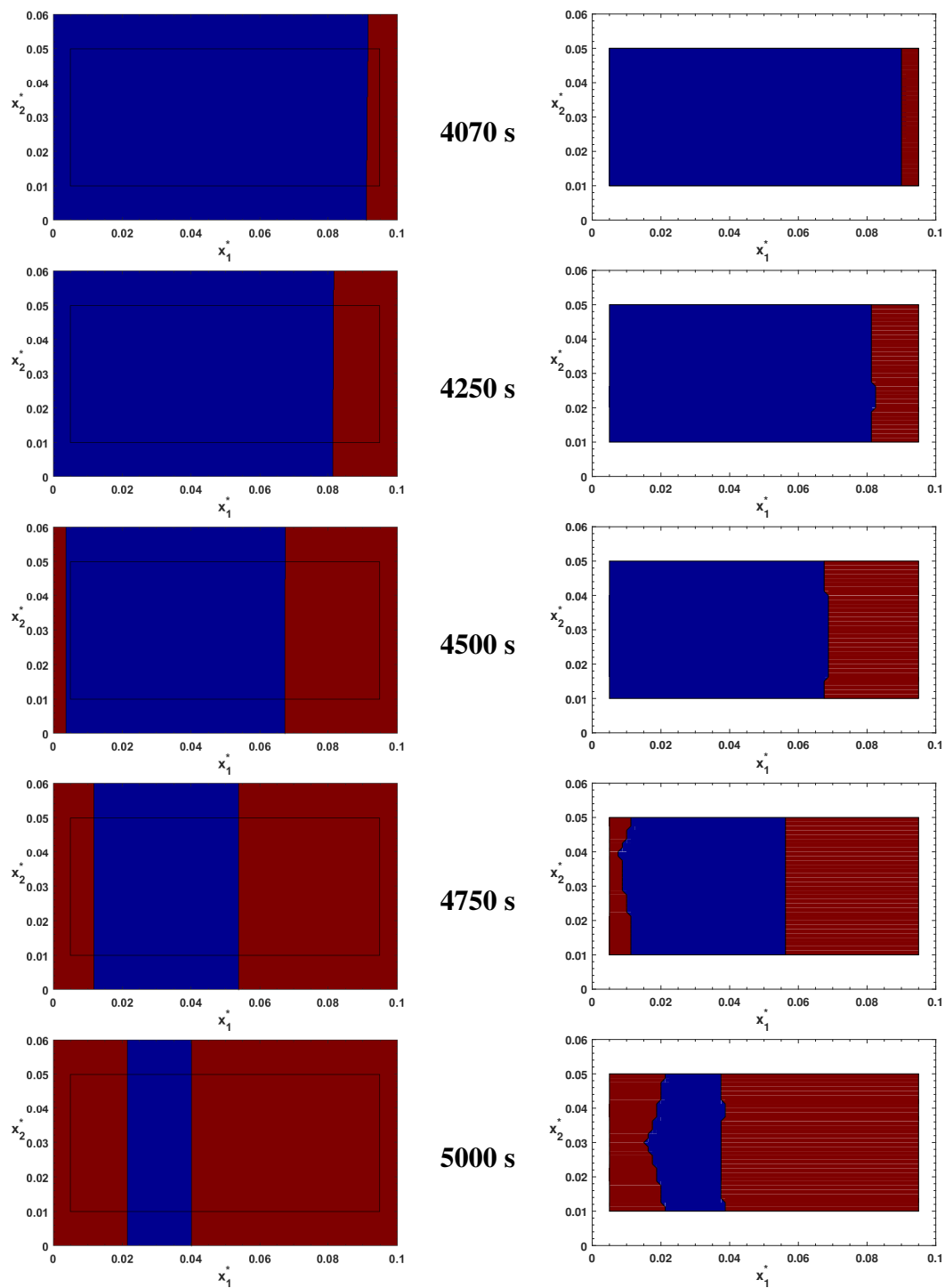


FIGURE III.9 : Résultats expérimentaux (à droite) et numériques (à gauche et obtenues avec le modèle  $2D_H^{1/2}$ ) donnant les positions des fronts solide-liquide à différents instants durant le processus de solidification. Le rectangle noir sur les résultats numériques représente la zone où les données expérimentales de température (obtenues avec la matrice des cinquante thermocouples) sont disponibles.

tats expérimentaux n'est pas aussi plane que dans les simulations numériques, cela étant plus marqué pour le front gauche. Cet effet ne peut pas être dû à la convection car, à ces instants du processus, les deux fronts sont déjà apparus et la zone liquide restante est quasi-isotherme (cela est illustré sur la [figure III.11](#)). Il est certainement la conséquence de conditions aux limites thermiques imparfaites et non homogènes sur la paroi chaude. De plus, la matrice de thermocouples, à partir de laquelle est déterminée la forme du front expérimental, ne contient que cinq éléments sur la hauteur de l'échantillon et la précision sur la position du front est donc limitée.

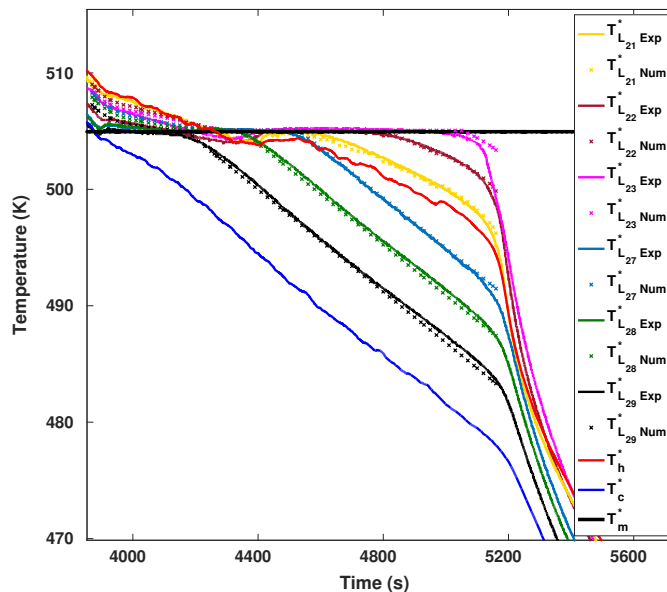


FIGURE III.10 : Évolution de la température expérimentale et numérique en fonction du temps durant le processus de solidification à mi-hauteur de la cavité aux niveau des positions de quelques thermocouples. L'évolution des températures imposées aux parois chaude et froide, respectivement  $T_h^*$  et  $T_c^*$ , ainsi que la température de fusion ( $T_f^*$ ) sont aussi représentées.

La [figure III.10](#) donne l'évolution temporelle des températures mesurées expérimentalement avec les différents thermocouples ( $L_{21}$ ,  $L_{22}$ ,  $L_{23}$ ,  $L_{27}$ ,  $L_{28}$  et  $L_{29}$ ) et les températures calculées avec le modèle  $2D_H^{1/2}$  aux positions correspondantes à ces derniers. Les températures des parois chaude et froide (respectivement  $T_h^*$  et  $T_c^*$ ) et la température de fusion  $T_f^*$  y sont également représentées. La [figure III.11](#), quant à elle, montre les profils de température numériques et expérimentaux à mi-hauteur de la cavité le long de la troisième rangée horizontale de thermocouples allant de  $L_{21}$  à  $L_{30}$ . La [figure III.11\(a\)](#) donne les profils à l'instant  $t^* = 4500$  s et la [figure III.11\(b\)](#) à l'instant  $t^* = 4750$  s.

Les deux figures confirment le bon accord observé entre les résultats du modèle  $2D_H^{1/2}$  et les résultats expérimentaux. Sur la [figure III.10](#), les températures de tous les thermocouples diminuent lentement jusqu'à atteindre la température de fusion. Ces températures restent constantes pendant un certain temps avant de continuer à diminuer. Les différentes étapes du processus de solidification sont également visibles sur cette [figure III.10](#). La température de

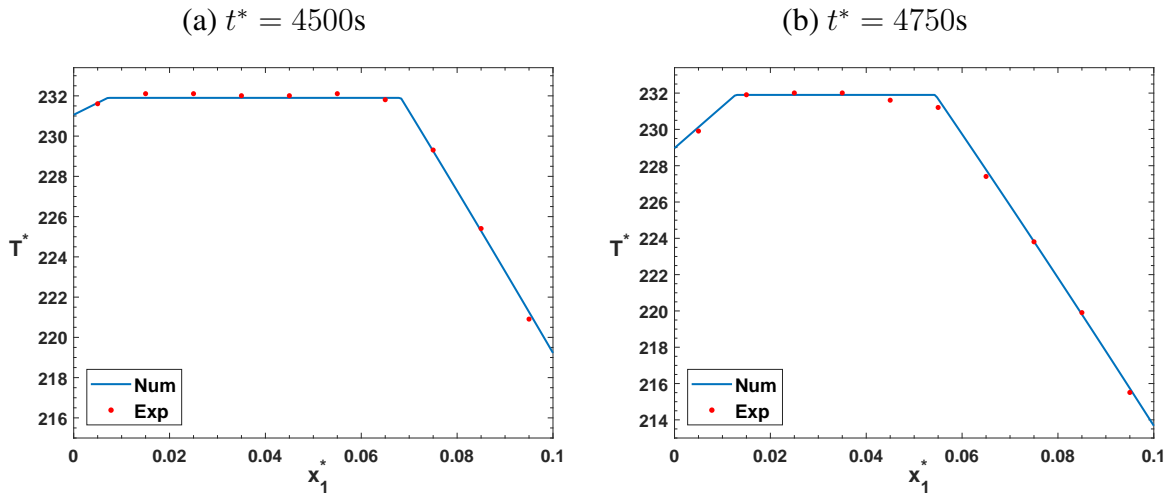


FIGURE III.11 : Profils expérimentaux et numériques de température à mi-hauteur de la cavité à deux instants différents durant le processus de solidification.

la paroi froide,  $T_c^*$  (représentée en bleu foncé sur la [figure III.10](#)), est la première à descendre en dessous de la température de fusion  $T_f^*$ , indiquant l'apparition du front solide-liquide du côté droit. Ce front se déplace ensuite vers la gauche à l'intérieur du bain d'étain. À chaque fois qu'il passe par la position d'un thermocouple, la température de ce même thermocouple quitte la valeur du pseudo-plateau à la température de fusion  $T_f^*$  pour décroître de manière linéaire. Parmi les thermocouples choisis (représentés sur la [figure III.10](#)), comme prévu, le déplacement du front droit (après sa naissance du côté de la paroi froide et lors de son avancée dans le bain d'étain) affecte d'abord  $T_{L29}^*$  (le thermocouple plus près de la paroi froide), puis  $T_{L28}^*$  et ensuite  $T_{L27}^*$ .

De manière similaire, quand le deuxième front apparaît plus tard à gauche (lorsque la température de la paroi chaude,  $T_h^*$  représentée en rouge sur la [figure III.10](#), passe en dessous de  $T_f^*$ ), et qu'il se déplace vers la droite, il affecte successivement  $T_{L21}^*$  (le thermocouple le plus près de la paroi chaude), puis  $T_{L22}^*$  et finalement  $T_{L23}^*$ . Le comportement de pseudo-plateau à la température de fusion  $T_f^*$  (quasiment absent sur  $T_{L29}^*$ ) est particulièrement visible pour les thermocouples allant de  $T_{L21}^*$  à  $T_{L28}^*$  qui sont encore dans la zone liquide quand le deuxième front apparaît. En effet, les résultats numériques et expérimentaux montrent que, à partir de l'apparition du deuxième front, toute la région liquide restante entre les deux fronts est quasi-isotherme à une température proche de  $T_f^*$  (voir aussi la [figure III.11](#)). La température aux thermocouples dans cette région liquide reste alors quasi-constante, proche de  $T_f^*$ , jusqu'à ce que l'un des fronts atteigne la position du thermocouple, induisant alors une diminution linéaire de la température caractéristique de la phase solide. Dans le réseau de thermocouples,  $T_{L23}^*$  en  $x_1^* = 2.5$  cm, est la dernière température à descendre en dessous de  $T_f^*$ , donnant ainsi un long pseudo-plateau et indiquant que les deux fronts se rencontrent à une position  $x_1^*$  près de cette position. Il faut noter que les températures numériques ne sont disponibles que jusqu'au moment de la fin complète de la solidification de l'échantillon à  $t^* = 5170$  s. Cela est dû au fait que le modèle numérique doit conserver une fine zone liquide pour garder sa fiabilité, ce qui empêche le calcul de se poursuivre au delà de la jonction des deux fronts.

### III.3 Conclusion

Des modèles numériques 2D,  $2D_P^{1/2}$ ,  $2D_H^{1/2}$  et 3D pour le traitement de problèmes avec changement de phase solide-liquide de matériaux purs ont été élaborés. Ils sont dérivés des modèles présentés au chapitre précédent pour l'étude de la convection naturelle en présence de la phase liquide uniquement. Pour inclure la phase solide, prendre en considération le changement de phase et permettre le suivi du front solide-liquide, une approche multi-domaines avec une méthode à maillage dynamique a été utilisée. Dans cette approche, les domaines solide et liquide sont définis séparément. La condition de Stefan a aussi été utilisée pour déterminer l'évolution du front solide-liquide séparant ces deux domaines.

Deux premiers cas typiques, où les deux phases solide et liquide atteignent un état d'équilibre, sont d'abord étudiés. Ces cas d'équilibre de phases sont obtenus lorsque la température imposée à la paroi chaude (respectivement froide) est supérieure (respectivement inférieure) à la température de fusion. Il a été montré que le modèle 2D peine à retrouver les bonnes positions de l'interface solide-liquide. Les erreurs relatives maximales sur les positions du front prédites par le modèle 2D, quand elles sont comparées aux résultats 3D, sont respectivement de 18.61% et 32.39% pour les deux cas étudiés. Ceci est attribué à une surestimation des effets convectifs, puisque ce modèle ne tient pas compte de la dissipation visqueuse au niveau des parois latérales. Le modèle  $2D_P^{1/2}$ , prenant en compte un minimum de dissipation induite par les parois latérales, permet d'améliorer les prédictions 2D et se rapproche mieux des résultats 3D. Les erreurs relatives sur les positions du front à l'état d'équilibre sont réduites, respectivement pour les deux cas considérés, à 6.06% et 6.82%. Malgré cette réduction, avec ces niveaux d'erreurs, les écarts avec les prédictions 3D restent notables. En effet, avec ces deux modèles (2D et  $2D_P^{1/2}$ ), les intensités convectives sont plus fortes que celle du modèle 3D, les flux de la chaleur extraite à la paroi chaude sont plus grands, les volumes solides ainsi obtenus à l'équilibre sont nettement plus petits que ceux obtenus avec le modèle 3D.

L'utilisation optimale du modèle  $2D_H^{1/2}$ , qui est rendue possible avec l'équation donnant  $\delta_{optimal}^*$  en fonction du nombre de Grashof et qui a été obtenue au chapitre précédent, nécessite la détermination du nombre de Grashof associé à chacun des cas d'équilibre étudiés. Pour cela deux approches, une diffusive et l'autre convecto-diffusive, ont été utilisées pour estimer la profondeur du domaine liquide qui, elle-même, est utilisée pour l'estimation du nombre de Grashof. Ces différents nombres de Grashof trouvés selon l'approche utilisée ont permis d'obtenir les modèles  $2D_H^{1/2}$  (diffusif) et  $2D_H^{1/2}$  (convecto-diffusif). Il a été montré que ces deux modèles améliorent nettement les prédictions déjà obtenues avec les modèles 2D et  $2D_P^{1/2}$ , et donnent des résultats en bon accord avec les résultats du modèle 3D. Les erreurs relatives sur les positions des fronts ne dépassent pas 1.1% et cela pour les différents cas d'équilibre considérés. Bien que ces deux modèles  $2D_H^{1/2}$  donnent des résultats satisfaisants, c'est l'approche convecto-diffusive qui est la plus efficace. Les résultats obtenus avec cette dernière, sur les positions des fronts solide-liquide, sont quasi-identiques aux résultats 3D. Les erreurs relatives sur les positions des fronts ne sont, respectivement, que de 0.22% et 0.34% pour le premier et le second cas considérés.

Les modèles  $2D_H^{1/2}$ , grâce à la bonne estimation des effets dissipatifs induits par les parois latérales, s'avèrent très efficace pour l'étude des problèmes de convection naturelle et de changement de phase solide-liquide. Ils ont l'avantage de conserver une formulation 2D avec

des gains considérables sur les temps et/ou les moyens de calcul nécessaires à leur résolution par rapport aux temps/moyens exigés par les modèles 3D.

Un processus expérimental de solidification complète d'un lingot d'étain pur, réalisé au sein de la configuration 'Afrodite', et la simulation numérique de ce même processus, faite avec le modèle  $2D_H^{1/2}$ , ont été ensuite présentés. Un traitement approfondi des données expérimentales de température a été effectué afin de définir des conditions aux limites thermiques appropriées pour le modèle numérique. Ce traitement a aussi permis la déduction de la valeur optimale du paramètre  $\delta^*$  intervenant dans le modèle  $2D_H^{1/2}$ . La méthode utilisée pour le suivi du front solide-liquide dans le modèle numérique  $2D_H^{1/2}$  a aussi été adaptée pour ce processus. Un bon accord a été trouvé entre les résultats numériques et expérimentaux, à la fois pour l'évolution de la position et de la forme des fronts solide-liquide au cours du temps ainsi que pour la durée totale de la solidification.

Dans la suite de ce travail, nous essayons de traiter la ségrégation des éléments d'alliage apparaissant lors de la solidification des alliages binaires. Ces cas de solidification présentent des cinétiques différentes de celles des corps purs. De nouveaux modèles numériques seront alors présentés.





# Chapitre IV

## Simulation de la Solidification d'Alliages Binaires

### Sommaire

---

<b>IV.1 Modèle 1D diffusif avec ségrégation</b>	<b>88</b>
IV.1.1 Présentation de la problématique traitée et des résultats de référence	89
IV.1.1.1 Configuration géométrique	89
IV.1.1.2 Équations résolues	90
IV.1.1.3 Résultats de référence	92
IV.1.2 Modélisation du problème avec une approche enthalpique	92
IV.1.3 Résolution numérique du problème	94
IV.1.3.1 Premiers résultats	95
IV.1.3.2 Traitement apporté à la résolution	95
IV.1.4 Résultats, discussions	96
IV.1.4.1 Résultats de validation	97
IV.1.4.2 Approfondissement et discussion	99
IV.1.4.3 Influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase solide-liquide	101
<b>IV.2 Modèle 2D convectif de solidification avec ségrégation</b>	<b>106</b>
IV.2.1 Présentation de la problématique traitée	106
IV.2.2 Modèle de solidification avec macro-ségrégation	107
IV.2.2.1 Équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement	107
IV.2.2.2 Équation de conservation de l'énergie	108
IV.2.2.3 Équation de conservation des espèces	109
IV.2.3 Résolution numérique	110
IV.2.4 Résultats et discussion	111
<b>IV.3 Conclusion</b>	<b>119</b>

---

Dans ce chapitre nous traitons la ségrégation apparaissant lors de la solidification des alliages binaires. Un tel type d'étude, comme présenté au chapitre I dans l'état de l'art, nécessite des modèles numériques multi-physiques prenant en considération des phénomènes

fortement couplés. Les modèles numériques adéquats pour une telle étude doivent inclure tous les types de transfert et prendre en considération toutes les phénoménologies qui y sont attachées. Ce chapitre est divisé en deux parties. Dans la première, un cas de solidification uni-dimensionnel diffusif d'un alliage binaire est considéré et des résultats de référence sont utilisés pour valider les modifications apportées à la méthode numérique de résolution. Dans la seconde partie, un modèle complet de macro-ségrégation est présenté et utilisé pour simuler la ségrégation lors de la solidification d'un alliage étain-plomb au sein du dispositif 'Afrodite'. Les résultats numériques sont confrontés aux résultats expérimentaux et des discussions et des pistes d'amélioration sont proposées.

### IV.1 Modèle 1D diffusif d'un cas de solidification avec ségrégation

Cette première partie de ce chapitre, qui traite un cas particulièrement intéressant, représente une étape majeure dans cette étude. Après la présentation des différents modèles pour la solidification des métaux purs avec des méthodes multi-domaines dans le chapitre précédent, on s'intéresse maintenant à la solidification des alliages métalliques binaires. Pour cela des modèles de macro-ségrégation doivent être utilisés. Ces modèles utilisent l'approche enthalpique qui traite l'ensemble des trois zones (liquide, pâteuse et solide) considérées comme faisant partie du même et unique domaine de résolution. Comme présenté au premier chapitre consacré à l'état de l'art, lors de la solidification des alliages binaires, en plus des transferts de chaleur dus au dégagement de chaleur latente, des transferts de masse apparaissent aussi, en lien avec les phénomènes de ségrégation se produisant lors de la solidification. Comme tous les modèles numériques présentés dans ce travail ont été implémentés sous le logiciel *COM-SOL Multiphysics 5.2*, les différentes équations de conservation et les différents phénomènes physiques doivent être associés à des modules proposés appropriés. Or avec ce logiciel, il n'y a pas de modèle de ségrégation à proprement parler. Un module 'Transport d'espèce' est disponible, mais des modifications dans l'expression des différentes variables, ainsi que dans les formulations doivent y être ajoutées. Ceci est aussi valable pour la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase dans le module 'Transfert de chaleur'. Bien que celui-ci comporte des modèles avec changement de phase, une formulation spécifique est nécessaire pour traiter les cas désirés ici, et c'est dans cette perspective qu'un cas 1D diffusif est d'abord considéré. Ce cas a aussi l'avantage de traiter une phénoménologie intéressante qui apporte une réelle compréhension des différents mécanismes mis en jeu.

