

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

UNIVERSITE MENTOURI- CONSTANTINE

FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT DE GENIE MECANIQUE

N° d'ordre :/Doc/2010

Série : /GM/2010

THÈSE

Présentée pour obtenir le diplôme de Docteur en Sciences en Génie Mécanique

OPTION : Énergétique

<p>Modélisation de la convection au cours des changements de phase liquide-solide : effet d'un champ magnétique</p>
--

Par

M. MECHIGHEL Farid

Soutenue le :... / /2010

Devant le Jury composé de :

Président :

BESSAIH Rachid, Professeur, Université de Constantine

Rapporteurs :

KADJA Mahfoud, Professeur, Université de Constantine

PATEYRON Bernard, Maître de conférences (HDR), Université de Limoges

Examineurs :

BENNACER Rachid, Professeur, Université de Cergy-Pontoise, France

LACHI Mohammed, Professeur, Université de Reims, France

SIAMEUR Mohammed, Professeur, Université de Batna

Membre invité :

EL GANAOUI Mohammed, Maître de conférences (HDR), Université de Nancy

Avertissement

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur au même titre que sa version papier. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite entraîne une poursuite pénale.

Contact: farid.mechighel@etu.unilim.fr

Remerciements :

Cette thèse n'aurait pas vu le jour sans la générosité et la patience de Monsieur le Professeur Mahfoud KADJA, que je veux vivement remercier et lui exprimer ma profonde reconnaissance de m'avoir encouragé et soutenu durant la période de la thèse.

Je tiens vivement remercier et exprimer ma profonde reconnaissance au professeur Mohammed EL GANAOUI et Monsieur Bernard PATEYRON de m'avoir soutenu et accueillie dans leurs laboratoire au sein du SPCTS et d'avoir suivi ce travail avec rigueur et bienveillance.

Une partie de ce travail de thèse a été réalisé au sein de l'axe 2 du laboratoire « Sciences des Procédés Céramiques et Traitement de Surfaces » UMR 6638 et j'ai été profondément frappé par l'incendie du bâtiment « Réacteur Plasma » ce laboratoire en juin 2009 où une partie de ma documentation reste sous les suies. Que Monsieur Bernard PATEYRON et ses collaborateurs reçoivent ici l'expression de ma sympathie.

Mes plus sincères remerciements vont aussi à Monsieur le professeur Rachid BENNACER, directeur de recherche au laboratoire Université de Cergy-Pontoise, Paris, qui a accepté l'examen de ce travail, en tant que rapporteur.

Mes plus sincères remerciements vont aussi à Monsieur le professeur Mohammed LACHI, directeur de recherche au laboratoire Université de Reims, qui a accepté l'examen de ce travail, en tant que rapporteur. Je souhaite aussi exprimer ma profonde gratitude aux professeurs Rachid BESSAH et Mohammed SI-AMEUR d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Table des matières

Indices	IX
Exposants	IX
Résumé.....	X
Abstract.....	X
Introduction générale.....	1
Contexte de l'étude et phénomènes de transport au cours du changement de phase.....	1
Motivation et objectifs de la thèse.....	4
Chapitre 1 : Généralités sur les phénomènes de transports au cours du changement de phase liquide-solide.....	5
1.1 Élément de la théorie de solidification.....	5
1.1.1 Solidification et flux de chaleur associé.....	5
1.1.1.1 Extraction de la chaleur et notion de taux de refroidissement.....	6
1.1.1.2 Diverses méthodes de solidification directionnelle.....	8
(a)- <i>Solidification directionnelle de type Bridgman (en croissance cristalline)</i>	8
(b)- <i>Moulage (« casting ») directionnel</i>	9
1.1.1.3 Moulage conventionnel d'un lingot (orientation microscopique locale).....	9
1.1.2 Microstructures de solidification (types de cristaux formés) dans un lingot de moulage.....	10
1.1.3 Principaux types d'alliages et diagramme de phase.....	12
(a) Classification des alliages binaires métalliques.....	12
(b) Conditions de l'équilibre local dans un système binaire.....	13
(c) Diagramme d'équilibre linéarisé.....	14
1.1.4 Transfert atomique à l'interface solide-liquide.....	16
1.1.4.1 Cinétique de la nucléation du solide.....	16
1.1.4.1.1 Introduction à la nucléation.....	16
1.1.4.1.2 La condition de nucléation (<i>sous-refroidissement</i> de nucléation).....	16
1.1.4.1.3 Les phénomènes de nucléation (cas de métaux purs).....	17
<i>Nucléation homogène</i>	17
1.1.4.2 Cinétique de croissance, structure de l'interface solide-liquide et échanges interfaciaux locaux.....	19
1.1.4.2.1 Effet de la courbure de l'interface (<i>sous-refroidissement de Gibbs-Thomson</i>) :.....	20