Dans cette partie, on s'intéresse plus précisément au cas de référence proposé par Gewecke *et. al* [110] et traitant l'évolution de la zone pâteuse se formant, puis disparaissant lors de la solidification d'un alliage binaire. Un alliage binaire est initialement à l'état liquide dans une cavité rectangulaire. La température  $T_0^*$  du bain liquide est supérieure à la température [Étude du changement de phase solide-liquide] du liquidus de l'alliage à la composition initiale homogène  $c_0^*$ . À l'instant  $t_0$ , une température froide  $T_b^*$ , plus basse que la température du solidus de l'alliage considéré, est imposée et maintenue le long de l'étude au niveau de la paroi du bas de la cavité. Une température chaude  $T_h^*$ , égale à la température  $T_0^*$ , est maintenue à la paroi du haut de la cavité (voir [figure IV.1](#)). Les deux parois verticales sont adiabatiques. Avec cette configuration là, à partir de l'instant  $t_0$ , une zone solide se forme au contact de

la paroi froide et croit vers le haut. La croissance de cette zone solide est précédée par celle d'une zone pâteuse qui, elle aussi, apparaît à partir de l'instant  $t_0$  et dont l'épaisseur augmente au fur et à mesure que le refroidissement se fait (voir [figure IV.1](#)). L'intérêt de ce cas est qu'il vise à montrer un comportement particulier, différent de celui observé par d'autres études traitant des cas similaires, mais utilisant certaines hypothèses. Dans une première approche, le domaine contenant l'alliage est considéré semi-infini. Ce cas est traité par Worster [111] et la solution analytique montre que la position de l'interface liquide-zone pâteuse progresse de façon continue vers le haut proportionnellement à  $t^{1/2}$ . Or dans le cas d'une cavité de hauteur finie, comme celle considérée ici et où les températures du haut et du bas sont choisies de manière particulière, la position de cette interface va tendre vers une limite car, en régime permanent, le profil de température devient linéaire. Dans une seconde approche, la cavité est considérée finie (en hauteur), mais la diffusivité du soluté au sein des deux phases est supposée être nulle [112]. Avec cette hypothèse, l'avancée de la zone pâteuse est limitée, mais, dans la solution en régime permanent, cette zone pâteuse est toujours présente avec la zone liquide. Or, comme on va le voir dans la suite de ce travail, pour le cas qu'on présente ici et où la diffusivité du soluté dans la phase liquide est considérée non nulle, la solution en régime permanent montre la disparition totale de la zone pâteuse, ne laissant qu'une zone solide et une zone liquide.

### IV.1.1 Présentation de la problématique traitée et des résultats de référence

Dans cette partie, l'apparition, l'évolution et la disparition de la zone pâteuse se formant lors de la solidification d'un alliage binaire refroidi par le bas dans une cavité rectangulaire différentiellement chauffée, sont étudiés. Des résultats de référence sont d'abord présentés, car ils serviront de validation à notre modèle numérique. L'effet de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase solide-liquide est ensuite discuté.

#### IV.1.1.1 Configuration géométrique

Considérons une cavité rectangulaire de hauteur  $H$  finie et égale à 15 cm et contenant un alliage binaire (assimilable à une solution de nitrate de sodium à 14 wt% [110] et dont les propriétés physiques sont données dans le [tableau IV.1](#) [111]) qui se trouve initialement à l'état liquide et à la température  $T_0^* = 15 + 273.15$  K (voir [figure IV.1](#)). La température de la paroi supérieure est gardée constante et égale à  $T_h^* = 15 + 273.15$  K.

À  $t = 0$ , une température  $T_b^* = -15.6 + 273.15$  K est imposée à la paroi inférieure. Cela conduit à l'apparition d'une zone pâteuse suivie par une zone solide à partir de la paroi refroidie. La [figure IV.1\(a\)](#) montre la configuration étudiée à un instant  $t > t_0$  où les trois zones liquide, pâteuse et solide sont présentes et où le régime établi n'est pas encore atteint. Sur la [figure IV.1\(b\)](#), les profils de température et de concentration le long de la hauteur de la cavité,  $x$ , sont donnés. Le profil de température n'est pas encore linéaire (régime non établi). Pour cet alliage là, il n'y a pas de solubilité du soluté dans la phase solide. La concentration  $c = c_s$  dans la zone solide est donc égale à zéro. La position de l'interface liquide-zone pâteuse (où la fraction liquide,  $g_l$  vaut 1) est notée  $b(t)$  et celle de l'interface zone pâteuse-solide (où la fraction liquide  $g_l$  vaut 0) est notée  $a(t)$ .

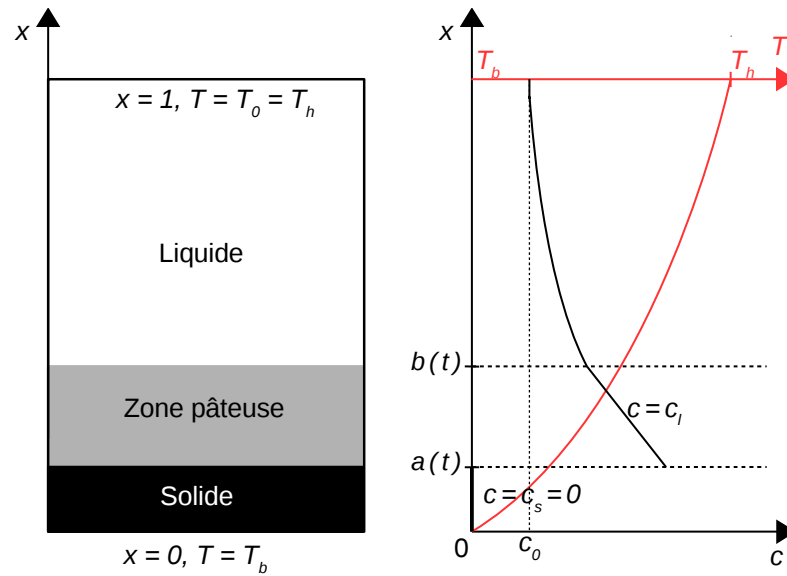


FIGURE IV.1 : (a) : La configuration géométrique, de hauteur finie, étudiée. Á un instant  $t$  donné, avant le régime permanent, les trois zones solide (en noir), pâteuse (en gris) et liquide (en blanc) sont présentes. Deux interfaces  $a(t)$  et  $b(t)$  (représentées en pointillés sur les profils) dépendantes du temps se forment.  $a(t)$  sépare les zones solide et pâteuse et  $b(t)$  sépare les zone pâteuse et liquide. (b) : Les profils de température (en rouge) et de concentration (en noir) sont donnés en fonction de la hauteur  $x$ . La solubilité des impuretés dans le solide étant nulle, la concentration solide  $c_s = 0$ .

#### IV.1.1.2 Équations résolues

La modélisation proposée par Gewecke *et al.* [110] pour étudier ce cas de solidification implique la résolution des équations de conservation de la chaleur et des espèces dans chacune des trois zones présentes. Les propriétés physiques (la densité  $\rho$ , la diffusivité thermique  $\alpha$  et la capacité calorifique à pression constante  $c_p$ ) du matériau étudié sont supposées étre constantes entre les différents états de la matière. Les variables physiques sont adimensionnées comme suit :

$$T = \frac{T^* - T_b^*}{T_h^* - T_b^*}, \quad t = \frac{\alpha}{H^2} t^*, \quad x = \frac{x^*}{H}$$

Avec cet adimensionnement, la température chaude imposée en  $x = 1$  vaut  $T_h = 1$ , et la température froide imposée en bas de la cavité en  $x = 0$  vaut  $T_b = 0$ . La température de fusion du matériau pur est  $T_f = 0.51$ . Les transferts de chaleur et de masse sont supposés se faire par diffusion seulement. La chaleur latente de changement de phase n'est pas prise en considération. Le soluté est entièrement rejeté lors du changement de phase liquide-solide. La température eutectique, pour laquelle les deux composants se solidifient, est supposée étre plus basse que la température froide,  $T_b$ , imposée à la paroi du bas. Le diagramme de phase linéarisé est exprimé comme suit :

$$T_l(c) = T_f - m_l c.$$

Les flux de matière à travers les deux parois où les températures sont imposées, sont nuls :

$$\frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0.$$

Dans la partie liquide, *i.e.*  $b(t) < x < 1$ , les équations à résoudre sont :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (\text{IV.1})$$

et

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{Le} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (\text{IV.2})$$

où  $Le = \alpha/D$  est le nombre de Lewis.

Dans la zone pâteuse, *i.e.*  $a(t) < x < b(t)$ , deux équations de conservation sont aussi résolues :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - Ste \frac{\partial g_l}{\partial t}, \quad (\text{IV.3})$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{Le} \frac{\partial}{\partial x} \left( g_l \frac{\partial c}{\partial x} \right), \quad (\text{IV.4})$$

et

$$T = -m_{l_0}(c - c_b) \quad (\text{IV.5})$$

où  $g_l$  et  $Ste = \Delta H_f / c_p (T_h^* - T_b^*)$  sont, respectivement, la fraction liquide et le nombre de Stefan.  $m_{l_0} = m_l / (T_h - T_b)$  et  $c_b = (T_f - T_b) / m_l$  est la concentration du liquide à la température  $T_b$ . C'est le résultat de l'application de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local au sein de la zone pâteuse.

Dans la partie pleinement solide, *i.e.*  $0 < x < a(t)$ , seule l'équation de la conduction thermique est résolue :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{IV.6})$$

À chacun de ces systèmes d'équations sont associées plusieurs conditions aux limites aux différentes interfaces (solide-zone pâteuse et zone pâteuse-liquide). Ces conditions sont entre autres la condition de Stefan pour les vitesses de déplacement des interfaces, des conditions de continuité de la concentration, de la température, de la fraction liquide ainsi que celle des flux de masse. Afin de découpler la température des autres grandeurs et de pouvoir appliquer une méthode des caractéristiques, les auteurs négligent la chaleur latente de changement de phase. Le résultat est aussi que le champ de température ne dépend plus des positions des différentes interfaces, ni des autres grandeurs dans la zone pâteuse. Il ne reste plus que de la conduction thermique sur tout le domaine. Les détails de la résolution de ces équations ainsi que l'application de la méthode des caractéristiques dans la zone pâteuse sont donnés en annexe de leur article [110].

## IV.1.1.3 Résultats de référence

Avec les hypothèses faites et la méthode de résolution utilisée, les auteurs [110] montrent que la solution finale à l'état stationnaire n'inclut que deux zones distinctes, une zone solide et une zone liquide. La zone pâteuse apparaissant en début de solidification disparaît au delà d'un certain temps. Cela vient s'opposer au cas (toujours dans un domaine fini) où la diffusion du soluté est considérée nulle dans les deux phases et pour lequel la solution finale ne présente pas de zone solide (seulement deux zones : liquide et pâteuse).

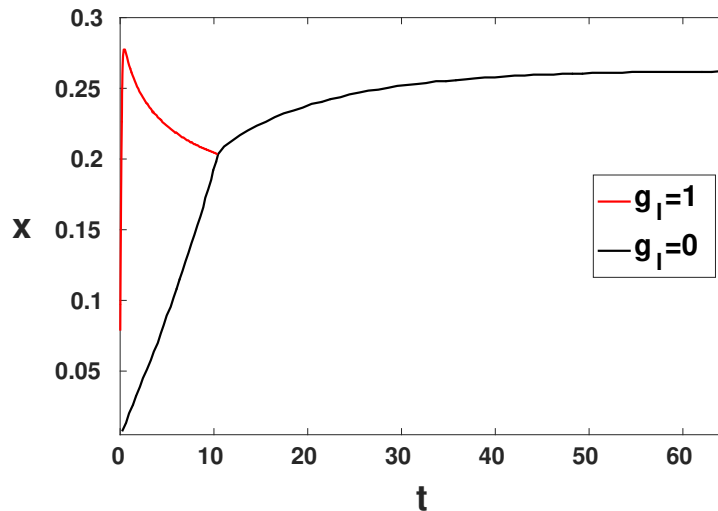


FIGURE IV.2 : Évolution des positions des interfaces solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$  en noir) et zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$  en rouge). Les deux interfaces démarrent de zéro en avançant avec des vitesses différentes vers le haut de la cavité. L'interface zone pâteuse-liquide atteint une hauteur maximale, puis revient en arrière jusqu'à rencontrer l'interface solide-zone pâteuse. La zone pâteuse disparaît alors et il ne reste plus que deux zones : solide et liquide. Au delà du point de rencontre des deux interface, la ligne noire donne la position de l'interface solide-liquide. Résultats obtenus par Gewecke *et al.* [110].

La figure IV.2 montre l'évolution tirée de [110] des interfaces solide-zone pâteuse ( $a(t)$  *i.e.* la limite où  $g_l = 0$ ) et zone pâteuse-liquide ( $b(t)$  *i.e.* la limite où  $g_l = 1$ ). L'interface zone pâteuse-liquide atteint très rapidement une hauteur maximale, puis revient en arrière. Durant ce temps la zone solide ne fait que croître, mais plus lentement. Au bout d'un certain temps, les deux interfaces se rejoignent pour ne laisser dans le domaine que deux zones solide et liquide. Cette nouvelle interface solide-liquide croît alors progressivement vers le haut jusqu'à atteindre un régime permanent final.

Les résultats de l'évolution de la concentration au sein du domaine liquide obtenus par ces mêmes auteurs sont présentés sur la figure IV.7.

## IV.1.2 Modélisation du problème avec une approche enthalpique

Comme présenté précédemment, les auteurs [110] ont séparé les trois zones du matériau lors de la résolution et appliqué des méthodes de résolution particulières. L'approche de

résolution est bien détaillée dans [110] mais des discussions et des commentaires sur la succession des différents phénomènes engendrant une telle évolution des interfaces n'y sont pas donnés. Les résultats rapportés correspondent à un cas bien documenté où toutes les valeurs des grandeurs physiques sont disponibles. Nous proposons ici de modéliser la problématique traitée avec une approche enthalpique, regroupant les équations de conservation de l'énergie et des espèces, formulées pour le mélange et valables partout dans le domaine étudié.

En réalité, au départ, à cause de la complexité de la modélisation et des forts couplages entre les différents phénomènes se produisant lors de la solidification avec chaleur latente et effet convectif, l'idée était de se ramener à un cas suffisamment simple pour juger de la qualité de notre modélisation. Cette première modélisation nous montrera bien les attentions qui doivent être apportées pour assurer des résultats cohérents.

Nous considérons l'équivalent dimensionnel du cas présenté précédemment. Avec l'approche enthalpique et un modèle de ségrégation basé sur la formulation moyennée de la théorie des mélanges [5], les équations de conservation résolues sur l'ensemble du domaine sont :

— L'équation de conservation de l'énergie :

$$\rho c_p \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \cdot \left( k \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) - \rho \Delta H_f \frac{\partial g_l}{\partial t^*}. \quad (\text{IV.7})$$

Elle se résume, en négligeant la chaleur latente de changement de phase  $\Delta H_f$ , à l'équation de conduction. Ce second terme à droite de l'équation sera considéré dans un second temps pour voir son influence sur l'évolution des différentes zones.

— L'équation de conservation des espèces :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left( D_l g_l \frac{\partial c_l}{\partial x^*} \right), \quad (\text{IV.8})$$

où  $\langle c \rangle$  est la concentration moyenne.  $c_l$  et  $g_l$  sont respectivement la concentration de la phase liquide et la fraction liquide. Ces grandeurs sont liées dans la zone pâteuse grâce au diagramme de phase. En considérant que le coefficient de partage  $k_p$  vaut 0 (*i.e.* rejet total du soluté vers le liquide) et en supposant que la zone pâteuse est toujours en équilibre local, la relation les liant s'exprime comme suit :

$$\langle c \rangle = g_l c_l + g_s c_s = g_l c_l.$$

Le terme de droite de l'équation IV.8 fait intervenir le flux diffusif de soluté de la phase liquide. Le gradient moteur de ce flux est le gradient de soluté dans la phase liquide uniquement. Le flux diffusif est alors égal au produit de ce gradient par le coefficient de diffusion en phase liquide  $D_l$  pondéré par la fraction volumique de la phase liquide  $g_l$ . En effet, si on se place au sein de la zone pâteuse, là où la fraction volumique de la phase liquide vaut  $g_l$ , comme la diffusion du soluté dans le solide est très faible (considérée comme nulle), la diffusion de masse ne se fait que dans les parties volumiques occupées par le liquide.

Contrairement à la résolution précédente où différentes conditions de continuité et aux limites doivent être appliquées au niveau des différentes interfaces, avec cette approche, seules les conditions aux limites du domaine global incluant les 3 zones solide, liquide et pâteuse doivent être définies. Elles se résument ainsi :

- en  $x^* = 0$  :  $T_b^* = -15.6 + 273.15 \text{ K}$ ,

## IV.1. MODÈLE 1D DIFFUSIF AVEC SÉGRÉGATION

- en  $x^* = 15$  cm :  $T_h^* = 15 + 273.15$  K,

- en  $x^* = 0$  et  $x^* = 15$  cm :  $\partial\langle c^* \rangle / \partial x = 0$ .

À l'instant  $t^* = 0$ ,  $\langle c \rangle = 14$  wt% et  $T^* = T_h^*$  sont, respectivement, la concentration moyenne initiale homogène sur tout le domaine et la température initiale.

Le diagramme de phase considéré est représenté sur la [figure IV.3](#). La température de fusion du corps pur est égale à  $0 + 273.15$  K. La ligne du liquidus est linéarisée.

Les propriétés thermo-physiques modélisant l'alliage considéré sont résumées dans le [tableau IV.1](#).

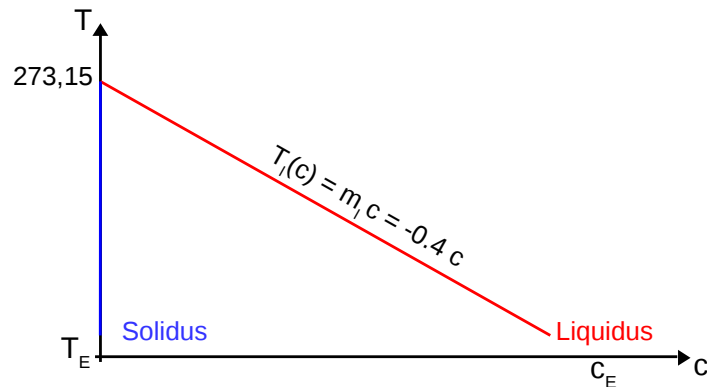


FIGURE IV.3 : Diagramme de phase de l'alliage binaire étudié, simplifié dans l'hypothèse des faibles concentrations inférieures à la concentration eutectique ( $c_0 < c_E$ ). La température de fusion du matériau pur vaut 273.15 K, la pente du liquidus  $m_l = -0.4$  K/wt% et le coefficient de partage  $k_p$  est nul.

Symboles	Valeurs	Description
$\rho_s = \rho_l$	1000 kg/m <sup>3</sup>	densité
$k_s = k_l$	0.54 W/(m×K)	conductivité thermique
$Cp_s = Cp_l$	4.186 kJ/(kg×K)	capacité thermique à pression constante
$T_f^*$	273.15 K	température de fusion du solvant pur
$D_l$	$10^{-9}$ m <sup>2</sup> /s	coefficient de diffusion du soluté dans le liquide
$\Delta H_f$	334 kJ/kg	chaleur latente de fusion

Tableau IV.1 : Propriétés physiques caractéristiques du cas étudié [111]

### IV.1.3 Résolution numérique du problème

La configuration géométrique présentée ainsi que les équations du modèle numérique sont implémentées sur le logiciel *COMSOL Multiphysics 5.2*. Le module 'Heat transfer' est utilisé pour l'équation de la chaleur avec les conditions aux limites thermiques correspondantes. Le module 'Transport of Diluted Species' est utilisé pour l'équation de conservation du soluté.  $g_l$  est exprimée comme une fonction de  $\langle c \rangle$  et de  $T^*$ . Avec le diagramme des phases et la règle des leviers, elle s'écrit :  $g_l = m_l \langle c \rangle / (T^* - T_f^*)$ . Elle est exprimée de manière implicite.



### IV.1.3.1 Premiers résultats

Les premiers résultats obtenus sont présentés sur la [figure IV.4](#). La zone pâteuse ( $g_l = 1$ ) avance bien au début de la solidification jusqu'à atteindre une hauteur maximale, mais celle-ci est nettement supérieure au maximum donné par les résultats de référence [110]. La zone solide ne croît pas. La concentration le long de la hauteur de la cavité reste tout le temps inchangée et égale à  $c_0$ . Elle n'est pas représentée ici pour ces premiers résultats mais son évolution réelle (obtenue par la référence [110]) au cours de la solidification est représentée sur la [figure IV.7](#).

La position de la limite zone pâteuse-liquide obtenue en régime établi correspond à la position de l'isotherme  $T = T_l$ , où  $T_l$  est la température du liquidus à la composition nominale de l'alliage. Ces premiers résultats sont clairement incohérents avec le cas traité.