b- Instabilité d'interface dans un alliage binaire (<i>sous-refroidissement constitutif</i>)	26
1.2 Définition des différentes échelles du problème et contexte de ce travail	31
1.2.1 Contexte du travail présenté	32
1.2.2 Phénomène de convection à modéliser	35
1.2.2.1 Dans la zone pâteuse (transport local convectif et diffusif de chaleur et soluté)	35
1. La redistribution de soluté (lors d'un changement de phase par diffusion) et notion de micro ségrégation & macro ségrégation	35
Remarque 1.1. Les modèles usuels de calcul de micro ségrégation sont fournis en chapitre 2.	36
2- Phénomènes de grossissement de branches primaires et Refoulement de la fonte à travers la zone pâteuse	37
<i>Phénomène de refoulement de la fonte à travers la zone pâteuse :</i>	38
3-Écoulement fluide à travers la région pâteuse (Calcul de la perméabilité dans la zone pâteuse)	38
1.2.2.2 Dans la zone liquide (écoulement de convection naturelle thermo solutale)	41
1.2.2.2.1 Origine de la convection naturelle due aux gradients macroscopiques imposés au système	41
1.2.2.2.2 Conséquences de la convection thermosolutale (du liquide et zone pâteuse)	42
1.2.2.3 Modèles de l'écoulement de convection en « double diffusion »	43
1. Cas de refroidissement latéral (<i>moulage conventionnel</i>)	44
2. Refroidissement depuis le bas :	44
3. Refroidissement par le haut (<i>convection naturelle de Rayleigh-Bénard</i>)	45
1.2.3 Contrôle de l'écoulement de convection par champ magnétique (<i>Stabilisation de l'écoulement convectif</i>)	47
1.3 Convection dans l'espace tridimensionnelle	48
1.3.1 Effet de la prise en compte de l'espace tridimensionnalité sur un processus de changement de phase	48
1.3.2 Phénomène de bifurcation en convection 3D (sans changement de phase)	49
Chapitre 2 - Éléments de la théorie de ségrégation et état de l'art de modélisation de convection durant un processus à changement phase -Illustration de l'importance d'un champ magnétique	52

2.1 Introduction	52
2.2 Redistribution de soluté lors de solidification.....	52
2.2.1 Solidification en condition d'équilibre.....	52
2.2.2 Solidification en non-équilibre.....	53
2.3 Les phénomènes de micro ségrégation.....	56
Le mode et la structure de solidification.	56
La morphologie des dendrites et chemin de diffusion	56
La transformation de phase solide (en alliages péritectiques).....	57
Le grossissement ou refusion de branches de dendrite	57
Le mouvement de la phase liquide (convection).....	57
La dépendance des coefficients de diffusion de température et concentration	57
Sous-refroidissement.....	58
Autres effets	58
2.4 Les phénomènes de macro ségrégation.....	59
2.4.1 Si le front de solidification est plan et lisse.....	60
2.4.2 Ségrégation due à la gravité	61
2.4.3 L'écoulement liquide inter dendritique induit les ségrégations dans la zone pâteuse. 62	
1. Cas d'absence de l'écoulement de liquide et rétrécissement.	63
S'il est supposé qu'il n'y a pas de rétrécissement ($\beta = 0$) et pas d'écoulement relatif de fluide ($u_n = 0$), l'équation (2.9) est intégrée pour donner l'une ou l'autre d'équations d'équilibre (2.1) ou de Scheil (2.2) en dépendant sur le choix de A	63
2. Cas de présence de l'écoulement de liquide et contraction/rétrécissement. . 63	
3 Cas de pénétration de l'écoulement de masse liquide dans la zone pâteuse. 64	
2.4.4 Distribution inhomogène de solide et ségrégation de type canal.....	65
2.4.5 Le mouvement de la phase solide et la ségrégation.	66
2.4.5. Force externe et ségrégation.....	66
2.5 Les macro ségrégations dues aux convections et leurs modélisations mathématiques.. 67	
2.5.1 Modélisation de l'écoulement de fluide dans la région pâteuse.....	67
Calcul de la viscosité dans la zone pâteuse.	68
Addition de l'effet de la gravité sur l'écoulement de zone pâteuse.	68
Force de guidage de flottabilité et approximation de Boussinesq.	68
L'écoulement fluide induit par la gravité est dû à de variations de masse volumique dans le liquide. Il est distingué deux contributions.	68
2.5.2 Modélisation de l'écoulement de masse liquide dans la région liquide	71