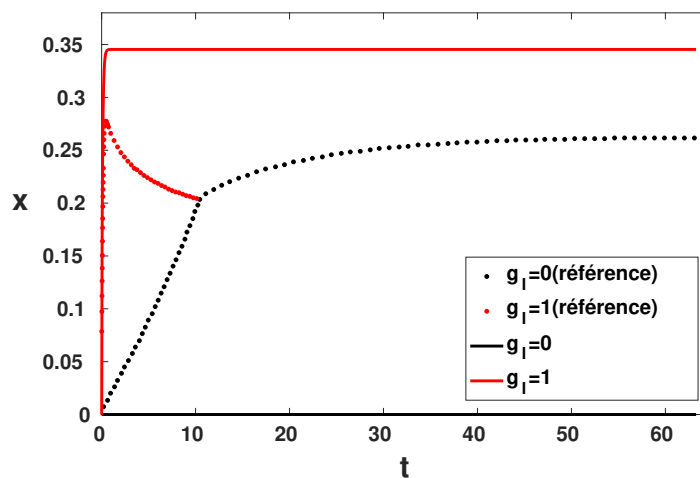


FIGURE IV.4 : Évolution des positions des limites solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$  en noir) et zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$  en rouge). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que les premiers résultats de nos calculs sont représentés en lignes continues. Les résultats obtenus avec cette première modélisation ne sont pas cohérents avec les résultats attendus et ceux de référence.

### IV.1.3.2 Traitement apporté à la résolution

Après cette première modélisation montrant clairement une anomalie dans la résolution, plusieurs essais et modifications ont été menés afin de s'assurer de la prise en compte de tous les termes modélisés. Le champ de température obtenu dans les premiers résultats est bien correct. En fait aucune modification de l'équation de conservation de l'énergie n'a été faite, car cette équation correspond à celle proposée par défaut dans le module du logiciel. Par contre la formulation de la conservation des espèces est différente de celle proposée par défaut dans le logiciel et la façon dont elle a été implémentée doit être corrigée.

Dans toutes les parties précédentes de ce travail, à chaque fois que des termes supplémentaires ou des modifications étaient apportés aux équations proposées par défaut dans le logiciel *COMSOL Multiphysics 5.2*, cela se faisait via des termes de forces volumiques ou des termes sources qui sont implémentés par défaut dans la discrétisation et la résolution des

équations de conservation. La prise en compte de l'équation de conservation des espèces nécessite des modifications plus complexes qui avaient été réalisées dans un premier temps dans l'expression de l'équation du problème, dite équation des résidus. Néanmoins, avec le logiciel *COMSOL Multiphysics 5.2*, d'autres expressions existent au niveau du tableau des variables. Ces expressions concernent différentes variables intermédiaires utiles à la résolution d'un système d'équation donné. Mais ce tableau est par défaut caché à l'utilisateur et sa modification est déconseillée dans le guide utilisateur.

Pour ce cas bien précis, la première rectification fut l'identification et la modification des termes de flux dans le tableau des variables. En effet, comme présenté précédemment, avec la formulation en concentration moyenne, le flux diffusif est proportionnel au gradient de la concentration liquide  $c_l$  et est pondéré par la fraction liquide  $g_l$  qui est fonction à la fois de la concentration et de la température. Cette pondération n'apparaissait pas initialement dans l'expression des flux dans le tableau des variables. Cette première modification a permis d'améliorer les résultats, mais des problèmes de convergence sont alors apparus. En effet, lors de la résolution, ces termes de flux sont exprimés implicitement et la variable  $\langle c \rangle$  pour laquelle se fait la résolution  $y$  apparaît (à travers  $c_l$  et  $g_l$ ) et est incluse dans la matrice jacobienne, compliquant encore plus la résolution. Une seconde modification apportée à la résolution est la prise en compte de  $g_l$  et  $c_l$  de manière explicite lors de la résolution. Cela est rendu possible grâce au stockage en mémoire des champs de température et de concentration à chaque itération  $n$  du solveur temporel. La fraction liquide  $g_l$  et la concentration liquide  $c_l$  sont alors explicitement évaluées pour l'itération  $n + 1$  avec la concentration moyenne  $\langle c \rangle$  et la température  $T^*$  de l'instant  $n$  précédent. Le stockage de ces champs à l'itération  $n$  est réalisé grâce à la création de deux nouvelles variables, ce qui nécessite l'ajout d'un module 'Domain ODEs and DAEs' (Domain Ordinary Differential Equation and Differential Algebraic Equations). Ce module permet juste d'écrire l'équation avec laquelle on assignera la valeur à stocker à la variable de stockage. Pour stocker  $\langle c \rangle$  à l'aide d'une nouvelle variable  $d^*$  d'un module 'Domain ODEs and DAEs' ajouté, on écrit :

$$d^* - nojac(\langle c \rangle) = 0.$$

L'opérateur *nojac* est utilisé pour éviter que cette équation ne contribue à la matrice jacobienne. Une fois cette assignation définie, on doit spécifier à quel instant elle doit être évaluée. Pour cela on configure le solveur temporel en utilisant l'option 'Previous solution' pour que l'évaluation se fasse au pas de temps précédent.

Cette expression en partie explicite des termes de flux diffusif de masse exige de limiter les pas de temps pris par le solveur temporel à des valeurs suffisamment petites pour assurer des écarts minimes entre le flux évalué à l'instant  $t^n$  et le flux présumé à l'instant  $t^{n+1}$ .

### IV.1.4 Résultats, discussions

Nous présentons, dans cette partie, les résultats obtenus après les modifications apportées à la résolution numérique. Une discussion est ensuite menée pour mettre en avant les différents mécanismes conduisant à un tel comportement de la zone pâteuse.

#### IV.1.4.1 Résultats de validation

La figure IV.5 présente la comparaison entre les résultats de la nouvelle modélisation (mis sous forme adimensionnée) et ceux donnés par la référence [110] sur l'évolution de la zone pâteuse et des autres zones. L'allure générale de l'évolution de ces limites est reproduite de manière satisfaisante. La limite liquide-zone pâteuse est retrouvée. Dans nos résultats, la position de la limite solide-zone pâteuse est plus délicate à situer. En effet la fraction liquide  $g_l$  ne descend pas directement à zéro mais garde des valeurs résiduelles  $< 10^{-10}$ . L'isovaleur  $g_l = 0.01$  est donc considérée comme représentative de cette interface là.

Pour des ordres de grandeur dimensionnels, nous pouvons noter que la hauteur maximale de l'interface zone pâteuse-liquide est atteinte au bout de 20h de solidification et que les deux interfaces se rejoignent au bout d'un peu plus de 22 jours de solidification.

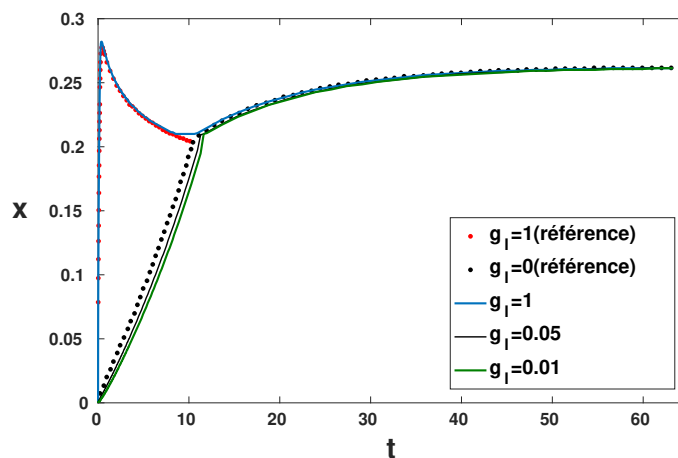


FIGURE IV.5 : Évolution des positions des limites zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ ) et solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ ). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que les résultats des calculs améliorés sont représentés en lignes continues. Dans nos calculs, il est plus délicat de cerner l'iso-valeur  $g_l = 0$  car des valeurs positives résiduelles subsistent encore de l'ordre de  $10^{-10}$ . Pour cela l'iso-valeur  $g_l = 10^{-2}$  est considérée comme représentative de la limite solide-zone pâteuse.

La figure IV.6 présente l'évolution des profils de concentration dans la zone liquide au cours de la solidification jusqu'à ce que les deux interfaces se rejoignent. Le sens de l'évolution temporelle est donné par le sens de l'évolution de l'interface zone pâteuse-liquide représentée en ligne rouge avec des flèches.

Là encore, un bon accord est trouvé entre les résultats de référence et ceux obtenus avec le modèle approfondi. On remarque aussi que la concentration, jusqu'à la disparition de la zone pâteuse, ne fait qu'augmenter au voisinage de l'interface zone pâteuse-liquide.

Pour vérifier la bonne conservation totale du soluté au sein du domaine étudié, et montrer aussi que la formulation adoptée pour l'expression des flux diffusifs n'apporte, ni ne fait perdre, du soluté durant la résolution, l'évolution de la concentration moyennée sur l'ensemble du domaine,  $c_{mD}$ , en fonction du temps est représentée sur la figure IV.7. La déviation maximale obtenue en tout début du processus est inférieure à 0.006 wt%, donnant une différence relative avec la composition nominale de l'ordre de  $4 \cdot 10^{-4}$ . Différents pas de temps

#### IV.1. MODÈLE 1D DIFFUSIF AVEC SÉGRÉGATION

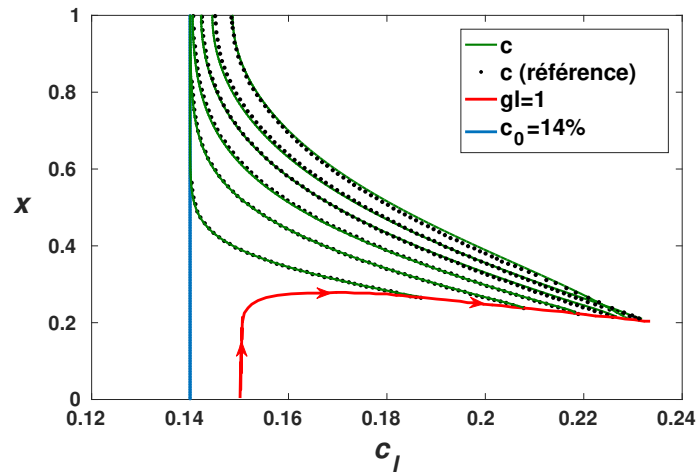


FIGURE IV.6 : Comparaison entre les concentrations liquides calculées à différents instants au cours de la solidification (lignes vertes) et celles données par la référence [110] (lignes noires pointillées). La concentration initiale  $c_0$  vaut 14 wt% (ligne bleue). L'évolution de la position de l'interface liquide-zone pâteuse, *i.e.*  $g_l = 1$ , au cours du temps est donnée par la ligne rouge.

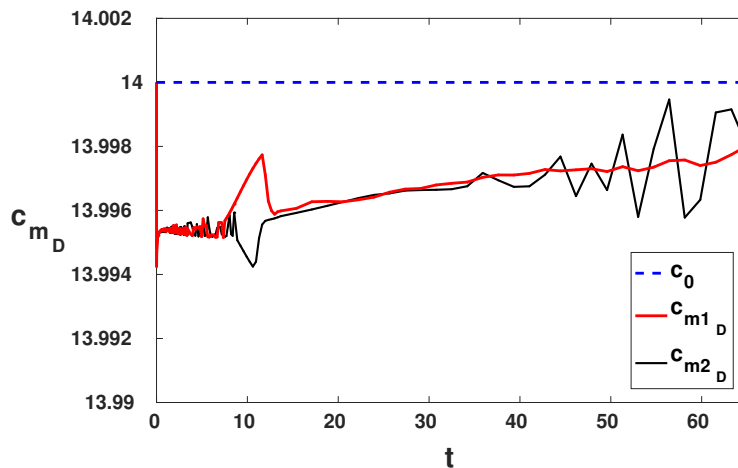


FIGURE IV.7 : Évolution de la concentration moyennée sur l'ensemble du domaine  $c_{m_D}$  au cours de la solidification. Le pas de temps maximal autorisé au solveur vaut  $\Delta t^* = 40$  min (ce qui correspond à un pas de temps adimensionnel  $\Delta t = 0.0137$ ) pour le cas  $c_{m1_D}$  et  $\Delta t^* = 5$  min ( $\Delta t = 0.0017$ ) pour le cas  $c_{m2_D}$ . La déviation maximale par rapport à la concentration nominale  $c_0$  est obtenue en tout début du processus et est inférieure à 0.006 wt%, donnant alors une erreur relative maximale par rapport à  $c_0$  ne dépassant pas  $4 \cdot 10^{-4}$ .

sont utilisés dans les deux cas représentés par  $c_{m1_D}$  et  $c_{m2_D}$ . Dans le premier cas, le pas de temps maximal autorisé pour le solveur (qui cherche toujours à maximiser ses pas de temps) est  $\Delta t^* = 40$  min (ce qui correspond à un pas de temps adimensionnel  $\Delta t = 0.0137$ ) et dans le second, il est  $\Delta t^* = 5$  min ( $\Delta t = 0.0017$ ).

#### IV.1.4.2 Approfondissement et discussion

Afin de mieux comprendre la succession des phénomènes et des transferts de chaleur et de masse induisant un tel comportement de la zone pâteuse, les profils des différentes variables et grandeurs ( $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$ ,  $c_l$ ) en fonction de la hauteur de la cavité sont étudiés de plus près. La [figure IV.8](#) montre l'évolution de ces profils en fonction du temps  $t$ . Les résultats ont été adimensionnés pour une meilleure lecture, avec une normalisation des axes. La hauteur adimensionnelle  $x$  de la cavité varie de 0 à 1 et est sur l'axe des ordonnées. Le refroidissement s'effectue en  $x = 0$ . Les sous-figures comportent toutes deux axes des abscisses. Le premier axe, celui du bas, est réservé à la concentration moyenne  $\langle c \rangle$ , tracée en lignes rouges et à la concentration liquide  $c_l$  qui est représentée en pointillés bleus. On note que la valeur de  $c_l$  en  $x = 0$  reste constante, c'est la valeur de la concentration du liquidus donnée par le diagramme des phases à la température  $T_b$ . Elle est égale à  $(T_f - T_b)/m_l = 39 \text{ wt}\%$ . Notons aussi que la première zone pâteuse qui se forme à partir de la concentration initiale  $c_0$  aura donc une fraction liquide  $g_l = 14/39 = 0.359$ . Le second axe des abscisses, celui du haut, est réservé à la température adimensionnée  $T$  et à la fraction liquide  $g_l$ , toutes deux variant de 0 à 1. Quand  $g_l$  vaut 1,  $\langle c \rangle = c_l$  et les deux courbes (bleue et rouge) sont superposées.

À l'instant initial  $t = 0$  (en haut à gauche de la [figure IV.8](#)), tout le domaine est liquide ( $\langle c \rangle = c_l$ ),  $g_l = 1$  et le liquide se trouve à la température  $T_h = 1$  (le profil de  $T$  est superposé à celui de  $g_l$ ). À partir de cet instant là, on peut distinguer 3 étapes successives.

La première étape ( $0 < t < 0.3 \sim 0.4$ ) : elle correspond à l'avancée rapide de la zone pâteuse à partir de la paroi refroidie jusqu'à sa hauteur maximale (voir [figure IV.8](#) pour  $t = 0.02$ ,  $t = 0.2$  et  $t = 0.4$ ). Cette avancée correspond et est due à l'établissement du profil de température. En effet, dès l'application du refroidissement, toutes les isothermes comprises entre  $T_b$  et  $T_h$  apparaissent sous la forme d'une couche limite thermique au voisinage de la paroi froide. Ces isothermes se déplacent alors vers le haut de la cavité jusqu'à atteindre leurs positions en régime établi de température, (régime diffusif correspondant à un profil linéaire). Cet établissement du profil de température est bien visible sur les quatre premières figures où on passe de l'état initial à un profil de température linéaire. Les régions dont la température  $T$  baisse en dessous de la température du liquidus  $T_{l0}$  correspondant à la composition nominale  $c_0$  forment un peu de solide et entrent dans la zone pâteuse. Cette vision est un peu simplificatrice car, du fait du rejet du soluté qui commence, un petit pic est observé sur la concentration  $\langle c \rangle$  au niveau de cette interface zone pâteuse-liquide, et la température en dessous de laquelle se formera un peu de solide sera donc légèrement inférieure à  $T_{l0}$ . Cela explique que la hauteur maximale atteinte par l'interface zone pâteuse-liquide est plus faible que dans le cas où la concentration restait partout égale à  $c_0$  (cas de la [figure IV.4](#), correspondant aussi à un cas sans ségrégation du soluté).

Parallèlement à cette avancée rapide de l'interface zone pâteuse-liquide, au contact de la paroi refroidie,  $\langle c \rangle$  diminue par diffusion de  $c_l$  dans la zone pâteuse et une zone entièrement solide va commencer à se former, tout en restant peu épaisse. À la fin de cette étape, le profil de température est établi, la zone pâteuse occupe la quasi-totalité de l'espace compris entre cette hauteur maximale et la paroi refroidie et un gradient important de la concentration liquide  $c_l$  y apparaît.

La deuxième étape ( $0.3 \sim 0.4 < t < 10$ ) : elle correspond au retrait de la zone pâteuse jusqu'à sa disparition et est visible sur la [figure IV.8](#) ( $t = 0.4$ ,  $t = 5$  et  $t = 10$ ). Dès le début

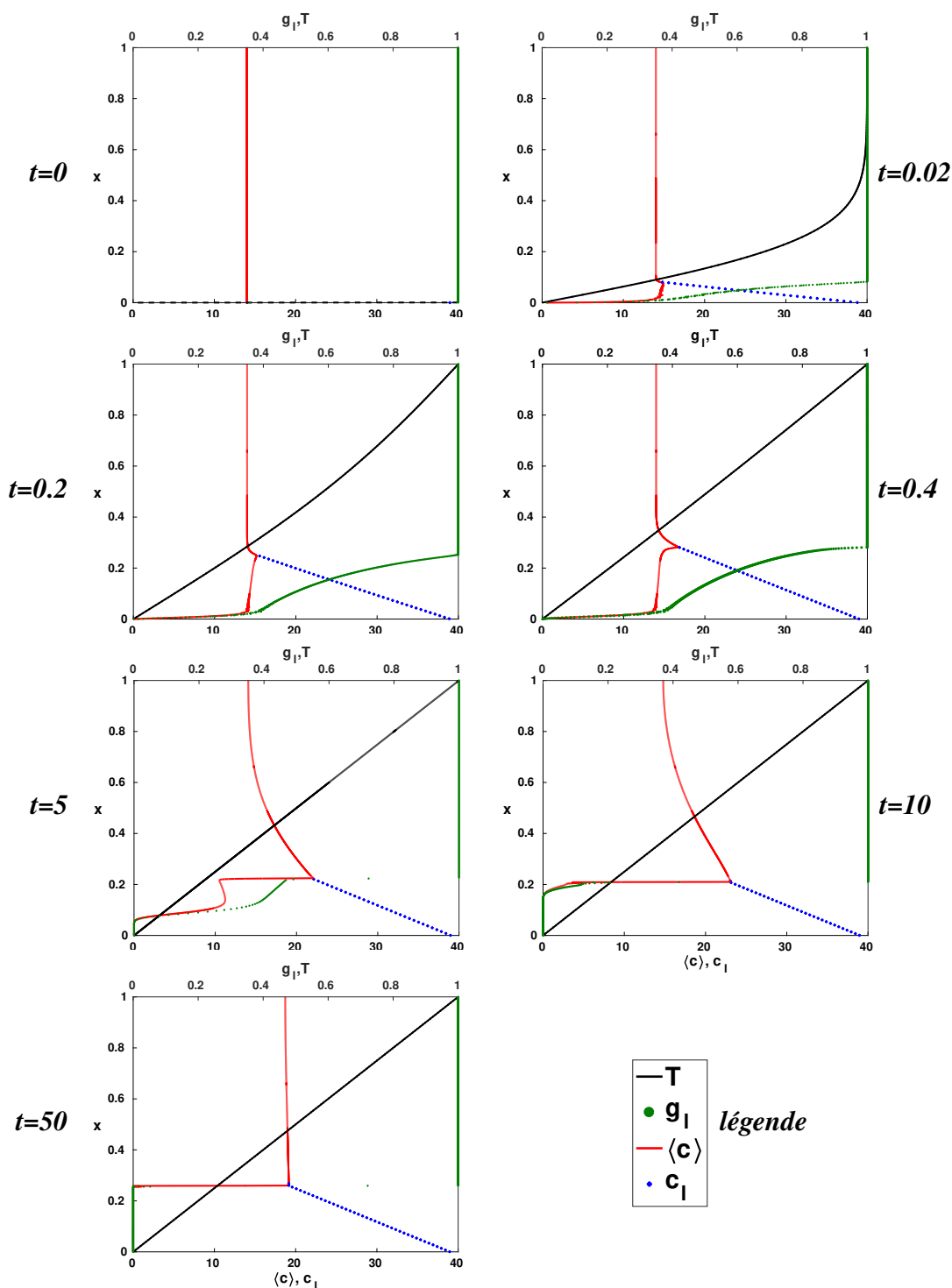


FIGURE IV.8 : Profils des variables  $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$  et  $c_l$  le long de la hauteur de la cavité à des instants successifs au cours de la solidification. Les courbes noires continues et vertes en pointillés représentant, respectivement,  $T$  et  $g_l$  sont rattachées au premier axe des abscisses (celui du haut variant de 0 à 1). Les lignes rouges continues et bleues en pointillés correspondent, respectivement, aux profils de  $\langle c \rangle$  et  $c_l$ , et sont rattachées au deuxième axe des abscisses (celui du bas variant de 0 à 40 wt%). À l'instant initial  $t = 0$ ,  $T = 1$  et  $g_l = 1$  le long de la hauteur, les lignes vertes et noires sont superposées. C'est le cas aussi des lignes rouges et bleues qui se superposent dans la zone liquide (là où  $g_l = 1$ ) car  $\langle c \rangle = c_l$ .

de cette étape, un peu avant  $t = 0.4$  (*i.e.* entre  $t = 0.2$  et  $t = 0.4$ ), le gradient de concentration liquide  $c_l$  dans la zone pâteuse est supérieur au gradient de concentration dans le liquide (il faut noter que le flux diffusif dans la zone pâteuse est pondéré par la fraction liquide  $g_l$ , mais la valeur de  $g_l$  est proche de 1 à la limite zone pâteuse-liquide). Le flux de soluté qui se diffuse de la zone pâteuse est donc supérieur au flux de soluté qui se diffuse dans le liquide à partir de la limite zone pâteuse-liquide. Le soluté s'accumule donc au voisinage de cette limite dans le liquide. Cela est visible sur les trois figures à  $t = 0.4$ ,  $t = 5$  et  $t = 10$ , mais aussi sur la [figure IV.7](#). La limite zone pâteuse-liquide revient donc en arrière vers le bas, là où les plus basses températures de liquidus  $T_l$  vont correspondre aux plus grandes valeurs de  $\langle c \rangle$  obtenues. Parallèlement à cela, en bas de la zone pâteuse, la limite solide-zone pâteuse progresse vers le haut. Du fait du rejet du soluté, de sa diffusion au sein de la zone pâteuse qui influence la fraction liquide de cette zone et de son évacuation dans le liquide, la concentration moyenne  $\langle c \rangle$  dans cette zone pâteuse diminue. La fraction solide augmente, entraînant à terme la montée de l'interface solide-zone pâteuse.