2.6 Défis pour la modélisation de convections et macro ségrégations associées.....	71
2.6.1 La Première idée est de développer de techniques pour surmonter le problème multi-échelle.....	71
2.6.1.1 La technique de la moyenne volumique.....	72
Concept général de la moyenne volumique des 'équations de conservation.	73
2.5.1.2 La méthode de décomposition de domaine	76
2.5.2 Les modèles utilisant la méthode de décomposition et dits <i>multi-domaines</i> dans la littérature :	78
1. Le modèle de Ridder et al.	79
2. Inconvénients des modèles fondés sur la méthode de décomposition	79
2.5.3 La deuxième idée est d'utilisée un même système d'équation pour l'écoulement couplé	80
1. Transfert des équations de conservation microscopiques en macroscopiques par l'utilisation du concept de moyennage volumique.....	80
2. Les modèles moyennés en volume (ou modèles simple-domaines fondés sur la méthode de prise de moyenne volumique)	81
3. Les modèles continus fondés sur la théorie de mélange :	82
4. Comparaison des deux approches	86
2.5.4 Autres progrès dans l'état de l'art de modélisation de convection et ségrégation lors de solidification.....	86
2.7 Études expérimentales de solidification des alliages	87
Les études de comparaisons numériques et expérimentales et conclusions les plus importantes.....	88
2.8 Modélisation de convection lors de croissance cristalline et effet d'un champ magnétique appliqué	89
2.8.1 Équations de transport pour la croissance cristalline d'un monocristal à partir d'un liquide.....	89
2.7.2 Utilité des paramètres adimensionnels.....	92
Autres paramètres adimensionnels importants.	93
2.7.3 Méthodes de réduction de la convection et ségrégation associée	94
2.9 Revues supplémentaires en général.....	99
Chapitre 3 - Modèle mathématique pour la convection de chaleur et de masse dans les systèmes à changement de phase	102
3.1 Introduction	102

3.2 Formulation Mathématique du Modèle.....	103
3.2.1 Hypothèses	103
3.2.2 Développement d'équations continues.....	104
3.2.3 Équation de conservation d'une quantité scalaire générale	106
3.2.4 Équation de conservation de masse.....	106
3.2.5 Équation de conservation de quantité de mouvement.....	107
3.2.8 Équation de conservation d'énergie	112
3.2.9 Équation de conservation de soluté (espèce chimique).....	114
3.3 Relations supplémentaires de fermeture du système d'équations (équilibre local en composition).....	116
3.4 Mise des équations continues en forme adimensionnelle	118
3.4.1 Notations adimensionnelles utilisées	118
3.4.2 Diagramme de phase linéaire adimensionnel.....	121
3.4.3 Détermination de l'état de l'alliage (méthode des enthalpies) :.....	122
3.5 La méthodologie de solution :.....	130
Chapitre 4 - Étude numérique de solidification d'un alliage binaire dans une cavité rectangulaire.....	132
4.1 Introduction	132
4.2. Considérations générales et modèle mathématique	135
4.5.4.1 Situation II : Effet d'un champ magnétique « statique et uniforme » appliqué dans la direction horizontale :.....	177
4.5.5.2 Situation III : Effet d'un champ magnétique « statique et uniforme » appliqué dans la direction verticale :.....	189
4.5.5.3 Comparaison entre un champ magnétique horizontal et vertical	193
4.5.5.4 Discussions de champs magnétiques.....	193
4.6 Résultats numériques de macroségrégation et validation du modèle présenté	200
4.6.1 Le cas test de Hebditch & Hunt, (les alliages Sn-5%Pb et Pb-48%Sn).....	200
Résultats de convection thermosolutale pour les deux alliages	202
4.6.2 Résultats pour l'alliage Sn-5%Pb.....	203
4.6.2.1 Investigations numériques précédentes.....	203
4.6.2.2 Étude de l'influence de la taille de maillage	211
4.6.2.3 Étude de l'influence du pas de temps.....	212
4.6.2.4 Étude de l'influence des itérations de couplage à travers chaque pas de temps	212
4.6.3 Résultats pour l'alliage Pb-48%Sn.....	231

4.6.3.1 Confrontation avec l'expérimental.....	231
4.6.4 Remarques finales	231
4.7 Différences entre les résultats numériques du modèle présenté et expérimentaux	232
4.8 Conclusion du chapitre.....	232
Chapitre 5 - Étude numérique de l'écoulement convectif d'un fluide conducteur dans une cavité 3-D : Effet d'un champ magnétique statique appliqué	234
5.1 Introduction	234
5.2 Motivations.....	235
5.3 Formulation mathématique et résolution numérique du problème	237
5.3.1 Les équations de conservation décrivant l'écoulement avec transfert de chaleur.....	238
5.3.1.1 Équations conservation de masse et quantité de mouvement	238
5.3.1.2 Équation de conservation d'énergie	239
5.3.1.3 Équation de conservation de l'espèce (soluté).....	240
2.1.3 Bilan de charge électrique et force magnétique de volume	241
5.3.2 Les formes adimensionnelles des équations de conservation décrivant l'écoulement	242
2.3 Résolution numérique	244
2.3.1 La méthode en éléments finis GLS (Galerkin/Least-Square) Stabilisée pour l'écoulement incompressible instationnaire.....	244
2.3.2 Formulation stabilisé (SUPG) ligne de courant amont (Upwind) Petrov-Galerkin pour l'équation d'advection – diffusion	245
2.3.3 Formulation FEM standard de Galerkin pour l'équation de charge électrique	245
5.4. Résultats et discussions	245
5.4.1 La validation de modèle	246
5.4.2 Description de régimes d'écoulement convectif dirigé par la force de flottabilité thermique sans la présence d'un champ magnétique	247
Écoulement symétrique permanent (stable).	247
Conclusions et perspectives.	268
Références	

Nomenclature latine

$A = L/H$	rapport d'aspect
$c \equiv c_p$	chaleur spécifique
D	coefficient de diffusion de masse
$Da = K_0/L^2$	nombre de Darcy
$f \equiv f_m^{espèce}$	fraction de masse
f^*	fraction de masse adimensionnelle
\bar{f}	fraction de masse totale
$Fo_s = \alpha_s t/L^2$	nombre de Fourier
g	fraction de volume ou accélération de la pesanteur
h	enthalpie
$h^* = (h - h_{sol})/(h_{liq} - h_{sol})$	enthalpie adimensionnelle
h_f	enthalpie de fusion
H	hauteur de cavité
k	conductivité thermique
$k^* = k_s/k_l$	rapport de conductivité thermique
K	perméabilité
K_0	coefficient de perméabilité
L	espacement de paroi de côté de cavité
$Le = \alpha_l/D_l^\alpha$	nombre de Lewis
m	pende
p	pression
$Pr = \nu_l/\alpha_l$	nombre de Prandtl
q	flux de chaleur local
$\bar{q} = \int_0^H q dy/H$	flux de chaleur moyen
$q^* = qL/k_l(T_0 - T_e)$	flux de chaleur adimensionnel local
$\bar{q}^* = \bar{q}L/k_l(T_0 - T_e)$	flux de chaleur adimensionnel moyen
$Ra_s = g\beta_s(f_{l,e}^\alpha - f_{l,0}^\alpha)L^3/\nu_l\alpha_l$	nombre de Rayleigh solutal

$Ra_T = g\beta_T(T_0 - T_e)L^3 / \nu_l\alpha_l$	nombre de Rayleigh thermique
$Ste_l = c_l(T_0 - T_e)/h_f$	nombre de Stefan dans la phase liquide
$Ste_s = c_s(T_0 - T_e)/h_f$	nombre de Stefan dans la phase solide
t	temps
τ	temps adimensionnel
T	température
T^*	température adimensionnelle
T_f	température de fusion pour $f_l^\alpha = 0$
u, v	composantes de la vitesse dans les directions x et y
$u^* = uL/\alpha_l, v^* = vL/\alpha_l$	composantes adimensionnelles de la vitesse
\mathbf{V}	vecteur vitesse
x, y	coordonnées Cartésiennes
$x^* = x/L, y^* = y/H$	coordonnées adimensionnelles

Nomenclature grecque

$\alpha = k/\rho c$	diffusivité thermique
β_s	coefficient de dilatation solutal
β_T	coefficient de dilatation thermique
Γ	coefficient général de diffusion
$\kappa_p = m_{liq}/m_{sol}$	rapport de partage d'équilibre
$C_\alpha^l = (f_l^\alpha - f_{l,e}^\alpha)/(f_{l,0}^\alpha - f_{l,e}^\alpha)$	composition liquide adimensionnelle
$\Theta = (T - T_E)/(T_0 - T_E)$	température adimensionnelle
μ	viscosité dynamique
$\nu = \mu/\rho$	viscosité cinématique
ρ	masse volumique
ϕ	variable dépendante générale
ψ	fonction de courant