Vers la fin de cette période (entre  $t = 5$  et  $t = 10$ , mais plutôt vers  $t \simeq 10$ ), la fraction liquide  $g_l$  devient de plus en plus homogène dans la zone pâteuse (en tendant vers 0) et ceci est accompagné de la réduction de l'épaisseur de cette zone. Le flux diffusif de soluté évacué au sein de la zone pâteuse diminue (il est proportionnel au gradient de  $c_l$  qui est constant, mais pondéré par  $g_l$  qui tend vers zéro). En même temps, la vitesse de retrait de la zone pâteuse (interface zone pâteuse-liquide) diminue et même s'arrête dans notre calcul. Cet arrêt est visible sur la [figure IV.5](#) à  $t = 10$ , où la hauteur de la limite zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$  en bleu) reste constante sur un petit intervalle de temps. Ce comportement est aussi observé dans [113].

Cette deuxième étape s'arrête à  $t > \sim 10$  quand la fraction liquide  $g_l$  s'est entièrement homogénéisée à la valeur 0 en dessous de la limite zone pâteuse-liquide, ce qui signifie que la zone pâteuse a alors complètement disparu.

La troisième et dernière étape ( $10 < t$ ) : dans cette étape (visible sur la [figure IV.8](#) pour  $t = 10$  et  $t = 50$ ), il n'y a plus de flux de soluté provenant de la zone pâteuse (qui a disparu) et enrichissant le liquide au voisinage de l'interface. Le pic de concentration qui s'est accumulé à la limite de cette interface est alors évacué par diffusion dans le liquide. Ce dernier s'homogénéise à une concentration  $\langle c \rangle$  constante.  $\langle c \rangle$  diminue donc à l'interface solide-liquide qui va remonter alors progressivement en hauteur jusqu'à sa position finale quand  $\langle c \rangle$  est entièrement homogène dans le liquide. Les caractéristiques de cet état stationnaire final peuvent être facilement calculées (voir par exemple les expressions données dans [110]). On obtient une hauteur normalisée finale de la zone solide égale à 0.2618 et une concentration finale dans la phase liquide égale à 18.97 wt%. Les résultats obtenus par notre calcul sont très proches de ces valeurs théoriques (voir [figure IV.8](#) pour  $t = 50$ ).

#### IV.1.4.3 Influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase solide-liquide

Maintenant que le modèle de ségrégation a été validé avec le cas de référence, nous voulons étudier pour ce même cas l'influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase sur la dynamique de solidification.

L'hypothèse faite dans [110] de négliger la chaleur latente de changement de phase a

permis aux auteurs de découpler la thermique des autres variables telles que les concentrations dans les différentes zones ou les fractions volumiques des phases présentes. Cela a aussi permis la simplification des conditions aux limites aux frontières des trois domaines distincts qu'ils ont définis. La formulation enthalpique que nous avons adoptée permet la prise en compte du rejet de la chaleur latente via le second terme de droite de l'équation IV.7. Dans cette équation qui est valable sur l'ensemble du domaine, cette implémentation correspond à la formulation *h-source* présentée au premier chapitre. L'avantage ici, pour le cas de cet alliage et contrairement à un corps pur, est que la fraction liquide n'est plus un moyen mathématique pour étaler la transition de phase sur un écart de température afin de faciliter la résolution numérique et d'assurer la convergence de la solution, mais inclut des considérations physiques (diagramme des phases). La transition se fait sur une gamme de température définissant la largeur de la zone pâteuse. L'expression de  $g_l$  est tirée de la linéarisation du diagramme des phases et de la règle des leviers.

La prise en compte du terme de rejet de chaleur latente couple de fait l'équation IV.7 et l'équation IV.8. Le modèle numérique considérant cette chaleur latente est identique au modèle amélioré (corrigé) présenté précédemment, avec la seule différence qu'est l'ajout du terme de chaleur latente dans l'équation de conservation de l'énergie. Ce terme est directement implémenté comme terme source où la température apparaît de manière implicite.

On regarde maintenant l'influence de la prise en considération de la chaleur latente de changement de phase sur l'évolution du processus de solidification de l'alliage considéré. Sur les figures qui suivent et dans les commentaires associés,  $\Delta H_f = 0$  réfère au cas où la chaleur latente est négligée (et correspond aussi au cas traité par la référence [110] notée ci-dessous 'réf'), tandis que  $\Delta H_f \neq 0$  réfère au cas où la chaleur latente de changement de phase est prise en considération dans le modèle numérique.

Les évolutions des limites (ou interfaces) zone pâteuse-liquide et solide-zone pâteuse obtenues avec nos modèles avec et sans la chaleur latente ainsi que celle donnée par la référence [110] sont présentées sur la figure IV.9. Comme présenté et expliqué précédemment, notre cas  $\Delta H_f = 0$  reproduit bien celui de la référence [110]. On se focalise donc sur les différences notées entre les deux cas  $\Delta H_f = 0$  et  $\Delta H_f \neq 0$ . On distingue deux régions sur la figure IV.9. Une première région correspondant aux premiers instants de la solidification ( $t \lesssim 1$ ) où l'évolution de ces interfaces, plus précisément l'interface zone pâteuse-liquide, est différente entre ces deux cas. Une deuxième région, au delà de ces premiers instants ( $t \gtrsim 1$ ), où l'évolution de ces interfaces ainsi que leurs positions respectives sont assez similaires.

Un zoom sur l'évolution des interfaces durant les premiers instants de la solidification est donné sur la figure IV.9. L'interface zone pâteuse-liquide atteint une hauteur maximale pour  $\Delta H_f = 0$  (valable aussi pour [110]) supérieure à celle observée pour  $\Delta H_f \neq 0$ . Cette hauteur maximale est aussi atteinte plus vite ( $t \simeq 0.3$  ou  $0.4$  pour  $\Delta H_f = 0$  contre  $t \simeq 0.6$  pour  $\Delta H_f \neq 0$ , voir figure IV.10). Ce décalage temporel entre les deux instants où les deux interfaces atteignent leur positions maximales est dû à la différence entre les temps d'établissement des profils de température entre ces deux cas. En effet, pour  $\Delta H_f \neq 0$ , le profil de température prend plus de temps à s'établir. Cela vient de la quantité de chaleur supérieure à extraire au niveau de la paroi froide pour diminuer la température du domaine initialement liquide et à la température initiale  $T_h$  jusqu'à obtenir un profil de température linéaire, mais en tenant compte des zones ayant des températures inférieures à la température de liquidus ( $T_{l0}$  correspondant à la concentration  $c_0$ ) et qui se solidifient en partie. En plus donc de la



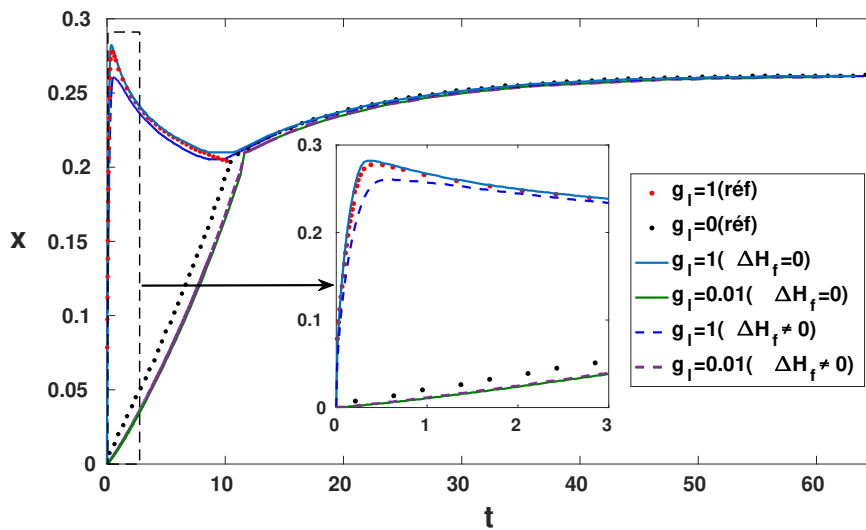


FIGURE IV.9 : Évolutions des positions des limites zone pâteuse-liquide ( $g_l = 1$ ) et solide-zone pâteuse ( $g_l = 0$ ). Les résultats de référence [110] sont représentés en pointillés, tandis que nos résultats sont représentés en lignes continues pour le cas  $\Delta H_f = 0$  et en lignes discontinues pour le cas  $\Delta H_f \neq 0$ . L'isovaleur  $g_l = 10^{-2}$  est considérée comme représentative de la limite solide-zone pâteuse. La prise en compte de la chaleur latente, *i.e.*  $\Delta H_f \neq 0$ , influence seulement la première étape de solidification. Un zoom sur l'évolution de ces interfaces lors des premiers instants de la solidification est donc donné.

chaleur sensible à extraire dans le cas  $\Delta H_f = 0$ , de la chaleur latente supplémentaire est aussi extraite pour  $\Delta H_f \neq 0$ . La température en un point donné, à une hauteur donnée de la cavité, prend donc plus de temps à descendre à sa température finale (qui est la même, vu que le même profil linéaire est atteint) quand  $\Delta H_f \neq 0$ .

Le retard sur l'établissement du profil de température est visible sur la [figure IV.10](#) qui donne l'évolution de la température en deux points, à deux hauteurs différentes de la cavité, en fonction du temps. Les positions verticales des deux points importent peu, mais peuvent être déduites sachant qu'en régime établi,  $T = x$ . Un zoom sur les hauteurs maximales atteintes par les interfaces zone pâteuse-liquide pour les différents cas est aussi représenté sur la [figure IV.10](#).

La différence entre la succession des phénomènes entre  $\Delta H_f = 0$  et  $\Delta H_f \neq 0$  peut être observée sur la [figure IV.11](#) qui donne l'évolution des profils de  $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$  et  $c_l$  à des instants successifs lors de la solidification. Avant l'établissement de la température ( $t = 0.2$ ), comme expliqué précédemment, l'avancée rapide de l'interface à  $g_l = 1$  est due à la baisse de la température au sein de la cavité après l'application du refroidissement. La différence entre les deux cas est que la baisse est plus rapide pour  $\Delta H_f = 0$  (sur la [figure IV.11](#) pour  $t = 0.2$  : à une hauteur donnée  $x = 0.2$  par exemple, la température dans le cas  $\Delta H_f = 0$  est inférieure à la température du cas  $\Delta H_f \neq 0$ ). Comme les concentrations moyennes restent relativement proches de  $c_0$ , une plus grande hauteur passe en zone pâteuse dans le premier cas  $\Delta H_f = 0$  que dans le second. Le gradient de concentration liquide  $c_l$  est aussi supérieur dans le premier cas. À  $t \simeq 5$ , la température du cas  $\Delta H_f = 0$  est établie et celle du cas  $\Delta H_f \neq 0$  ne l'est pas

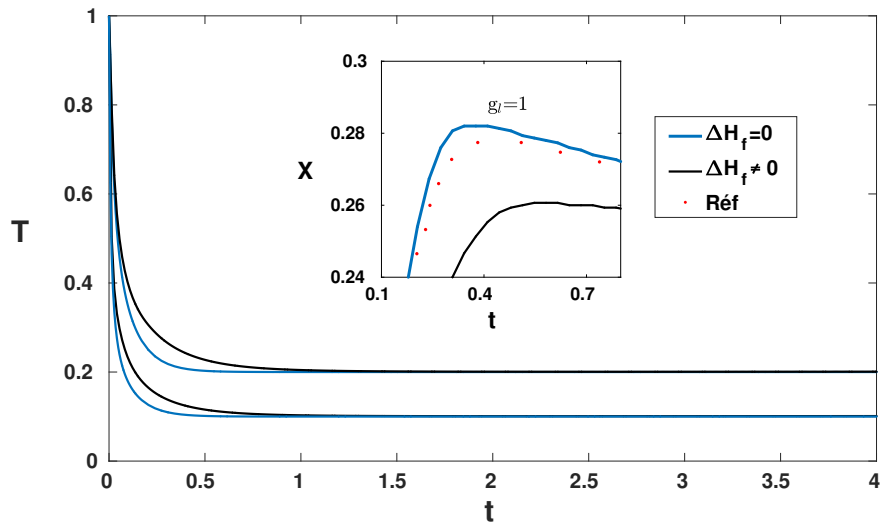


FIGURE IV.10 : Établissement de la température  $T(t)$  en deux points distincts à différentes hauteurs de la cavité. En régime établi, la température a un profil linéaire (en adimensionnel,  $T = x$ ). L'établissement de la température prend plus de temps pour le cas  $\Delta H_f \neq 0$  que pour le cas  $\Delta H_f = 0$ . Ce retard est aussi visible sur l'évolution de la position de l'interface zone pâteuse-liquide (qui est donnée aux premiers instants sur la petite figure). La hauteur maximale de cette interface quand  $\Delta H_f \neq 0$  est inférieure aux hauteurs maximales obtenues quand  $\Delta H_f = 0$  et est atteinte avec un retard correspondant à l'établissement de la température.

encore complètement. Le flux de masse qui a déjà diffusé au sein de la zone pâteuse qui s'est formée jusqu'au liquide est plus grand pour  $\Delta H_f = 0$  que pour  $\Delta H_f \neq 0$ , car le gradient de concentration  $c_l$  est supérieur. La concentration  $\langle c \rangle$  dans la zone pâteuse est donc plus petite pour le cas  $\Delta H_f = 0$  (elle s'est plus appauvrie) mais son pic à l'interface  $g_l = 1$  est supérieur à celui pour  $\Delta H_f \neq 0$ .

Après l'établissement définitif des profils de température (de  $t = 0.5$  à  $t = 1$ ), les deux pics de concentration s'étant formés à l'interface  $g_l = 1$  provoquent le recul des deux zones pâteuses ( $g_l$  augmente quand  $\langle c \rangle$  augmente pour une même température) jusqu'à des positions ayant des températures  $T_l$  qui correspondent à ces valeurs de  $\langle c \rangle$ . Du fait du plus grand gradient de  $c_l$  et de la plus grande valeur de  $\langle c \rangle$  à  $g_l = 1$  pour  $\Delta H_f = 0$ , l'interface zone pâteuse-liquide pour  $\Delta H_f = 0$  va reculer plus vite que l'interface pour  $\Delta H_f \neq 0$ .

Au delà de ces premiers instants ( $t > 1$ ), l'interface zone pâteuse-liquide pour le cas  $\Delta H_f = 0$  reculant plus vite, elle finit par avoir une position proche de celle du cas  $\Delta H_f \neq 0$ . Le gradient de  $c_l$  au sein de la zone pâteuse pour  $\Delta H_f = 0$  diminue aussi plus vite et finit par avoir exactement la même valeur que pour  $\Delta H_f \neq 0$ . En même temps, pendant ce recul des interfaces zone pâteuse-liquide,  $g_l$  était tout le temps supérieur au sein de la zone pâteuse pour  $\Delta H_f \neq 0$ . Donc le rapport entre les flux de masse se diffusant au sein de la zone pâteuse s'est inversé. Il est maintenant plus grand pour  $\Delta H_f \neq 0$ . La concentration  $\langle c \rangle$  au sein de la zone pâteuse pour  $\Delta H_f \neq 0$  (qui était plus grande durant l'établissement de la température que pour  $\Delta H_f = 0$ ) va donc baisser plus vite jusqu'à retrouver des valeurs de plus en plus proches du cas  $\Delta H_f = 0$ . L'interface solide-zone pâteuse est similaire pour les deux cas. Toutes les

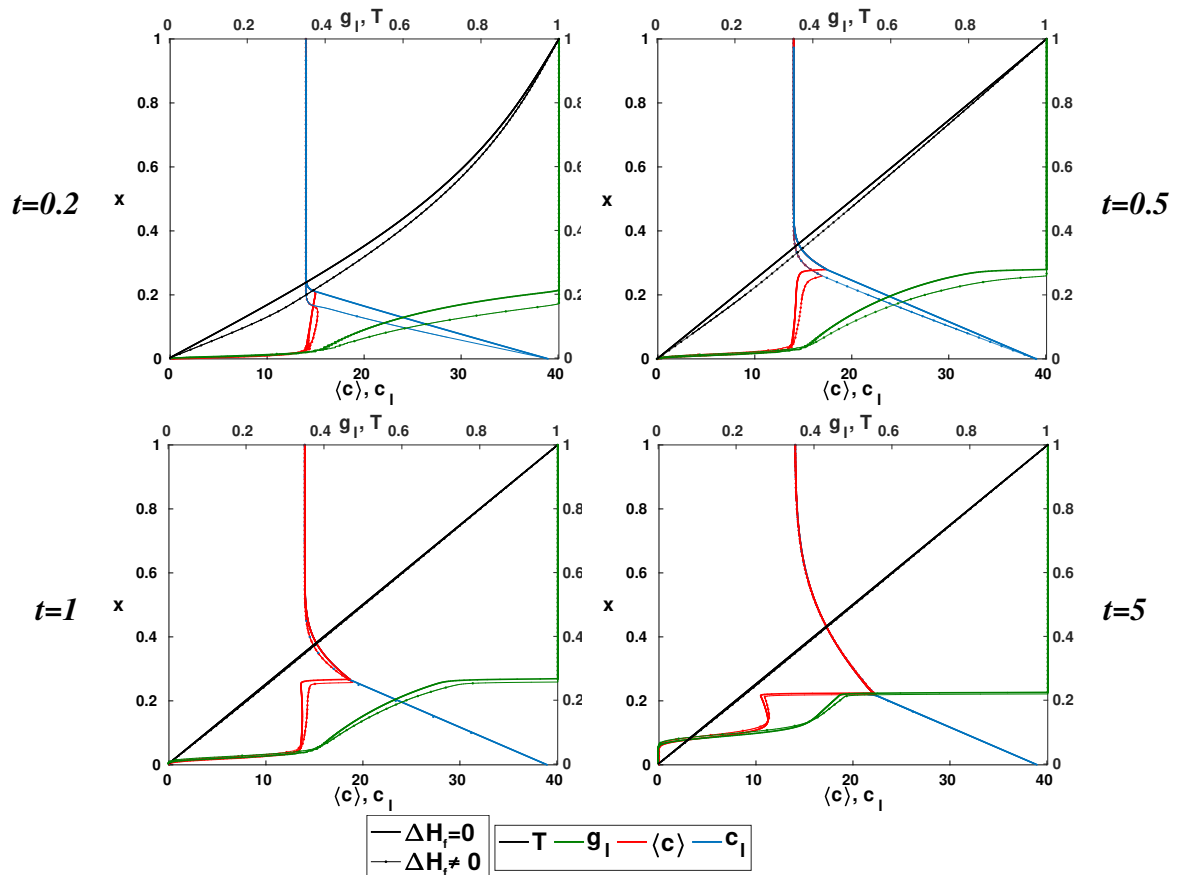


FIGURE IV.11 : Comparaison des profils des variables  $T$ ,  $g_l$ ,  $\langle c \rangle$  et  $c_l$ , obtenus pour les deux cas avec et sans chaleur latente, le long de la hauteur de la cavité à différents instants successifs au cours de la solidification. Les lignes simples correspondent au cas  $\Delta H_f = 0$  et les lignes fines avec des points au cas  $\Delta H_f \neq 0$ . Avant l'établissement total des profils de température ( $t = 0.2$  et  $t = 0.5$ ) : des différences sont notables entre les différents profils correspondants aux deux cas. La position de l'interface  $g_l = 1$  est plus haute pour le cas  $\Delta H_f = 0$ , la concentration  $\langle c \rangle$  dans la zone pâteuse est plus faible. Après l'établissement des profils de température ( $t = 1$  et  $t = 5$ ), les différences entre les différents profils diminuent (ils tendent à se superposer) et un comportement quasi-identique est observé dans leurs évolutions.

interfaces ainsi que la forme des différents profils ont ensuite des allures assez similaires et tendent à être de plus en plus proches jusqu'à la fin du processus (c'est déjà le cas à  $t = 5$ ).