Indices

c	paroi froide
e	eutectique
h	paroi chaude
k	phase k
l	liquide
liq	liquidus
f	évalué à T_f
s	solide
sol	solidus
0	initial

Exposants

α	Constituant (soluté)
----------	----------------------

Résumé

Les principaux phénomènes physiques de transport par convection à la base de la formation des macroségrégations lors d'un processus à changement de phase liquide solide (notamment au cours de la solidification des alliages métalliques) sont présentés. A l'échelle microscopique, il s'agit de la micro ségrégation résultant du rejet de solutés dans la phase liquide et de la diffusion dans la phase solide. À l'échelle macroscopique, les espèces chimiques ainsi rejetées sont transportées dans la pièce sous l'effet des mouvements de convection dans la phase liquide. Ces mouvements de convection sont causés par les gradients de masse volumique, eux-mêmes générés par les gradients de température et de concentration en solutés. C'est cette convection thermo-solutale qui donne naissance aux macroségrégations, hétérogénéités de concentration à l'échelle de la pièce ou du lingot de fonderie, qui vont affecter diverses propriétés (mécaniques, chimiques...) en service ou lors de transformations ultérieures. D'autre part, l'effet de stabilisation par champ magnétique est examiné. Les phénomènes d'instabilités causés par les transports convectifs sont illustrés et décrits numériquement dans le travail présenté.

Abstract

The essential feature in the solidification of a metallic alloy is the liquid-solid phase change associated with the release of latent heat and the solute redistribution. The solutes are often redistributed non-uniformly in the fully solidified casting, giving birth to what is usually called segregation. Segregation occurring on a microscopic scale (i.e., between and within dendritic arms) is known as micro segregation. While segregation occurring on a macroscopic scale (i.e., in a range from several millimeters to centimeters or even meters) is called macro segregation. Micro segregation can be controlled or reduced by a high temperature treatment (homogenization). However, macro segregation occurring on the macroscopic dimensions of the casting cannot be eliminated by homogenization. Magnetic field effects are examined in order to stabilizing the flow field. The work presented here illustrates this objective. The symmetry breaking instability is a phenomenon well known associated with convection. The present work illustrates this phenomenon and describes it numerically.

ملخص

يندرج هذا العمل في إطار التمثيل الرقمي للظواهر الفيزيائية للانتقال الحراري و المواد المذابة أثناء عملية التغيير المرحلي من حالة سائلة إلى حالة صلبة، وخاصة خلال التصلب في السبائك المعدنية. كذلك يتطرق هذا العمل إلى عملية التثبيت بتطبيق حقل كهرومغناطيسي حيث قد وجدنا أن هذا الأخير له دور كبير في عملية تخميد الحركة للتيارات الحرارية للمعدن المنصهر. أثناء معالجة لاحقة من ناحية أخرى، يتم فحص تأثير الاستقرار عن طريق المجال المغناطيس، موضحة ظاهرة عدم الاستقرار الناجم عن النقل الحراري في العمل المقدم.

Introduction générale

Contexte de l'étude et phénomènes de transport au cours du changement de phase

Les phénomènes de transport de chaleur ou de masse lors d'un processus de changement de phase, interviennent dans beaucoup de domaines physiques: naturels ou industriels. Ainsi l'évaporation ou la condensation de l'eau à la surface des océans, la fonte ou la formation des glaces, la solidification des laves volcaniques en sont des exemples. Dans le domaine industriel, outre le moulage (*casting*) des métaux (substances pures), alliages et aciers [Kurtz & Fisher, 1984 ; Campbell, 2003 ; ASM Volume 15, 1992], ou de fabrication des verres, ces échanges interviennent aussi dans la cristallisation des monocristaux « croissance cristalline de semi-conducteurs », ainsi que dans les procédés de soudure, ou de projection thermique (processus de solidification rapide) [Kurtz & Fisher, 1984]. En effet, il faut noter qu'un processus de croissance de monocristal [Yu & Cardona, 1996] est un processus de *solidification directionnelle* [Kurtz & Fisher, 1984]. Le cristal, solidifié (cristallisé) à partir d'une fonte liquide « (*melt*) », confinée dans un four est soumis à différentes conditions de température [Dost & Lent, 2007]. Les techniques principales utilisées en croissance des monocristaux sont : la technique de Bridgman, celle de Czochralski, de la zone flottante (*Foat Zone*) ; (*Liquid Phase Epitaxy*) ; LPD (*Liquid Phase Diffusion*) ; *Travelling Heater* [Yu & Cardona, 1996 ; Dost & Lent, 2007 ; Deal, 2004] etc.