Cette étude montre que la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase a bien une influence sur l'évolution du processus de solidification. Cette influence n'est néanmoins apparente qu'au cours des premiers instants de la solidification pour lesquels les fortes variations de la fraction liquide  $g_l$  en fonction du temps pèsent suffisamment sur l'équation IV.7 pour avoir un impact sur la solution calculée. Au delà de ces premiers instants, les variations de  $g_l$  sont moindres et sont plus étalées dans le temps. Les solutions alors obtenues pour les deux cas  $\Delta H_f = 0$  et  $\Delta H_f \neq 0$  sont très proches. Pour ce cas précis, les choix des conditions aux limites de température et de la composition nominale de l'alliage se prêtent bien

à l'hypothèse de négliger la chaleur latente de changement de phase. Les trois principales étapes du processus (avancée rapide, recul et disparition de la zone pâteuse) sont bien retrouvées. Encore mieux, à part les tout premiers instants, les résultats pour  $\Delta H_f = 0$  sont quasi-identiques aux résultats pour  $\Delta H_f \neq 0$ .

En plus de mettre en avant une phénoménologie particulière, cette partie nous a permis de mieux voir la méthode de résolution numérique, plus particulièrement l'expression de l'équation de conservation des espèces ainsi que l'expression de la fraction liquide. Nous essayons maintenant de simuler le cas de solidification d'un alliage étain-plomb au sein du dispositif 'Afrodite' où la phase liquide est soumise à la convection naturelle durant le refroidissement.

## IV.2 Modèle 2D convectif de solidification avec ségrégation

Dans cette partie, nous étudions le cas plus général de la solidification d'un alliage binaire, où, en plus des échanges thermiques diffusifs, des échanges convectifs sont présents au sein de la phase liquide. Pour cela, nous nous intéressons au cas de la solidification de l'alliage étain-plomb au sein du dispositif expérimental 'Afrodite'. Une telle étude nécessite la considération de différents phénomènes physiques qui apparaissent durant la solidification et dont la prise en compte dans la formulation numérique du problème est indispensable pour assurer la qualité des résultats. Nous présentons donc d'abord la problématique considérée ainsi que les conditions expérimentales d'où sont tirées les conditions aux limites de l'étude. La formulation des équations de conservation du modèle numérique décrivant le problème ainsi que les hypothèses considérées sont ensuite présentées.

### IV.2.1 Présentation de la problématique traitée

Un alliage étain-plomb avec une concentration initiale en plomb  $c_0 = 3 \text{ wt}\%$  (Sn-3 wt%Pb.) est solidifié dans le creuset du dispositif expérimental 'Afrodite'. Le processus expérimental est similaire à celui décrit dans la section III.2.1. L'alliage se trouve initialement à l'état liquide. La convection naturelle est initiée en imposant un gradient de température entre les deux parois verticales en contact avec les deux échangeurs thermiques du dispositif (voir figure I.9 et figure II.1). Ce gradient thermique est maintenu tout le long du processus de solidification. Il est calculé de la même manière que celle présentée dans la section III.2.2 et il vaut  $\Delta T^* = 20 \text{ K}$ . Les températures imposées à ces parois sont initialement supérieures à la température de fusion de l'étain pur, puis un taux de refroidissement  $Cr = -0.03 \text{ K/s}$  leur est imposé. La solidification commence au voisinage de la paroi froide (celle à droite de la cavité en  $x_1^* = 0.1 \text{ m}$ ) lorsque la température qui y est imposée passe en dessous de la température du liquidus à la concentration initiale  $c_0$ . La zone pâteuse croît alors depuis cette paroi et progresse dans le domaine liquide. Une deuxième zone pâteuse apparaît du côté de la paroi chaude (celle de la gauche du creuset en  $x_1^* = 0 \text{ m}$ ) lorsque la température qui y est imposée devient plus faible que la température du liquidus à la concentration du liquide qui est en contact avec elle. Les deux régions pâteuses ou solides qui croissent se rapprochent de plus en plus jusqu'à ce que le liquide qu'elles emprisonnent se solidifie entièrement. Durant ce processus, en plus des échanges thermiques, une ségrégation des éléments en plomb est observée au fur et à mesure de la solidification. Le plomb étant plus soluble dans la phase

liquide que dans la phase solide, une partie de ce dernier est rejetée vers le liquide qui va s'enrichir de plus en plus. La dernière zone à se solidifier est alors la plus riche en plomb. C'est la cheminée de ségrégation apparaissant en fin de solidification.

Dans cette partie, une simulation de ce processus de solidification est faite avec une modélisation  $2D_H^{1/2}$ . Cette modélisation, avec l'ajustement adéquat, est suffisante pour prendre en compte les effets dissipatifs induits par les parois latérales (sur la troisième dimension spatiale) de la cavité tout en gardant une formulation 2D. Toutefois, les ségrégations observées sur le lingot final, qui peuvent être divisées en deux principaux types (des petits canaux ségrégés apparaissant du côté de la paroi froide et une grosse cheminée de ségrégation [76,99]), ne sont pas entièrement 2D. Leur nature ainsi que leur forme présentent des variations sur l'épaisseur de confinement de la cavité le long de  $x_3^*$ . C'est surtout le cas des canaux ségrégés, dont l'étude nécessite une modélisation entièrement 3D [76]. Une telle modélisation étant très coûteuse en temps de calcul (plusieurs mois de calcul pour la résolution d'un modèle de solidification avec ségrégation 3D [89]), et notre modèle numérique de macro-ségrégation n'étant pas encore parfaitement mis au point, nous nous contentons de cette première modélisation  $2D_H^{1/2}$ , qui a priori, ne devrait pas être suffisante pour l'observation des canaux ségrégés, mais devrait l'être pour l'observation de la cheminée de ségrégation.

## IV.2.2 Modèle de solidification avec macro-ségrégation

La simulation du processus de solidification précédemment présenté nécessite la résolution d'un système comprenant à la fois les équations de conservation des grandeurs recherchées et la prise en considération des phénomènes de ségrégation induits par le changement de phase et prédits par le diagramme des phases. Le modèle macroscopique considéré ici est basé sur la technique de prise de moyennes volumiques détaillée dans [8,76]. La résolution est ici faite pour les variables recherchées (moyennées localement sur des volumes élémentaires représentatifs) à une échelle macroscopique. Ce modèle suppose une croissance dendritique colonnaire. L'apparition et la croissance des grains équiaxes ne sont donc pas considérées ici, bien qu'expérimentalement ces structures de croissance peuvent apparaître dans les lingots solidifiés. Ce système comporte les équations de conservation incluant la modélisation des phénomènes physiques apparaissant lors de la solidification. Ces équations sont détaillées ci-dessous.

### IV.2.2.1 Équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement

Cette partie modélise l'aspect hydrodynamique se produisant lors de la solidification. Elle inclut la prise en compte des termes de forces de flottabilité. En effet, la partie liquide est soumise à la convection thermo-solutale induite par les variations de la densité de la phase liquide  $\rho_l$ . Ces variations de densité peuvent être causées par la dilatation thermique du liquide en fonction de sa température ou par le changement de sa composition en élément d'alliage. Le plomb ayant une plus grande masse volumique que l'étain, les variations de la concentration en plomb au sein de la phase liquide causent des variations de la masse volumique. Cette modélisation hydrodynamique inclut aussi un terme de freinage de la phase solide qui a des vitesses supposées nulles. Ce terme de freinage existe aussi dans la zone pâteuse assimilée à un milieu poreux isotrope. Les équations de conservation sont :

— L'équation de conservation de la masse :

$$\nabla^* u_i^* = 0. \quad (\text{IV.9})$$

— l'équation de conservation de la quantité de mouvement exprimée pour le mélange [5, 76] :

$$\rho_0 \frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + \frac{\rho_0}{g_l} \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* u_i^* = -g_l \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \mu_l \nabla^{*2} u_i + g_l F^* \text{ pour } i = 1 \text{ et } 2, \quad (\text{IV.10})$$

où la densité  $\rho_0$  est considérée constante partout sauf dans le terme  $F^*$  qui est la somme des forces volumiques et est donné par :

$$F^* = F_{\text{flottabilité}}^* + F_{\text{freinage}}^* + S_{H,i}^*,$$

et où :

- $F_{\text{flottabilité}}^*$  est le terme des forces de flottabilité prenant en compte les variations de la densité, il est exprimé via l'approximation de Boussinesq comme suit :

$$F_{\text{flottabilité}}^* = g \rho^* \delta_{i,2} = g \rho_0 (1 - \beta_T (T^* - T_0) - \beta_c (c_l - c_0)) \delta_{i,2},$$

$\beta_c$  est le coefficient d'expansion solutale.

- $F_{\text{freinage}}^*$  est le terme de Darcy utilisé pour assimiler la zone pâteuse à un milieu poreux où la phase liquide se déplace dans les espacements entre les dendrites solides et immobiles. Il est exprimé comme suit :

$$F_{\text{freinage}}^* = \frac{\mu_l}{K} u_i^*,$$

où  $K$  est la perméabilité du milieu poreux.

Ce terme de Darcy a, pour ce cas de solidification avec zone pâteuse, des considérations physiques. L'expression de  $K$  prend en compte l'espacement inter-dendritique secondaire  $\lambda_2$  et est donnée par la relation de Carman-Kozeny [114] :

$$K = \frac{\lambda_2^2}{180} \frac{g_l^3}{(1 - g_l)^2}$$

- $S_{H,i}^*$  est le terme source résultant de l'intégration des équations 3D avec l'approche  $2D_H^{1/2}$ . Il est donné par l'équation III.7 et le paramètre de l'approche est réglé à  $\delta_{\text{optimal}}^*/A_w = 0.2$ .

### IV.2.2.2 Équation de conservation de l'énergie

La modélisation des transferts thermiques convecto-diffusifs se produisant au sein du domaine, ainsi que celle du rejet de la chaleur latente lors du changement de phase, est faite via l'équation de conservation de l'énergie. Dans ce modèle, une approche enthalpique est utilisée. Celle-ci permet la résolution d'une seule équation décrivant la variation de la variable température  $T^*$  sur l'ensemble du domaine comportant les deux phases liquide et solide. Les

interfaces séparant les phases solide et liquide ne sont pas suivies. L'état sous lequel se trouve localement la matière est décrit par la valeur des fractions liquide  $g_l$  et solide  $g_s$ . Comme la masse volumique est supposée être invariante entre l'état solide et l'état liquide, on ne distingue pas les fractions massiques et les fractions volumiques. Elles sont égales et notées  $g_l$  pour le liquide et  $g_s$  pour le solide. L'équation de conservation de l'énergie est exprimée comme suit :

$$\rho_0 c_p \left( \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* T^* \right) = \nabla^* \cdot (k \nabla^* T^*) - \rho_0 \Delta H_f \frac{\partial g_l}{\partial t^*} \quad (\text{IV.11})$$

### IV.2.2.3 Équation de conservation des espèces

Avec le modèle de ségrégation considéré, l'équation de conservation du soluté est exprimée en termes de concentration moyenne  $\langle c \rangle = g_l c_l + g_s c_s$  et s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \langle c \rangle + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* (c_l - \langle c \rangle) = \nabla^* \cdot (D \nabla^* \langle c \rangle) + \nabla^* \cdot (D \nabla^* (c_l - \langle c \rangle)). \quad (\text{IV.12})$$

Les termes diffusifs sont négligés devant les autres termes à cause de la faible valeur de la diffusivité  $D$  (qui autrement vaut  $D = D_l g_l + D_s g_s$ ). L'équation IV.12 s'écrit alors :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \langle c \rangle = -\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* (c_l - \langle c \rangle), \quad (\text{IV.13})$$

ou bien

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* c_l = 0. \quad (\text{IV.14})$$

Cette équation reflète le fait que, durant la solidification, seule la concentration de la phase liquide est advectée par la vitesse. Les équations IV.13 et IV.14 sont équivalentes. Pour des raisons de résolution numérique détaillées ci-dessous, nous gardons l'équation IV.13.

La résolution du système d'équations comprenant les équations de conservation précédemment données nécessite l'expression de la fraction liquide  $g_l$  et de la concentration liquide  $c_l$ . Cela est fait en fixant le chemin de solidification via la règle des leviers et la linéarisation du diagramme des phases (voir figure I.5) sous l'hypothèse d'un alliage fortement dilué. Avec cette hypothèse, on considère que les concentrations en soluté restent suffisamment faibles pour assimiler les lignes de liquidus et de solidus à des droites avec des pentes constantes. Cette linéarisation permet d'exprimer la température au sein de la zone pâteuse en fonction de la concentration  $c_l$  comme suit :

$$T^* = T_f^* + m_l c_l,$$

avec un coefficient de partage constant qui vaut :

$$k_p = c_s / c_l = m_l / m_s$$

La règle des leviers permet de relier la valeur de  $g_l$  aux concentrations locales des deux phases solide et liquide au sein de la zone pâteuse en supposant qu'elles sont à l'équilibre thermo-

dynamique local (et que le soluté diffuse instantanément dans celle-ci). Elle s'écrit :

$$g_l = \frac{\langle c \rangle - c_s}{c_l - c_s} = \frac{m_l \langle c \rangle - k_p (T^* - T_f^*)}{(T^* - T_f^*)(1 - k_p)}. \quad (\text{IV.15})$$

La concentration liquide  $c_l$  est donnée en fonction de  $\langle c \rangle$  et de  $g_l$  comme suit :

$$c_l = \langle c \rangle / (g_l + k_p(1 - g_l))$$

### IV.2.3 Résolution numérique

Le modèle de ségrégation constitué des équations de conservation fermées par les données du diagramme des phases et de la règle des leviers est implémenté sur le logiciel *COMSOL Multiphysics 5.2*. Le modèle numérique est similaire à celui présenté à la section IV.1.3 avec en plus l'utilisation du module 'Laminar flow' pour la résolution hydrodynamique. La pondération des termes de forces volumiques et la division du terme convectif dans l'équation IV.10 par la fraction liquide  $g_l$  ont pu se faire directement via les termes correspondants. Toutefois, ceci n'a pas pu se faire pour le terme de pression. La modification de ce dernier dans l'expression de l'équation des résidus du tableau des variables du module 'Laminar Flow' n'est pas suffisante et cause d'importants problèmes de convergence. La pondération par  $g_l$  du terme de pression est donc supprimée. Cela a pour conséquence une légère surestimation de l'influence de ce terme dans la zone pâteuse. Cependant, comme expliqué précédemment, avec la méthode de Darcy, le terme de freinage est prépondérant dès le début de la zone pâteuse, là où  $g_l$  commence à avoir des valeurs inférieures à 1. La surestimation du terme de pression est très minime, car elle n'est effective qu'au voisinage de la limite zone pâteuse-liquide, là où le terme de freinage n'est pas encore dominant, mais, dans ces régions,  $g_l \simeq 1$ .

L'expression choisie pour l'équation de conservation des espèces est celle donnée par l'équation IV.13. Bien que l'expression donnée par l'équation IV.14 contienne moins de termes, elle nécessite la réécriture des termes de flux convectifs en fonction de la concentration liquide  $c_l$ , or ces derniers ne sont pas accessibles pour être modifiés dans la version 5.2 du logiciel. Par contre, l'équation IV.13 permet de faire la résolution directement pour la concentration moyenne  $\langle c \rangle$  en mettant directement le terme de droite comme terme source. L'équation est alors résolue sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \langle c \rangle = S_{\langle c \rangle},$$

où le terme source  $S_{\langle c \rangle}$  s'exprime comme suit :

$$S_{\langle c \rangle} = -\mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \left( \frac{(1 - g_l)(1 - k_p)}{g_l + k_p(1 - g_l)} \langle c \rangle \right) \quad (\text{IV.16})$$

La fraction liquide est estimée de la même manière que celle détaillée à la section IV.1.3.2. Le gradient de température imposé entre les deux parois refroidies est  $\Delta T = 20$  K, le taux de refroidissement est  $Cr = -0.03$  K/s et la concentration nominale en plomb est  $\langle c_0 \rangle = 3\text{wt}\%$ .



Avec cette approche enthalpique, un maillage régulier uniforme sur l'ensemble du domaine de la cavité est utilisé. La taille des mailles est  $10^{-4} \times 10^{-4} \text{ m}^2$ . Le pas de temps est fixé à  $\Delta t^* = 10^{-2} \text{ s}$ . Les propriétés thermophysiques de l'alliage Sn-3 wt%Pb, ainsi que les données du diagramme des phases considéré sont données dans le [tableau IV.2](#).

Symboles	Valeurs	Description
$\rho_s = \rho_l$	7130 kg/m <sup>3</sup>	densité
$k_s$	55 W/(m×K)	conductivité thermique de la phase solide
$k_l$	33 W/(m×K)	conductivité thermique de la phase liquide
$c_{p_s} = c_{p_l}$	242 J/(kg×K)	capacité thermique à pression constante
$\Delta H_f$	60.7 kJ/kg	chaleur latente de fusion
$T_f^*$	232 + 273.15 K	température de fusion de l'étain pur
$T_E^*$	183 + 273.15 K	température eutectique
$c_0$	3 wt%	concentration initiale
$c_E$	38.1 wt%	concentration eutectique
$k_p$	0.0656	coefficient de partage
$m_l$	-1.286 K/wt%	pente du liquidus linéarisé
$\beta_T$	$9.5 \times 10^{-5} \text{ 1/K}$	coefficient d'expansion thermique
$\beta_c$	$5.3 \times 10^{-3} \text{ 1/wt}\%$	coefficient d'expansion solutale
$\mu$	$2 \times 10^{-3} \text{ kg/(m}\times\text{s)}$	viscosité dynamique de la phase liquide
$\lambda_2$	$90 \times 10^{-6} \text{ m}$	espacement interdendritique secondaire

Tableau IV.2 : Propriétés physiques utilisées pour modéliser l'alliage Sn-3 wt%Pb. [76].

#### IV.2.4 Résultats et discussion

Nous présentons dans cette section les résultats de la simulation numérique du processus de solidification étudié. L'évolution des champs de température avec le temps est représentée sur la [figure IV.12](#). La paroi de droite étant plus froide que celle de gauche, les premières régions solides apparaissent de ce côté là de la cavité. La zone pâteuse y apparait et commence à croître vers l'intérieur de la cavité lorsque la température devient plus basse que la température de liquidus  $T_L^*$  correspondant à la concentration nominale  $\langle c_0 \rangle$ . Une seconde zone pâteuse apparait du côté de la paroi la plus chaude plus tard en temps une fois que sa température a suffisamment diminué (grâce au taux de refroidissement qui lui est appliqué) en dessous des températures de liquidus correspondant aux concentrations du liquide en contact avec elle. Les deux zones pâteuses croissent alors vers l'intérieur de la cavité, enfermant le reste de la région entièrement liquide dont la largeur diminue petit à petit jusqu'à sa solidification complète. La [figure IV.12](#) illustre aussi l'évolution du régime de transfert thermique

## IV.2. MODÈLE 2D CONVECTIF DE SOLIDIFICATION AVEC SÉGRÉGATION

au sein de la cavité durant le processus de solidification. Avant l'apparition de la première zone pâteuse à droite de la cavité, le régime convectif induit par le gradient thermique entre les deux parois refroidies est dominant. Après l'apparition de cette première zone pâteuse et avant l'apparition de la deuxième à gauche, le régime convectif est toujours présent dans la région encore à l'état liquide, mais au sein de la zone pâteuse déjà formée, c'est le régime diffusif qui domine. L'apparition de la zone pâteuse diminue le gradient thermique effectif au sein de la zone encore liquide et le régime convectif s'atténue peu à peu. Une fois la seconde zone pâteuse apparue à gauche et jusqu'à la solidification totale du lingot, le régime diffusif est dominant. Cette évolution est aussi observable sur l'évolution du champ de vitesse au sein de la cavité (voir figure IV.13).

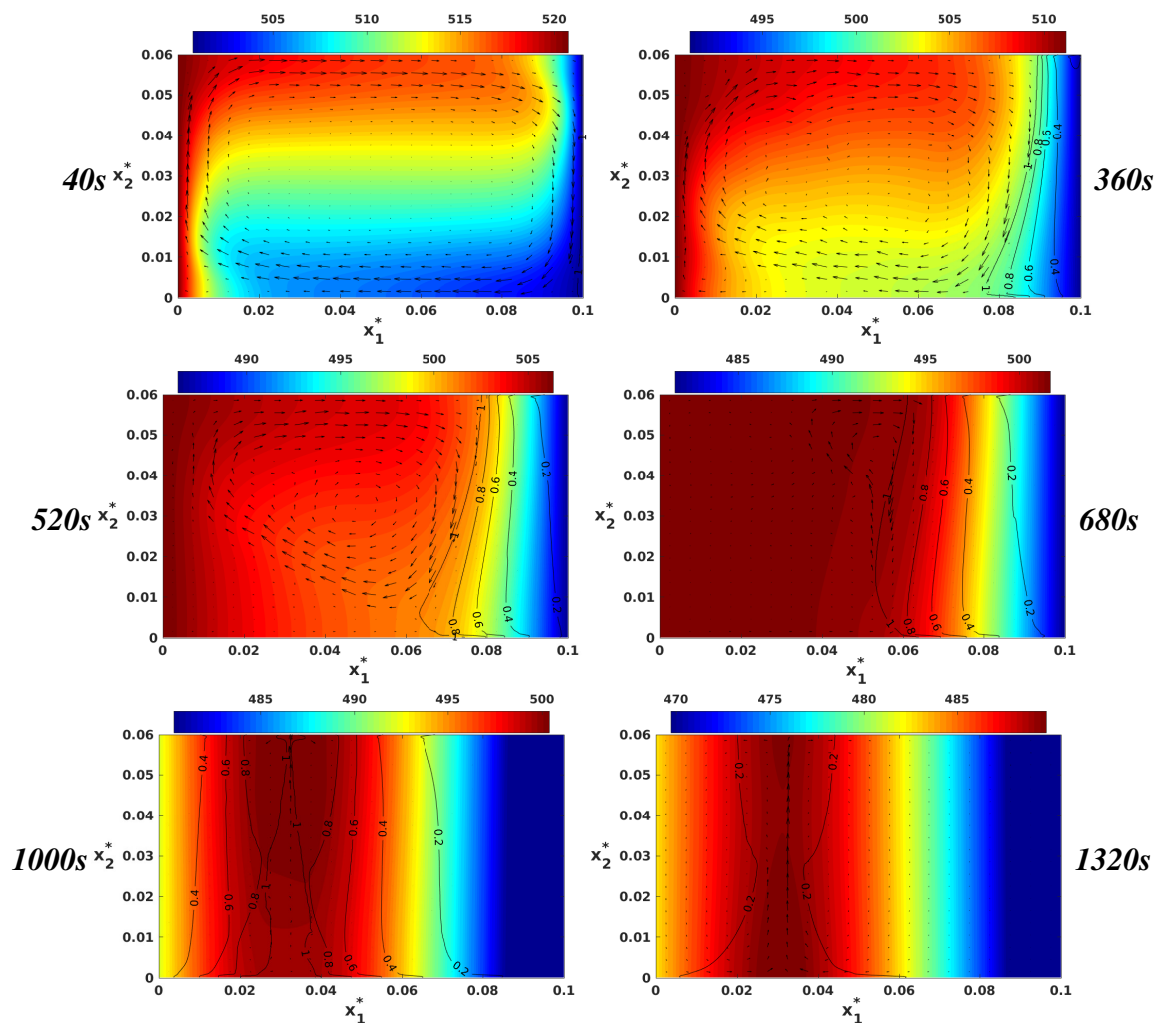


FIGURE IV.12 : Évolution du champ de température  $T^*$  au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage étain-plomb. Le gradient de température vaut  $\Delta T = 20$  K et le taux de refroidissement  $Cr = -0.03$  K/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide  $g_l$  est représentée en lignes noires.

La figure IV.13 donne l'évolution du champ de vitesse (représenté en niveau d'intensité de couleur et par des vecteurs) et des isovaleurs de la fraction liquide  $g_l$  (lignes noires) au sein

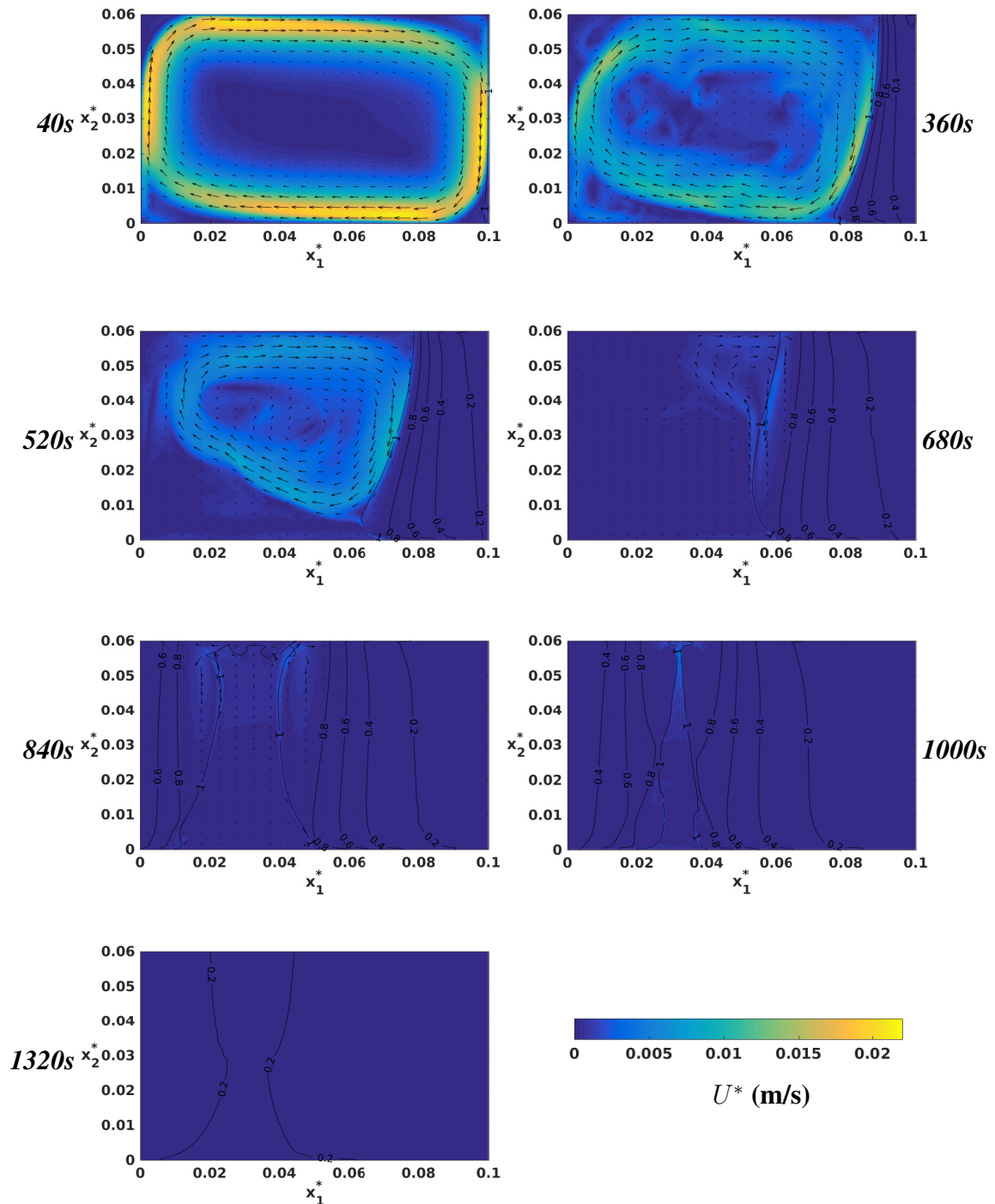


FIGURE IV.13 : Évolution du champ de vitesse (niveau d'intensité de couleur et vecteurs) au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb. Le gradient de température vaut  $\Delta T = 20$  K et le taux de refroidissement  $Cr = -0.03$  K/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide  $g_l$  est représentée en lignes noires. Le terme de freinage de Darcy est prépondérant dans la zone pâteuse et permet l'annulation des vitesses dès le début de celle-ci au voisinage de  $g_l \simeq 0.9$ .

de la cavité durant processus de solidification. Un écoulement convectif induit par le gradient thermique occupe la totalité de la cavité avant l'apparition de la zone pâteuse à droite (voir la figure IV.13 pour  $t^* = 40$  s). Cet écoulement est quasi-symétrique. Cela vient du fait que le taux de refroidissement  $Cr = -0.03$  K/s est faible et que le maximum des vitesses (localisé au voisinage des parois refroidies) vaut légèrement plus de 2 cm/s. Le temps de passage d'un élément fluide le long d'une des parois refroidies est assez court pour considérer que la température de celle-ci est quasi constante. Avec un taux de refroidissement supérieur, la tendance pourrait être différente. Un élément fluide descendant à droite serait en contact avec une paroi de plus en plus froide et accélérerait plus que quand il remonte le long de la paroi chaude de gauche qui, elle aussi, serait refroidie plus vite.

Dès la formation des premières régions solides à partir de la paroi de droite (voir la figure IV.13 pour  $t^* = 360$  s), les vitesses au sein de la zone pâteuse diminuent rapidement et tendent vers zéro. Comme expliqué précédemment, le terme de freinage  $g_l F_{freinage}^*$  assimilant la zone pâteuse à un milieu poreux devient prépondérant et permet de forcer les vitesses à être nulles au fur et à mesure que le solide se forme. Les figures IV.13 de  $t^* = 360$  à  $t^* = 1000$  montrent que ce terme est dominant dès que  $g_l \leq 0.9$ . En effet, les valeurs données par la fonction de perméabilité  $K$ , qui sont grandes et font tendre le terme de freinage vers 0 quand  $g_l = 1$ , diminuent rapidement dès que  $g_l$  descend en dessous de 1. La résistance visqueuse  $g_l \mu / K$  augmente alors rapidement et le terme de freinage devient prépondérant dans l'équation IV.10.

L'écoulement convectif au sein de la région encore liquide impacte la forme de l'interface zone pâteuse-liquide grâce à l'apport de chaleur de la paroi chaude. Cette influence est visible sur la figure IV.13 pour  $t^* = 360$  s et  $t^* = 520$  s où une courbure de l'interface zone pâteuse-liquide est observée. Au delà de ces instants, cette influence sur la forme de l'interface diminue peu à peu. Cela est dû à la diminution de l'intensité convective, en lien avec la diminution du gradient thermique moteur de l'écoulement convectif principal. En effet, une grande partie de la différence de température appliquée entre les parois chaudes et froides se retrouve dans la zone pâteuse à droite de la cavité, au sein de laquelle le régime de transfert thermique est diffusif.

Bien que l'écoulement convectif principal, qui est dû au gradient de température au sein de la zone liquide, diminue, un écoulement de convection solutale, dû à l'enrichissement du liquide interdendritique et du liquide au contact de la zone pâteuse grâce à la ségrégation du soluté, apparaît et contribue à maintenir l'écoulement convectif total. En effet, la différence de densité entre le plomb et l'étain entraîne l'écoulement vers le bas des éléments fluides les plus riches en plomb. Cette influence du rejet de soluté sur l'écoulement, exprimée dans le terme des forces de flottabilité via le coefficient d'expansion solutale, vient maintenir l'écoulement descendant le long de la première interface zone pâteuse-liquide apparaissant du côté droit. Au moment de l'apparition de la seconde zone pâteuse à gauche, l'écoulement convectif total a déjà bien diminué. Seul l'écoulement de convection thermosolutale demeure encore légèrement. Il est descendant au voisinages des deux zones enrichies ( $g_l \simeq 0.9$ ) et ascendant dans la région pleinement liquide. Au fur et à mesure que les deux zones pâteuses croissent et que la largeur de l'épaisseur entièrement liquide diminue, l'écoulement convectif disparaît peu à peu.

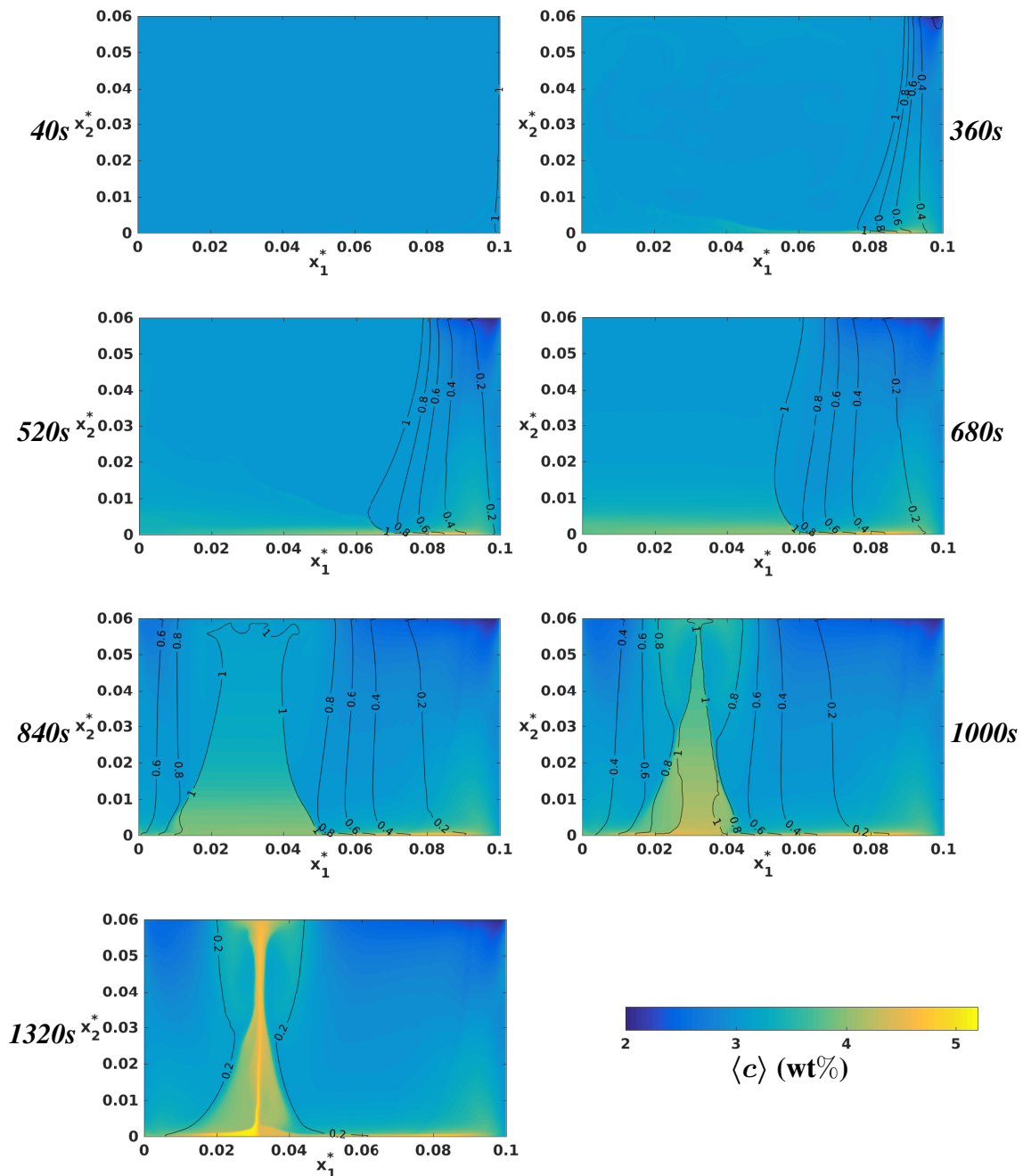


FIGURE IV.14 : Évolution de la distribution moyenne en plomb  $\langle c \rangle$  au sein de la cavité durant le processus de solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb. Le gradient de température vaut  $\Delta T = 20$  K et le taux de refroidissement  $Cr = -0.03$  k/s. L'évolution des isovaleurs de la fraction liquide  $g_l$  est représentée en lignes noires. Le soluté est rejeté vers la phase liquide au fur et à mesure de la solidification. La cheminée de ségrégation correspondant aux dernières parties liquides solidifiées qui sont les plus enrichies en soluté est retrouvée. Une zone légèrement enrichie est aussi observée en bas du côté de la paroi froide : elle correspond à la localisation des canaux ségrégés, mais ces derniers ne sont pas nettement retrouvés.

En effet, bien que le rejet du soluté continue à se faire (voir la figure IV.14), les fortes dissipations visqueuses induites par le freinage de l'écoulement aux deux interfaces zone pâteuse-liquide déjà formées et celle induite par les parois latérales, considérée ici avec l'approche  $2D_H^{1/2}$ , stoppent l'écoulement convectif. Les vitesses tendent alors définitivement vers zéro jusqu'à la solidification totale du lingot.

Lors de ce processus de solidification, le phénomène de ségrégation du plomb peut être observé. La figure IV.14 présente l'évolution de la concentration moyenne  $\langle c \rangle$  du plomb au sein de la cavité au cours du processus. L'évolution de la fraction liquide  $g_l$ , permettant de distinguer les régions liquide et pâteuse, y est aussi représentée. À l'état initial, la concentration nominale est égale à 3 wt% (voir la figure IV.14 pour  $t^* = 40$  s). Avec l'apparition de la première zone pâteuse, la ségrégation commence. Le soluté est rejeté vers le liquide où il est plus soluble. Comme expliqué précédemment, le rejet du plomb favorise l'écoulement descendant le long de l'interface zone pâteuse-liquide. Les zones en bas à droite de la cavité sont donc les premières à être enrichies en plomb. Le plomb rejeté durant les premiers stades du processus (voir la figure IV.14 pour  $t^* = 360$  et  $t^* = 520$ ) est légèrement évacué par l'écoulement convectif qui est toujours important.

Après la diminution de l'écoulement convectif total et la subsistance principale de l'écoulement de convection thermosolutale (écoulement descendant le long de la limite zone pâteuse-liquide à droite), la ségrégation du plomb se fait d'abord principalement vers le bas de la cavité (voir la figure IV.14 pour  $t^* = 680$ ). Avec l'avancée du processus, un second écoulement de convection solutale descendant est provoqué par l'enrichissement du liquide au voisinage de la seconde zone pâteuse qui apparaît à gauche de la cavité (voir la figure IV.13 pour  $t^* = 840$ ). La combinaison de ces deux écoulements descendants génère un écoulement ascendant au milieu de la région liquide. Cet écoulement ascendant, combiné à la ségrégation qui se fait de plus en plus dans la direction horizontale provoque la formation de la cheminée de ségrégation (voir la figure IV.14 pour  $t^* = 1000$  et  $t^* = 1320$ ). Cette cheminée est la trace des dernières régions liquides à se solidifier. Ces régions sont les plus riches en soluté et présentent donc les concentrations les plus élevées en plomb (de l'ordre de 5 wt%).

Maintenant que la succession des étapes du processus de solidification ont été détaillées, nous comparons les résultats de notre modèle aux résultats expérimentaux obtenus avec le dispositif 'Afrodite'. La figure IV.15 donne une vue qualitative de la ségrégation finale observée sur le lingot solide avec notre modèle (à gauche) et celle obtenue par radiographie X du lingot solidifié (issue de [88]). Les zones riches en plomb apparaissent en blanc tandis que les régions pauvres sont plus sombres. Les canaux ségrégés se formant en bas du côté de la paroi froide ne sont pas retrouvés de manière nette avec notre modèle numérique, mais ce dernier donne quand même un enrichissement en plomb dans cette région là. La cheminée de fin de solidification qui correspond aux dernières parties liquides à s'être solidifiées et qui sont aussi les plus enrichies en plomb, est bien retrouvée. Celle-ci semble être accentuée dans notre modèle numérique où elle occupe la totalité de la hauteur du lingot. Notons tout de même que sur les résultats expérimentaux, la zone noire en haut du lingot au niveau de la cheminée de fin de solidification correspond à une zone d'où l'alliage s'est retiré en se solidifiant, car, à l'état solide, l'alliage étant en réalité plus dense qu'à l'état liquide, il occupera moins de volume.