La Figure 1 présente un aperçu des phénomènes de transformation de phase liquide-solide, impliquant les transports de chaleur et masse.

En science et technologie de solidification (moulage) des alliages, l'évolution de la *ségrégation* et des distributions de phase (*fraction de phase*) et d'espèces chimiques (*solutés*) représentent des enjeux fondamentaux [Beckermann & Viskanta, 1993 ; Beckermann & Wang, 1995]. La structure détermine les propriétés mécaniques [Asta et al, 2009] des produits de moulage et les *inhomogénéités chimiques* peuvent créer des défauts sérieux dans les produits solidifiés (pièces ou lingots moulés), tels que : la formations des régions de non-uniformités en composition « *macro ségrégation* » ; des fissurations dues aux contraintes thermiques excessives et à la formation des vides, ou pores, etc. Généralement, ces défauts

sont souvent liés au contrôle incorrect des mécanismes de transport [Beckermann & Viskanta, 1993], par exemple : les inhomogénéités de l'espèce chimique, conduisent à la *macro ségrégation*, et sont des résultantes directes du transport non contrôlé de ces espèces.

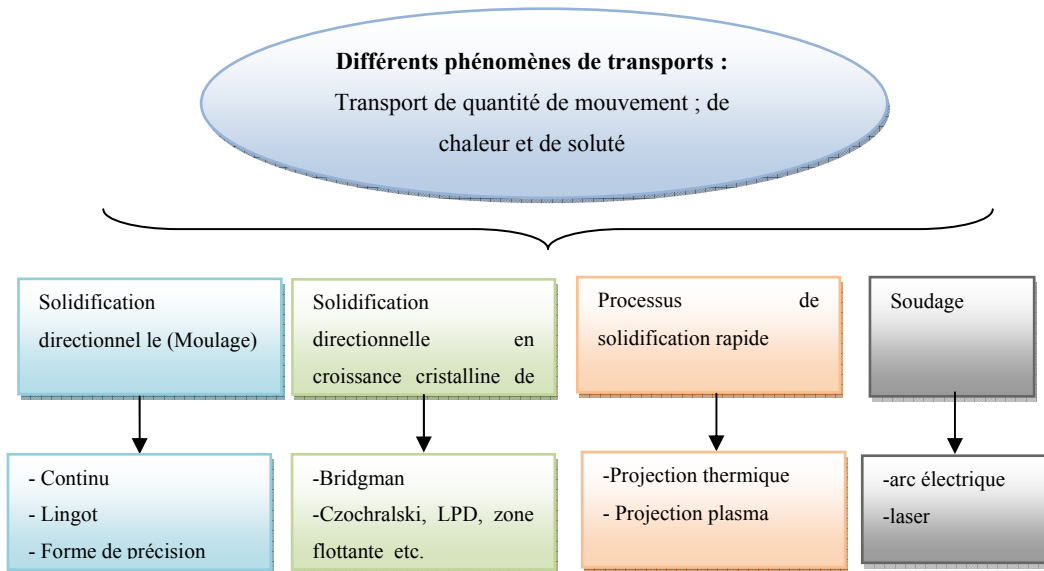


Figure 1 -Quelques processus à transformation de phase qui impliquent les phénomènes de transport.

Ainsi, la compréhension et le contrôle des phénomènes physiques, qui interviennent durant une transformation de phase liquide-solide, sont primordiaux [Kurtz & Fisher, 1984]. Une meilleure modélisation et compréhension de ces phénomènes et de leurs interactions est, en effet, nécessaire. Elles représentent, un enjeu considérable pour l'optimisation des procédés de fabrication, afin d'améliorer encore davantage la qualité des alliages [Beckermann & Wang, 1995 ; Rappaz, 1989]. La Figure 2 présente les quelques principaux défauts « *macro ségrégation* » rencontrés dans un lingot de moulage.