Pour une comparaison quantitative des résultats obtenus, nous présentons sur la figure IV.16 les valeurs de la concentration mesurées sur le lingot final, avec une technique d'analyse chi-

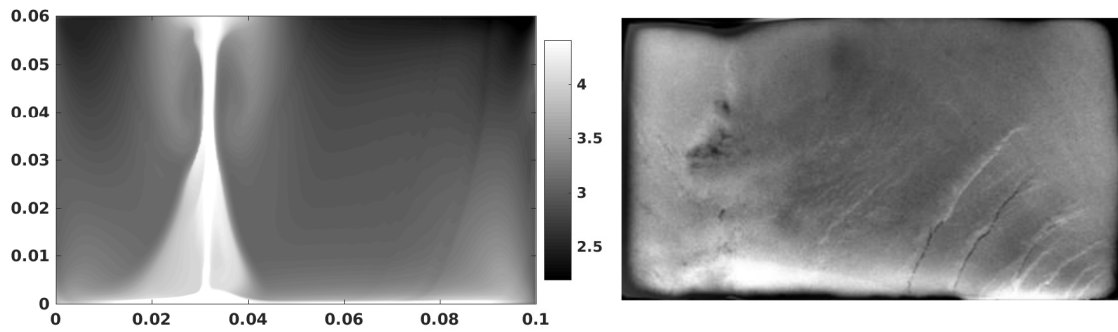


FIGURE IV.15 : Comparaison qualitative de la ségrégation finale observée sur le lingot solide. Á gauche : contour de la concentration  $\langle c \rangle$  avec une échelle de couleur en gris allant de 2.2 à 4.4 wt% ; à droite : radiographie X du lingot solide (issue de [88]). Les zones riches en plomb apparaissent en clair et les zones pauvres sont plus sombres.

mique couplée à l'ICP (après carottage du lingot comme présenté sur la figure I.13) [76, 88], ainsi que les valeurs obtenues avec le modèle numérique. Cette comparaison est faite le long de la ligne  $x_2^* = 0.01$  m. L'allure générale de la distribution du plomb le long de cette ligne est retrouvée, mais les valeurs de la concentration calculées correspondent qu'approximativement à celles mesurées. Les valeurs expérimentales montrent un appauvrissement en plomb des premières régions solides formées au voisinage de la paroi de droite, alors que les valeurs calculées montrent un enrichissement à ce niveau. La comparaison montre aussi une différence sur la position de la cheminée de fin de solidification, là où la concentration en plomb est maximale. La cheminée expérimentale est plus proche de la paroi de gauche. Cela est

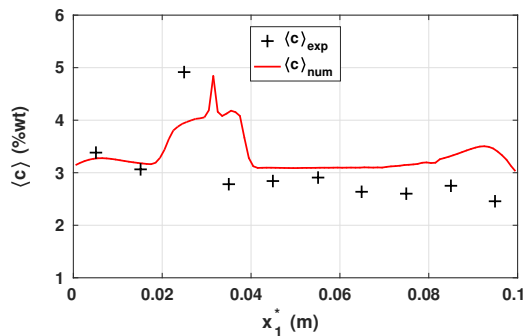


FIGURE IV.16 : Comparaison entre les valeurs de la concentration finale en plomb mesurées expérimentalement sur le lingot solidifié et celles obtenues numériquement le long de la ligne  $x_2^* = 1\text{ cm}$  .

probablement dû aux conditions aux limites thermiques, comme montré à la section III.2.2, des résistances thermiques de contact pouvant amener les températures aux parois à être différentes de celles calculées avec le taux de refroidissement nominal appliqué. Ce décalage traduit donc une différence entre la température imposée dans le modèle et celle appliquée lors de l'expérience. Mis à part ce décalage en position, la valeur du pic calculée à la position de la cheminée est proche de celle mesurée expérimentalement (de l'ordre de 4.8 wt%). Une dernière différence notée est la forme de la distribution du plomb au voisinage de cette cheminée. Les résultats expérimentaux obtenus sur un nombre restreint de points le long de  $x_1^*$  semblent tout de même montrer un pic net, tandis que dans les résultats numériques, ce

pic présente des épaulements sur les cotés. La cause de cet effet apparait clairement sur les figures IV.13 et IV.14 pour  $t^* = 840$  et  $1000$  s. Les deux écoulements descendant aux limites des deux zones pâteuses se rejoignent et entraînent un écoulement ascendant au milieu du liquide restant. Le soluté rejeté, riche en plomb, est alors soulevé vers le haut au sein du liquide restant jusqu'à la paroi du haut où il redescend à nouveau en s'étalant plus largement. Avec la solidification, le lingot solide obtenu avec le modèle numérique garde cette allure de distribution du plomb en fin de solidification, à laquelle est venue s'ajouter la ségrégation horizontale de fin de solidification, donnant donc des valeurs de concentration en plomb élevées au voisinage de la cheminée.

L'évolution de la concentration calculée moyennée sur le domaine  $\langle c_{m_D} \rangle$  durant le processus de solidification simulé (voir figure IV.17) montre que le modèle numérique ne conserve pas parfaitement la quantité de soluté  $c_0$  initialement considérée. La valeur de  $\langle c_{m_D} \rangle$  augmente de façon presque linéaire du début de la solidification jusqu'à la fin de celle-ci. La quantité de soluté rejeté vers le liquide est donc constamment surévaluée. L'écart final entre  $\langle c_{m_D} \rangle$  et  $c_0$  est de  $0.166$  wt%, donnant un ajout relatif final de  $5.55\%$  en soluté.

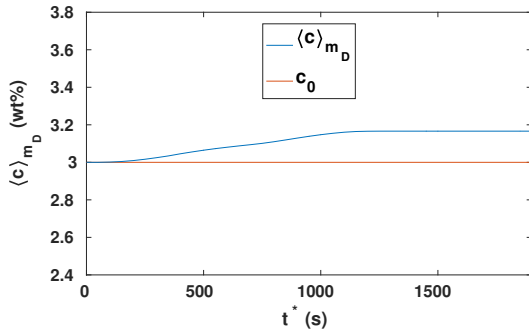


FIGURE IV.17 : Évolution de la concentration (calculée avec le modèle) moyennée sur l'ensemble du domaine par rapport à la concentration initiale  $c_0$ . L'écart relatif maximal observé en fin de solidification vaut  $5.55\%$ .

Cet ajout du soluté lors de la résolution est directement lié au terme source  $S_{\langle c \rangle}$  défini par l'équation IV.16 et utilisé pour résoudre l'équation de conservation des espèces IV.13. Comme la fraction liquide  $g_l$  (donnée par l'équation IV.15) est estimée explicitement à l'instant  $t^{*n+1}$  avec les champs de concentration et de température calculés à l'instant  $t^{*n}$ , elle est constamment surestimée, car, durant la solidification, la fraction liquide globale au sein de la cavité diminue de manière monotone. Cette surestimation de  $g_l$  est la cause probable de l'estimation imparfaite du terme source  $S_{\langle c \rangle}$ . Les essais menés avec une formulation implicite de la fraction liquide  $g_l$  rendent difficiles la convergence de la solution numérique. L'augmentation de l'ordre de discrétisation des variables  $\langle c \rangle$  et  $T$  au delà du deuxième ordre permet d'obtenir une convergence de la solution, mais le pas de temps numérique du solveur (le solveur cherche toujours à maximiser le pas de temps et le réduit quand la solution recherchée varie plus vite) ne dépasse pas les  $10^{-6}$  s. Sachant qu'avec le maillage utilisé, les différents couplages entre les équations et la puissance des machines utilisées, la résolution faite par le solveur temporel pour une seule incrémentation du pas de temps numérique peut prendre plusieurs secondes physiques. Le temps de résolution alors nécessaire pour simuler un processus de  $1500$  s rend cette option inappropriée. L'autre solution serait de directement considérer l'équation IV.14 pour la conservation des espèces. Toutefois, comme expliqué précédemment, sur la version 5.2 du logiciel, les termes de flux convectif utilisés lors de la résolution sont par défaut le produit des vitesses et de la concentration  $\langle c \rangle$ . On peut enfin envisager de faire la résolution



pour la variable  $c_l$ , mais cela nécessite encore des modifications du terme temporel et une reconstruction de  $\langle c \rangle$  à chaque pas de temps.

En l'état, cet excès du soluté peut être vu de deux manières différentes. Dans la première, le constat est fait que cet excès modifie la cinétique de ségrégation. Cela est surtout visible vers la fin du processus où la grande partie de soluté ajouté par le modèle se retrouve au voisinage de la cheminée de fin de solidification. Des approfondissements de la modélisation et de la résolution numériques doivent être alors menés. Si maintenant on considère le besoin en modèles numériques très légers pour la résolution de tels problèmes fortement multi-physiques et multi-échelles, une telle déviation ( $< 5.6\%$ ) peut être admise. Cela, d'autant que la modélisation hydrodynamique et thermique et même l'allure générale de la ségrégation sont retrouvées avec un modèle général  $2D_H^{1/2}$ . Cette seconde considération répond en partie au besoin de la mise en place de modèles numériques légers dans la formulation et la résolution, avec des résultats corrects, du moins suffisamment pour être utilisés dans des études paramétriques où des premières observations sur le comportement des solutions peuvent être faites.

### IV.3 Conclusion

Une étude sur la ségrégation des éléments d'alliage lors de la solidification des alliages métalliques binaires a été menée. Lors de telles solidifications, la cinétique des phénomènes physiques et des transferts est différente de celle des changements de phase des corps purs. Deux cas distincts de solidification avec ségrégation d'alliages binaires ont été traités. Dans le premier, la solidification est unidimensionnelle et les transferts exclusivement diffusifs. Dans le second, la solidification traitée est bidimensionnelle et les échanges sont convecto-diffusifs.

Le premier cas étudié correspond à un cas de référence où une solidification partielle d'un alliage binaire est faite en refroidissant une extrémité du domaine fini en dessous de la température du solidus et en maintenant l'autre extrémité à une température supérieure à la température de liquidus. Ce cas 1D peut sembler très simpliste de premier abord, mais a la particularité de présenter une phénoménologie particulière. En effet, au cours de la solidification, la zone pâteuse se développant à partir de la paroi refroidie disparaît entièrement au bout d'un certain temps pour ne laisser dans le domaine que deux régions, une solide du côté de la paroi froide et une liquide du côté de la paroi chaude. Une solution analytique complexe de ce problème existe. Elle nécessite le traitement des régions liquide, pâteuse et solide séparément et l'application d'une méthode des caractéristiques. Nous avons proposé un modèle numérique 1D basé sur une approche enthalpique où les équations de conservation de l'énergie et des espèces sont résolues. La formulation du modèle numérique et son implémentation sur le logiciel numérique ont été détaillées. Le bon accord avec les résultats analytiques a permis de valider le modèle numérique et de mettre en avant les détails de résolution nécessitant des attentions particulières, notamment l'expression des flux de transport des espèces et celle de la fraction liquide. Un approfondissement des résultats permet d'expliquer la succession des phénomènes physiques entraînant l'apparition, l'avancée et la disparition de la zone pâteuse. Ensuite, l'étude de l'influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase, négligée au départ, est faite. Celle-ci montre que sa considération ralentit l'avancée rapide de la zone pâteuse, mais que son retrait jusqu'à sa disparition est quasi-similaire au cas où elle a été négligée.

### IV.3. CONCLUSION

---

La seconde étude porte sur la modélisation de la solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb au sein du montage expérimental 'Afrodite'. Ce cas est multi-physiques et présente, en plus des transferts diffusifs, des transferts convectifs induits par l'écoulement de convection thermo-solutale au sein des régions liquides. Un modèle complet de macro-ségrégation est détaillé. Ce modèle est basé sur la technique de prise de moyennes volumiques couplant les équations de conservation des variables moyennées au modèle de micro-ségrégation, représenté par la règle des leviers associée à la linéarisation du diagramme des phases. Les résultats numériques présentent un accord en demi-teinte avec les résultats expérimentaux. La macro ségrégation principale apparaissant en fin de solidification est retrouvée, mais pas les canaux ségrégués. L'allure de répartition des valeurs des concentrations du plomb calculées et de celles mesurées sur le lingot final sont proches, mais des différences locales sur leurs valeurs subsistent. Ces différences sont dues à la formulation choisie de l'équation de conservation des espèces. Celle-ci est la formulation qui donne le meilleur compromis pour la convergence du calcul. Cela ne diminue pas l'intérêt du modèle numérique présenté qui, avec une formulation 2D prenant en compte les effets dissipatifs induits par les parois latérales, arrive quand même à donner l'allure générale de la répartition du plomb.



# Conclusion Générale & Perspectives

Dans les procédés de solidification, plusieurs phénomènes physiques se couplent et ont une influence majeure sur les propriétés des lingots obtenus. La maîtrise de ces procédés est indispensable pour améliorer la qualité des produits, mais cela passe obligatoirement par la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu. Ces phénomènes sont variés et complexes. L'un des outils majeurs en vue de leur compréhension et de la prédiction fiable des résultats de ces procédés est la modélisation et la simulation numérique. Ce travail de thèse est consacré à l'étude des phénomènes convectifs apparaissant lors de la transition de phase solide-liquide. Il s'inscrit dans un projet PHC-Maghreb portant sur la croissance cristalline. Nous nous sommes particulièrement intéressés à la configuration de solidification 'Afrodite'. Elle est similaire à une situation de Bridgman horizontale. Son creuset est assimilé à une cavité confinée différentiellement chauffée. Dans ce contexte, le but fixé est le développement de modèles numériques fiables pour simuler les procédés de solidification, tout en restant légers et peu coûteux en temps de calcul.

Le premier chapitre de ce travail a donc été consacré à la revue bibliographique des différentes approches numériques possibles pour modéliser le changement de phase solide-liquide. Dans un premier temps, on s'est intéressé au cas des corps purs, puis, ensuite, à celui des alliages métalliques. Deux approches numériques principales sont utilisées, chacune avec ses avantages propres, mais restreinte uniquement à un type d'étude. La première est la méthode multi-domaines, qui permet le suivi explicite de l'interface solide-liquide. Elle est appropriée à l'étude du changement de phase isotherme des corps purs. Elle a donc été utilisée pour simuler le changement de phase solide-liquide de l'étain pur. La deuxième méthode, la méthode enthalpique, permet la résolution d'un système unique d'équations sur tout le domaine étudié (contenant à la fois les deux phases solide et liquide). Elle est mieux adaptée aux changements de phase non isothermes avec zone pâteuse. Elle a donc été utilisée pour le cas des alliages binaires. Pour le cas de ces alliages, les modèles de ségrégation les plus répandus, qui sont nécessaires à la fermeture des équations modélisées, ont été détaillés.

Les simulations numériques 3D sont les plus fiables, mais pour de tels procédés de solidification, avec autant de phénomènes physiques couplés, ces modèles 3D restent onéreux (en termes de moyens et de temps de calcul). Cela les rend de fait inappropriés aux études paramétriques demandant des modèles rapides et légers en termes de résolution, tout en gardant des résultats fiables. Dans cette perspective là, le second chapitre a été consacré à l'expression et l'adaptation de modèles (traitant la convection naturelle en cavité différentiellement chauffée) semi-analytiques, dit  $2D^{1/2}$ , qui prennent en considération la tri-dimensionnalité des phénomènes hydrodynamiques dans une formulation 2D. Ces modèles  $2D^{1/2}$  sont obtenus en moyennant les équations de conservation sur la direction transverse  $x_3$  (direction de confinement de la cavité). L'intégration des équations est réalisée en supposant deux types de

profils de vitesse. Le profil parabolique de Poiseuille aboutissant au modèle  $2D_P^{1/2}$  et le profil de type Hartmann donnant le modèle  $2D_H^{1/2}$ . Une méthode d'ajustement des profils de type Hartmann via un paramètre  $\delta$  est présentée, permettant d'optimiser les résultats du modèle  $2D_H^{1/2}$ . Pour chaque cas considéré, correspondant à un couple de valeurs des paramètres de contrôle ( $Pr$ ,  $Gr$ ), une seule valeur de  $\delta$ ,  $\delta_{optimal}$ , minimise l'erreur relative par rapport aux résultats 3D. L'unicité de cette valeur optimale permet la meilleure prise en considération des effets dissipatifs qu'induisent les parois latérales. Un domaine de validité, où les hypothèses considérées lors de la formulation  $2D^{1/2}$  sont parfaitement respectées, a été défini. Sur ce domaine, une relation empirique pour  $\delta_{optimal}$  en fonction du paramètre de contrôle ( $Gr$ ) a été déduite, assurant ainsi la disponibilité pratique et optimale de la modélisation  $2D_H^{1/2}$ .

Les modèles numériques 2D,  $2D_P^{1/2}$ ,  $2D_H^{1/2}$  et 3D ont été ensuite adaptés afin de traiter des cas de changement de phase solide-liquide et permettre le suivi du front solide-liquide. Une approche multi-domaines avec une méthode à maillage dynamique a été utilisée. Des premiers cas, des cas d'équilibre de phases, obtenus lorsque la température imposée à la paroi chaude (respectivement froide) est supérieure (respectivement inférieure) à la température de fusion, ont été étudiés.

Les comparaisons qualitatives et quantitatives entre les résultats (champs de température et positions des interfaces solide-liquide aux états d'équilibre) obtenus avec les modèles 2D,  $2D_P^{1/2}$ ,  $2D_H^{1/2}$  et ceux obtenus avec le modèle 3D, montrent que le modèle  $2D_H^{1/2}$  peut se substituer de manière très fiable au modèle 3D. C'est que ce modèle estime particulièrement bien les effets dissipatifs induits par les parois latérales, là où ces derniers sont soit négligés dans les modèles 2D, soit moins bien estimés dans les modèles  $2D_P^{1/2}$ . En plus de cette fiabilité, le modèle  $2D_H^{1/2}$  reste une formulation 2D du problème avec des temps de résolution, en moyenne, quarante fois plus petits que ceux requis pour la résolution 3D, montrant ainsi l'adéquation de ces modèles pour des études paramétriques.

Un processus expérimental de solidification complète d'un lingot d'étain pur, réalisé au sein de la configuration 'Afrodite', et sa simulation numérique avec le modèle  $2D_H^{1/2}$ , ont été rapportés. Le traitement approfondi des données expérimentales pour la définition des conditions aux limites thermiques appropriées pour le modèle numérique, la déduction de la valeur optimale du paramètre  $\delta$ , ainsi que l'adaptation de la méthode de suivi du front ont été détaillés. Les résultats numériques et expérimentaux montrent un bon accord, d'une part, sur l'évolution de la position et de la forme des fronts solide-liquide au cours du temps et d'autre part sur la durée totale de la solidification. Cela illustre, la capacité et la fiabilité du modèle  $2D_H^{1/2}$  pour la simulation de tels cas de solidification.

La dernière partie de ce travail a été consacrée à l'étude de deux cas distincts de ségrégation apparaissant lors de la solidification des alliages binaires. Ces cas de solidification présentent des cinétiques différentes de celles des corps purs. Dans le premier cas, la solidification est unidimensionnelle et les transferts exclusivement diffusifs. Il correspond à un cas de référence bien détaillé où, avec la solidification, la zone pâteuse se développant à partir de la paroi refroidie disparaît entièrement au delà d'un certain temps. Un modèle numérique 1D a été proposé, basé sur une approche enthalpique avec laquelle les équations de conservation de l'énergie et des espèces sont résolues au sein d'un domaine unique. La formulation de ce modèle numérique et son implémentation sur le logiciel numérique ont été détaillées, et validées par le bon accord avec les résultats analytiques de référence. L'approfondissement des

résultats obtenus a permis d'expliquer la succession des phénomènes physiques entraînant l'apparition, l'avancée et la disparition de la zone pâteuse. L'influence de la prise en compte de la chaleur latente de changement de phase, négligée au départ, a ensuite été étudiée.

Le second cas de ségrégation traité porte sur la modélisation de la solidification de l'alliage Sn-3 wt%Pb au sein du montage expérimental 'Afrodite'. Ce cas est multi-physiques et présente des transferts convecto-diffusifs incluant de la convection thermo-solutale. Un modèle complet de macro-ségrégation a été détaillé. Les résultats numériques obtenus présentent un accord partiel avec les résultats expérimentaux. Les canaux ségrégés observés expérimentalement ne sont pas retrouvés numériquement, mais la macro-ségrégation principale apparaissant en fin de solidification est bien captée. Les concentrations en plomb calculées et celles mesurées peuvent être localement différentes, mais l'allure générale de leur répartition est similaire. Cela confirme l'intérêt du modèle numérique présenté, qui garde une formulation 2D et prend en compte les effets dissipatifs induits par les parois latérales.

Ce travail, qui a permis de développer des modèles à la fois fiables et légers pour l'étude de cas de solidification en cavité confinée requiert encore quelques approfondissements. En effet, la dernière partie de notre travail a montré que des efforts de modélisation sont encore nécessaires pour assurer la fiabilité totale des prédictions de macro-ségrégation. Pour cela, plusieurs pistes sont possibles. La résolution de l'équation de conservation des espèces peut se faire en termes de la concentration liquide au lieu de la concentration moyennée. L'expression des flux convectifs de soluté pourrait aussi être accessible via le code source du logiciel. Enfin, un objectif ambitieux serait d'introduire une prise en compte des variations transverses de la concentration à travers une modélisation adéquate permettant toutefois de garder une formulation bidimensionnelle.



# Références Bibliographiques

- [1] G. Lamé and B. P. Clapeyron, “Mémoire sur la solidification par refroidissement d’un globe solide,” *Ann. Chem. Phys.* **47** (1831) 250–60.
- [2] J. Stefan, “Über die Theorie der Eisbildung,” *J. Monatsh. f. Mathematik und Physik* **1** (1890) 1-6.
- [3] J. Stefan, “Ueber die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere,” *Ann. Phys.* **278** (1891) 269-286.
- [4] J. Crank, “Free and Moving Boundary Problems,” Clarendon Press, Oxford (1984).
- [5] W. D. Bennon and F. Incropera, “A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - I : model formulation,” *Int. J. Heat Mass Transf.* **30** (1987) 2161-2170.
- [6] W. D. Bennon and F. P. Incropera, “A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems-II : Application to solidification in a rectangular cavity,” *I. J. Heat Mass Transf.* **30** (1987) 2171-2187.
- [7] P. J. Prescott, F. Incropera and W. D. Bennon, “Modeling of dendritic solidification-systems : reassessment of the continuum momentum equation,” *Int. J. Heat. Mass. Transf.* **34** (1991) 2351-2359.
- [8] J. Ni and C. Beckermann, “A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification,” *Metall. Trans. B* **22** (1991) 349-361.
- [9] C. Y. Wang and C. Beckermann, “A multiphase solute diffusion model for dendritic alloy solidification,” *Metall. Trans. A* **24** (1993) 2787-2802.
- [10] C. Y. Wang and C. Beckermann, “Equiaxed dendritic solidification with convection : Part I. multiscale/multiphase modeling,” *Metallurgical Mater Trans. A* **27** (1996) 2754-264.
- [11] N. Provatas, N. Goldenfeld and J. Dantzig, “Efficient computation of dendritic microstructures using adaptive mesh refinement,” *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 3308-3311.
- [12] M. Ainsworth and J.T. Oden, “A posteriori error estimation in finite element analysis,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **142** (1997) 1-88.
- [13] J. A. Mackenzie and M. L. Robertson, “A moving mesh method for the solution of the one-dimensional phase-field equations,” *J. Comp. Phy.* **181** (2002) 526-544.
- [14] F. Duarte, R. Gormaz and S. Natesan, “Arbitrary Lagrangian-Eulerian method for Navier-Stokes equations with moving boundaries,” *Computer Methods in Applied mechanics and Engineering* **193** (2004) 4819-4836.