Par ailleurs, l'obtention des monocristaux de semi-conducteurs homogènes, à faibles défauts, est d'un intérêt primordial dans l'industrie électronique où les semi-conducteurs sont employés dans de multitude d'appareils électroniques tels que des circuits logiques, des puces de mémoire, des circuits optoélectroniques, des lasers, des détecteurs etc. [Kurtz & Fisher, 1984]. Les performances de ces appareils sont fortement influencées par les défauts induits pendant le processus de croissance (solidification) provoqués par l'incorporation des contaminants [Anile et al. 2003]. En outre, les avances vers la miniaturisation des circuits intégrés sont entravées par l'incorporation non-uniforme des dopants (solutés) [Kurtz & Fisher, 1984 ; Deal, 2004]. Cette non-uniformité de composition (*macro ségrégation*) est régie par les mécanismes de transport lors du processus de croissance.

Par conséquent, il est important d'étudier les divers aspects des phénomènes de transport qui commandent le comportement de changement de phase. Cette thèse se propose de contribuer à la description des phénomènes macroscopiques de transfert de chaleur et de masse (soluté) lors d'un processus de changement de phase. En particulier, elle est focalisée sur la modélisation macroscopique de solidification des alliages binaires.

Dans le premier chapitre l'accent est mis sur les aspects physiques de la solidification adaptés aux contextes de cette étude, à savoir, la solidification d'un alliage binaire (mélange). L'attention est focalisée sur une présentation des éléments de la théorie de solidification des *matériaux métalliques*. Dans ces matériaux la solidification est généralement accompagnée par la formation de cristaux ; ce qui, par définition, ne se produit pas au cours de solidification des verres ou polymères.

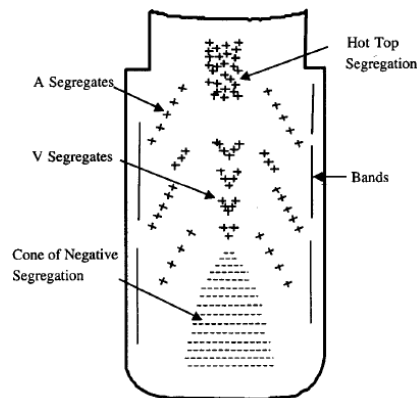


Figure 2 -Représentation schématique de modèles de macro ségrégation typiques, (créés par la convection), observés dans un lingot en acier (où les défauts A-ségrégation et V-ségrégation sont présentés) [Flemings, 1974]

Toutefois, la possibilité de stabilisation des écoulements convectifs, les principaux responsables des distributions des inhomogénéités compositionnelles (conduisant à la *macro ségrégation*), est aussi abordée. Cette stabilisation est souvent faite par l'application d'un champ magnétique (l'effet stabilisant d'un champ magnétique est reconnu comme par exemple : dans le domaine de solidification des alliages binaires [Prescott & Incropera, 1993 ; Yang & Zabarar, 1998 ; Sampath & Zabarar, 2001 ; Ganapathysubramanian & Zabarar, 2005] et en croissance cristalline de monocristaux [Alboussière et al. 1997 ; Yilzid et al. 2006]. En outre la capacité des champs magnétiques à supprimer les écoulements convectifs turbulents avec ou sans changement de phase (phénomène des instabilités des écoulements

convectifs (bifurcations) est prouvée. La deuxième partie, du chapitre 2, est consacrée à illustrer l'effet d'un champ magnétique.

Motivation et objectifs de la thèse

La thèse présentée est organisée de la manière suivante, pour bien cerner les phénomènes discutés dans le **chapitre 1**.

Le chapitre 2 illustre les principaux modèles mathématiques de la littérature pour la représentation de la solidification d'alliages binaire, et présente un état de l'art des modèles et d'expérimentations de solidification d'alliages binaires.

Le chapitre 3 développe l'approche continue, adoptée ici, pour le modèle numérique des phénomènes de transport pendant la solidification d'alliage binaire. Des développements sont apportés à cette approche et l'algorithme de résolution numérique est présenté.

Le chapitre 4 illustre l'application et le modèle de convection doublement diffusive pendant la solidification dans une cavité latéralement-refroidie, d'un alliage binaire conducteur électrique. Ce **chapitre** examine, également, l'effet du champ magnétique (statique et uniforme) sur l'écoulement convectif.

Le chapitre 5 illustre l'effet de champ magnétique (intensité et direction) sur la convection en 3D.

Une conclusion générale résume cette étude et ouvre des perspectives.

Chapitre 1 : Généralités sur les phénomènes de transports au cours du changement de phase liquide-solide

1.1 Élément de la théorie de solidification

1.1.1 Solidification et flux de chaleur associé

La diminution de l'énergie libre dite de Gibbs régit la transformation d'un système qui passe d'un état liquide à un état solide et inversement. Les changements de l'énergie libre sont, principalement, dus à *l'extraction de la chaleur* provenant de la phase liquide (c'est-à-dire le *refroidissement du système*) et à la *transformation* d'une phase liquide à une phase solide (c'est-à-dire la *chaleur latente* de fusion libérée) [Kurtz & Fisher, 1984]. Les différents processus de solidification cités précédemment sont, de fait, des processus de transformation de phase liquide-solide, le principe d'extraction de chaleur est, ainsi, applicable pour tous ces processus.