- [15] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, and A. Karma, "Phase-field simulation of solidification," *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** (2002) 163-194.
- [16] G. J. Fix, *Free boundary problems, Chapter : Phase field models for free boundary problems,* New York : Pitman (1983).
- [17] A. Karma and W. J. Rappel, "Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics," *Phys. Rev. E* **53** (1996) 3017-3020.
- [18] C. Hirt and B. Nichols, "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries," *J. Comput. Phys.* **39** (1981) 201-225.
- [19] M. Reitzle, C. Kieffer-Roth, H. Garcke and B. Weigand, "A volume-of-fluid method for three-dimensional hexagonal solidification processes," *J. Comp.Phys.* **339** (2017) 356-369.
- [20] S. Osher and P. R. Fedkiw, "Level Set Methods : An Overview and Some Recent Results," *J. Comp. Physics* **169** (2001) 463-502.
- [21] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau and J. P. Rivet, "Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions," *Complex. Syst.* **1** (1987) 649-707.
- [22] W. S. Jiaung, J. R. Ho and C. P. Kuo, "Lattice Boltzmann Method for the Heat Conduction Problem with Phase Change, Numerical Heat Transfer," Part B : Fundamentals **39** (2001) 167-187.
- [23] G. de Fabritiis, A. Mancini, D. Mansutti and S. Succi, "Mesoscopic models of liquid/solid phase transitions," *Int. J. Mod. Phys. C* **9** (1998) 1405-1415.
- [24] E. A. Semma, M. E. Ganaoui and R. Bennacer, "Lattice Boltzmann method for melting/solidification problems," *Comptes Rendus de Mécanique* **335** (2007) 295-303.
- [25] D. Chatterjee, S. Chakraborty, "An enthalpy-based lattice Boltzmann model for diffusion dominated solid-liquid phase transformation," *Phys. Lett. Sect. A General, Atomic Solid State Phys.* **341** (2005) 320-330.
- [26] J. M. Fuentes, K. Johannes, F. Kuznik, M. Cosnier and J. Virgone, "Melting with convection and radiation in a participating phase change material," *Appl. Energy* **109** (2013) 454-461.
- [27] J. M. Fuentes, F. Kuznik, K. Johannes and J. Virgone, "Development and validation of a new LBM-MRT hybrid model with enthalpy formulation for melting with natural convection," *Phys. Lett A* **378** (2014) 374-381.
- [28] S. N. Atluri and S. Shen, "The meshless local petrov-galerkin (MLPG) method for domain & BIE discretizations," Tech Science Press (2002).
- [29] L. Zhang, H. F. Shen, Y. Rong and T. Y. Huang, "Numerical simulation on solidification and thermal stress of continuous casting billet in mold based on meshless methods," *Materials Science and Engineering : A* **466** (2007) 71-78.
- [30] G.R. Liu, "Meshfree Methods : Moving beyond the Finite Element Method," CRC Press (2002).

- [31] H. Thakur, K. M. Singh & P. K. Sahoo, “Phase Change Problems Using the MLPG Method,” *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications* **59** (2011) 438-458.
- [32] G. Kosec, B. Šarler, “Simulation of macrosegregation with mesosegregates in binary metallic casts by a meshless method,” *Engineering Analysis with Boundary Elements* **45** (2014) 36-44.
- [33] N. R. Eyres, D.R. Hartree, J. Ingham, R. Jackson, R.J Sarjant and J.B Wagstaff, “The calculation of variable heat flow in solids,” *Philosophical Trans. R. Soc. Lond. Ser. A, Math. Phys. Sci.* **240** (1946) 1-57.
- [34] M.E Rose, “A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary,” *Math. Comput.* **14** (1960) 249-256.
- [35] V.R. Voller and C. Prakash, “A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems,” *Int. J. Heat Mass. Transfer* **30** (1987) 1709-1719.
- [36] A. K. Haagen , E. Franquet, E. Pernot, and D. Brüggemann, “A comprehensive benchmark of fixed-grid methods for the modeling of melting,” *Int. J. Thermal Sciences* **118** (2017) 69-103.
- [37] F. Rösler and D. Brüggemann, “Shell-and-tube type latent heat thermal energy storage : numerical analysis and comparison with experiments,” *Heat Mass Transfer* **47** (2011) 1027-1033.
- [38] V. D. Fachinotti, A. Cardona and A. E. Huespe, “A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction,” *Int. J. Num. Meth. Eng.* **44** (1999) 1863-1884.
- [39] V. Voller and C. Swaminathan, “General source-based method for solidification-phase change,” *Numer. Heat Transf. Part B Fundam* **19** (1991) 175-189.
- [40] P. Lamberg, R. Lehtiniemi and A. M. Henell, “Numerical and experimental investigation of melting and freezing processes in phase change material storage, *Int. J. Thermal Sciences* **43** (2004) 277-287.
- [41] E. Franquet, A. K. Haagen, and D. Brüggemann, “On the modeling impacts of the energy equation in the simulation of melting,” invited talk, Coupled problems conference 2017, VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, Rhodes Island, Greece, 12-14 June 2017.
- [42] A. D. Brent, V. R. Voller and K. J. Reid, “Enthalpy-Porosity Technique for Modeling Convection-Diffusion Phase Change : Application to the Melting of a Pure Metal,” *Numerical Heat Transfer* **13** (1988) 297-318.
- [43] D. K. Gartling, “Finite Element Analysis of Convective Heat Transfer Problems With Change of Phase,” *Computer Methods in Fluids*, K. Morgan, C. Taylor, and C. A. Brebbia, eds., Pentech, London, (1980) 257–284.
- [44] M. H. Avnaim, A. Levy, B. Mikhailovich, O. Ben-David, and A. Azulay, “Comparison of three-dimensional multidomain and single-domain models for the horizontal solidification problem,” *J. Heat Transfer* **138** (2016) 112301.

- [45] R. R. Kasibhatla, A. König-Haagen and F. Rösler, “Numerical modelling of melting and settling of an encapsulated PCM using variable viscosity,” *Heat Mass Transfer* **53** (2017) 1735-1744.
- [46] K. Morgan, “A Numerical Analysis of Freezing and Melting With Convection,” *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **28** (1981) 275–284.
- [47] Ting melting front, *Comsol Heat Transfer Module User’s Guide*, 4.3 edition (2015) 218-256.
- [48] F. Wolf and R. Viskanta, “Solidification of a pure metal at a vertical wall in the presence of liquid superheat,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **31** (1988) 1735-1744.
- [49] V. Tavernier, S. Millet, D. Henry, V. Botton, G. Boutet, and J.-P. Garandet, “An efficient 1D numerical model adapted to the study of transient convecto-diffusive heat and mass transfer in directional solidification,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **110** (2017) 209–218.
- [50] W. Kurz and D.J. Fisher, “Fundamentals of solidification,” *Trans Tech Publications Ltd, Zurich, CH* 1998.
- [51] H.D. Brody and M.C. Flemings, “Solute Redistribution in Dendritic Solidification,” *Trans. Metall. Soc. AIME* **236** (1966) 615.
- [52] Salem Mosbah, “Multiple scales modeling of solidification grain structures and segregation in metal alloys,” *Thèse de doctorat Sciences et Génie des Matériaux, École Nationale Supérieure des Mines de Paris*, 2008.
- [53] M. Chatelain, V. Botton, M. Albaric, D. Pelletier, B. Cariteau, D. Abdo and M. Borrelli, “Mechanical stirring influence on solute segregation during plane front directional solidification,” *Int. J. Thermal Sciences* **126** (2018) 252-262.
- [54] S. Dumitrica, D. Vizman, J.P. Garandet, and A. Popescu, “Numerical studies on a type of mechanical stirring in directional solidification method of multicrystalline silicon for photovoltaic applications,” *J. Cryst. Growth* **360** (2012) 76-80.
- [55] K. Zaidat, I. Sari, A. Boumaaza, A. Abdelhakem, L. Hachani and Y. Fautrelle, “Experimental investigation of the effect of travelling magnetic field on the CET in Sn-10wt.%Pb alloy,” *IOP Conference Series : Materials Science and Engineering*, **424**, conference 1.
- [56] I. Grants and G. Gerbeth, “Use of a traveling magnetic field in vgf growth : Flow reversal and resulting dopant distribution,” *J. Cryst. Growth* **310** (2008) 3699-3705.
- [57] W. Dridi, D. Henry and H. Ben Hadid, “Influence of acoustic streaming on the stability of melt flows in horizontal Bridgman configurations,” *J. Cryst. Growth* **310** (2008) 1546-1551.
- [58] B. Moudjed, V. Botton, D. Henry, H. Ben Hadid and J-P. Garandet, “Scaling and dimensional analysis of acoustic streaming jets,” *Physics of Fluids* **26** (2014) 093602.
- [59] P. Prescott and F. Incropera, “Convection heat and mass transfer in alloy solidification,” *Advances in Heat Transfer* **28**(1996) 231-337.
- [60] J. R. Sarazin, A. Hellawell, “Channel formation in Pb-Sn, Pb-Sb and Pd-Sn-Pb alloy ingots and comparison with the system,” *Metallurgical Transactions* **19** (1988) 1861-1871.

- [61] Z. X. Shi, J. X. Dong, M. Zhang and L. Zheng, “Solidification characteristics and hot tearing susceptibility of Ni-based superalloys for turbocharger turbine wheel,” *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* **24** (2014) 2737-2751.
- [62] T. W. Clyne and W. Kurz, “Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion,” *Metallurgical Trans. A* **12** (1981) 965–971.
- [63] H. Combeau, J. -M. Drezet and A. M. Rappaz, “Modeling of microsegregation in macrosegregation computations,” *Metall. Mat. Trans. A* **27** (1996) 2314-2327.
- [64] S. Kobayashi. “Solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase : theoretical analysis,” *J. Cryst. Growth* **88** (1988) 87-96.
- [65] V.R. Voller, “A semi-analytical model of microsegregation in a binary alloy,” *J. Cryst. Growth* **197** (1999) 325-332.
- [66] X. Dore, H. Combeau and M. Rappaz, “Modelling of microsegregation in ternary alloys : Application to the solidification of Al–Mg–Si,” *Acta Materialia* **48** (2000) 3951–3962.
- [67] T. Kraft, M. Rettenmayr and H. E. Exner, “An extended numerical procedure for predicting microstructure and microsegregation of multicomponent alloys,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **4** (1996) 161–177.
- [68] M. Ode, J. S. Lee, S. G. Kim, W. T. Kim and T. Suzuki, “Phase-field Model for Solidification of Ternary Alloys,” *ISIJ International* **40** (2000) 870–876.
- [69] S. Ganesan, and D. R. Poirier, “Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification,” *Metall. Trans. B* **21** (1990) 349-361.
- [70] S. D. Felicelli, J. C. Heinrich and D. R. Poirier, “Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys,” *Met. Mat. Trans. B*, **22** (1991) 847–859.
- [71] N. Ahmad, J. Rappaz, J. -l. Desbiolles, T. Jalanti, M. Rappaz, H. Combeau, G. Lesoult, and C. Stomp, “Numerical simulation of macrosegregation : a comparison between finite volume method and finite element method predictions and a confrontation with experiments,” *Met. Mat. Trans. A* **29** (1998) 617-630,
- [72] D.J. Hebditch and J.D. Hunt, “Observations of Ingot Macrosegregation on Model-Systems,” *Met. Mat. Trans. B* **5** (1974) 1557-1564.
- [73] Site du projet ANR SMACS : <https://www.ijl.nancy-universite.fr/benchmark-solidification>
- [74] H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dus-soubs, Y. Du Terrail, A. Kumar, Ch.-A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, T. Quatra-vaux, M. Rady and M. Založnik, “Analysis of a numerical benchmark for columnar solidification of binary alloys,” In : *IOP Conference Series : Mat. Sci. Engineering*. IOP Publishing (2012).
- [75] R. Boussaa, L. Hachani, B. Saadi, X. D. Wang, O. Budenkova, K. Zaidat, H. Ben Hadid, and Y. Fautrelle, “2D and 3D numerical modeling of solidification benchmark of Sn-3 wt%Pb alloy under natural convection,” in *CFD Modeling and Simulation in Materials Processing*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA (2012) pp. 163-170.

- [76] R. Boussaa, L. Hachani, O. Budenkova, V. Botton, D. Henry, K. Zaidat, H. Ben Hadid, and Y. Fautrelle, "Macroseggregations in Sn-3 wt%Pb alloy solidification : Experimental and 3D numerical simulation investigations," *Int. J. Heat Mass Transfer* **100** (2016) 680-690.
- [77] J. Ni and C. Beckermann, "Modeling of Globulitic Alloy Solidification with Convection," *J. Materials Processing and Manufacturing Science* **2** (1993) 217-231.
- [78] T. Carozzani, C.-A. Gandin, H. Dignonnet, M. Bellet, K. Zaidat, and Y. Fautrelle, "Direct simulation of a solidification benchmark experiment," *Met. Mat. Trans. A* **44** (2013) 873-887.
- [79] C. -A. Gandin, "Modeling of solidification : Grain structures and segregations in metallic alloys," *Comptes Rendus Physique* **11** (2010) 216-225.
- [80] C. Gau and R. Viskanta, "Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall," *J. Heat Transfer* **108** (1986) 174-181.
- [81] D.R. Liu, N. Mangelinck-Noël, C. -A. Gandin, G. Zimmermann, L. Sturz, H. Nguyen Thi and B. Billia, "Structures in directionally solidified Al-7wt.% Si alloys : Benchmark experiments under microgravity," *Acta Materialia* **64** (2014) 253-265.
- [82] D. A. Musaeva, E. Baake and V. K.Ilin, "Experimental Investigation of Al-Alloy Directional Solidification in Pulsed Electromagnetic Field," *Mat. Sci. Forum* **870** (2016) 471-476.
- [83] P.A. Nikrityuk, K. Eckert and R. Grundmann, "A numerical study of unidirectional solidification of a binary metal alloy under influence of a rotating magnetic field," *Int. J. Heat Mass Transfer* **49** (2006) 1501-1515.
- [84] X. Li, Y. Fautrelle and Z. Ren, "Influence of thermoelectric effects on the solid-liquid interface shape and cellular morphology in the mushy zone during the directional solidification of Al-Cu alloys under a magnetic field," *Acta Materialia* **55** (2007) 3803-3813.
- [85] D.J. Hebditch, *Segregation in Castings*, Ph.D. Thesis, Département de Métallurgie, Université d'Oxford, (1973).
- [86] G. Quillet, "Influence de la convection, naturelle ou forcée sur l'apparition des mésoségrégations lors de la solidification des alliages métalliques," Thèse de doctorat Physique Énergétique, Grenoble INPG, (2003).
- [87] G. Quillet, A. Ciobanas, P. Lehmann and Y. Fautrelle, "A benchmark solidification experiment on an Sn-10%wtBi alloy," *Int.J. Heat Mass Transfer* **50** (2007) 654-666.
- [88] L. Hachani, "Étude de l'influence de la convection naturelle et forcée sur le processus de la solidification : cas d'un alliage métallique binaire," Thèse de doctorat Matériaux, mécanique, génie civil, électrochimie, Université de Grenoble, (2013).
- [89] R. Boussaa, "Étude de l'influence de la convection naturelle et lors de la solidification de métaux purs et d'alliages métalliques binaires : expériences et simulations," Thèse de doctorat Mécaniques des Fluides, Université de Lyon1, (2014).
- [90] C. -A. Gandin, T. Carozzani, H. Dignonnet, S. Chen, and G. Guillemot, "Direct modeling of structures and segregations up to industrial casting scales," *The Journal of the Minerals, Metals & Materials Society* **65** (2013) 1122-1130.

- [91] X. Wang, P. Petitpas, C. Garnier, J.-P. Paulin, and Y. Fautrelle, “A quasi two-dimensional benchmark experiment for the solidification of a tin-lead binary alloy,” *C. R. Mecanique* **335** (2007) 336-341.
- [92] X. Wang and Y. Fautrelle, “An investigation of the influence of natural convection on tin solidification using a quasi two-dimensional experimental benchmark,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **52** (2009) 5624-5633.
- [93] X. Wang, R. Moreau, J. Etay and Y. Fautrelle, “A periodically reversed flow driven by a modulated traveling magnetic field : Paert I : Experiment with Ga-In-Sn,” *Met. Mat. Trans. B* **48** (2009) 82-90.
- [94] X. Wang, R. Moreau, J. Etay and Y. Fautrelle, “A periodically reversed flow driven by a modulated traveling magnetic field : Paert I : Theoretical model,” *Met. Mat. Trans. B* **48** (2009) 104-113.
- [95] S. Wang, A. Faghri and T. L. Bergman, “A comprehensive numerical model for melting with natural convection,” *Int. J. Heat and Mass Transfer* **53** (2010) 1986-2000.
- [96] S. Wang, A. Faghri and T. L. Bergman, “Numerical Modeling of Alternate Melting and Solidification,” *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals* **58** (2010) 393-418.
- [97] M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah and M. Zaloznik, “Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys,” *Int. J. Thermal sciences* **48** (2009) 2013–2016.
- [98] S. Ganina, V. Ginkin, O. Budenkova, B. Saadi, L. Hachani and Y. Fautrelle, “Comparison of Two Models for Simulation of Binary Alloy Solidification,” *Defect and Diffusion Forum V* **328** (2012) 599-604.
- [99] L. Hachani, B. Saadi, X. Wang, A. Nouri, K. Zaidat, A. Belgacem-Bouzida, L. Ayouni-Derouiche, G. Raimondi, and Y. Fautrelle, “Experimental analysis of the solidification of Sn-3 wt%Pb alloy under natural convection,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **55** (2012) 1986-1996.
- [100] L. Hachani, K. Zaidat, B. Saadi, X. Wang and Y. Fautrelle, “Solidification of Sn-Pb alloys : Experiments on the influence of the initial concentration,” *Int. J. Thermal Sciences* **91** (2015) 34-48.
- [101] L. Hachani, K. Zaidat and Y. Fautrelle, “Experimental study of the solidification of Sn–10 wt.%Pb alloy under different forced convection in benchmark experimen,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **85** (2015) 438-454.
- [102] L. Hachani, K. Zaidat, and Y. Fautrelle, “Multiscale statistical analysis of the tin-lead alloy solidification process,” *Int. J. Thermal Sciences* **110** (2016) 186-205.
- [103] V. Botton, R. Boussaa, R. Debacque, L. Hachani, K. Zaidat, H. Ben Hadid, Y. Fautrelle, and D. Henry, “A  $2D^{1/2}$  model for low Prandtl number convection in an enclosure,” *Int. J. Thermal Sciences* **71** (2013) 53-60.
- [104] Y. Zheng, M. Wu, E. Karimi-Sibaki, A. Kharicha, and A. Ludwig, “Use of a mixed columnar-equiaxed solidification model to analyse the formation of as-cast structure

- and macrosegregation in a Sn-10 wt%Pb benchmark experiment,” *Int. J. Heat Mass Transfer* **122** (2018) 939-953.
- [105] M. T. Rad and C. Beckerman, “Validation of a model for the columnar to equiaxed transition with melt convection,” in *CFD Modeling and Simulation in Materials Processing*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA (2016) pp. 85-92.
- [106] Y. Zheng, M. Wu, A. Kharicha, and A. Ludwig, “Role of fragmentation in as-cast structure : numerical study and experimental validation,” *Modeling of Casting and Solidification Processes China Foundry* **14** (2017) 321-326.
- [107] M. H. Avnaim, B. Mikhailovich, A. Azulay, and A. Levy, “Numerical and experimental study of the traveling magnetic field effect on the horizontal solidification in a rectangular cavity. Part 2 : Acting forces ratio and solidification parameters,” *Int. J. Heat Fluid Flow* **69** (2018) 9-22.
- [108] M. J. Assael, A. E. Kalyva, K. D. Antoniadis, R. M. Banish, I. Egry, J. Wu, E. Karschnitz, and W. A. Wakeham, “Reference data for the density and viscosity of liquid copper and liquid tin,” *J. Phys. Chem. Reference Data* **39** (2010) 033105.
- [109] A. Bejan, “Convection Heat Transfer,” Wiley & Sons (Ed.), 3<sup>rd</sup> edition, 2004.
- [110] N. R. Gewecke and T. P. Schulze, “The rapid advance and slow retreat of a mushy zone,” *J. Fluid Mech.* **674** (2011), 227–243
- [111] M. G Worster, “Solidification of an alloy from a cooled boundary,” *J. Fluid Mech.* **167** (1986) 481–501.
- [112] M. G. Worster, “Natural convection in a mushy layer,” *J. Fluid Mech.* **224** (1991) 335–359.
- [113] G. Salloum-Abou-Jaoude, G. Reinhart, H. Combeau, M. Založnik, T.A. Lafford and H. Nguyen-Thi, “Quantitative analysis by in situ synchrotron X-ray radiography of the evolution of the mushy zone in a fixed temperature gradient,” *J. Cryst. Growth* **411** (2015) 88-95.
- [114] A. Kumar, M. Založnik and H. Combeau, “Study of the influence of mushy zone permeability laws on macro-and meso-segregations predictions,” *Int. J. Thermal Sciences* **54** (2012) 33-47.