L'extraction de la chaleur du liquide, d'une manière plus ou moins contrôlée, fait changer l'énergie des phases (solide et liquide) de deux manières :

1- diminution de l'enthalpie (molaire, en J/mole) du liquide ou solide, due au *refroidissement*, qui est donnée par $\Delta H = \int cdT$.

2- diminution de l'enthalpie, due à la transformation du liquide au solide, qui est égale à la *chaleur latente* de fusion (molaire, en J/mole) ΔH_f ; qui est négative pour une transformation liquide-solide.

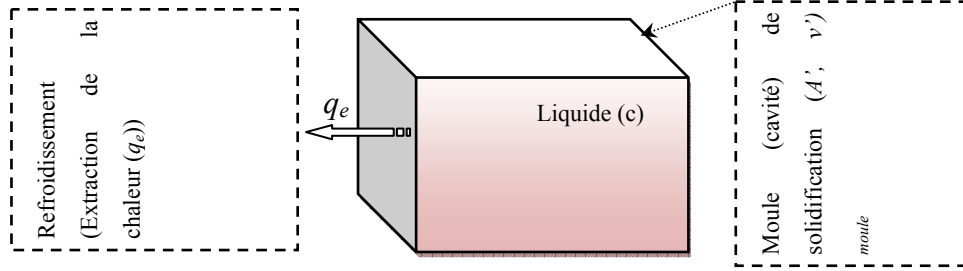


Figure 1.1 -Principe d'extraction de la chaleur d'un liquide contenu dans un creuset (cavité).

1.1.1.1 Extraction de la chaleur et notion de taux de refroidissement

L'extraction de la chaleur est obtenue par l'application d'un moyen convenable de *refroidissement* du liquide afin de créer un *flux de chaleur externe* (q_e) [Kurtz & Fisher, 1984] (Fig. 1.1). Si le matériau est isotherme (cas d'application de faible *taux de refroidissement*) et les chaleurs spécifiques du liquide et solide sont les mêmes et égales à (c). Le *taux de refroidissement* résultant « dT/dt », peut être déduit à partir d'un bilan thermique simple (Fig.1.1) :

$$q_e \left(\frac{A'_{moule}}{v'_{moule}} \right) = -c \left(\frac{dT}{dt} \right) - \Delta h_f \left(\frac{df_s}{dt} \right) \quad \text{d'où} \quad \frac{dT}{dt} = \dot{T} = -q_e \left(\frac{A'_{moule}}{v'_{moule}} \right) - \left(\frac{df_s}{dt} \right) \left(\frac{\Delta h_f}{c} \right) \quad (1.1)$$

où $\Delta h_f = \Delta H_f / v_{molaire}$ est la chaleur latente de fusion volumique (J/m^3), (A'_{moule} / v'_{moule} rapport de l'aire de surface du moule à son volume) et t est le temps (en seconde).

Le premier terme de l'équation (1.1) reflète l'effet de la géométrie du moule sur l'extraction de chaleur sensible (volumique), en revanche, le second terme tiens compte de l'évolution continue de la chaleur latente volumique de fusion durant la solidification. Pour un alliage, où la solidification se produit sur un *intervalle de températures*, la variation de la *fraction solide* (f_s) en fonction du temps doit être calculée à partir de « $\frac{df_s}{dt} = \left(\frac{dT}{dt} \frac{df_s}{dT} \right)$ » puisque que (f_s) est une fonction de température et dans le cas d'un alliage :

$$\dot{T} = \frac{dT}{dt} = -q_e \left(\frac{A'_{moule}}{c v'_{moule}} \right) / \left[1 + \left(\frac{\Delta h_f}{c} \right) \left(\frac{df_s}{dT} \right) \right] \quad (1.2)$$

L'équation (1.2) montre que la solidification fait diminuer le *taux de refroidissement* puisque (df_s/dT) et (Δh_f) sont négatives.

Par conséquent, sans extraction de chaleur il y en pas de solidification. Pour qu'une solidification se produise le liquide doit être refroidi à la température de solidification et alors la *chaleur latente* de solidification libérée apparaisse à l'*interface* croissante solide-liquide.

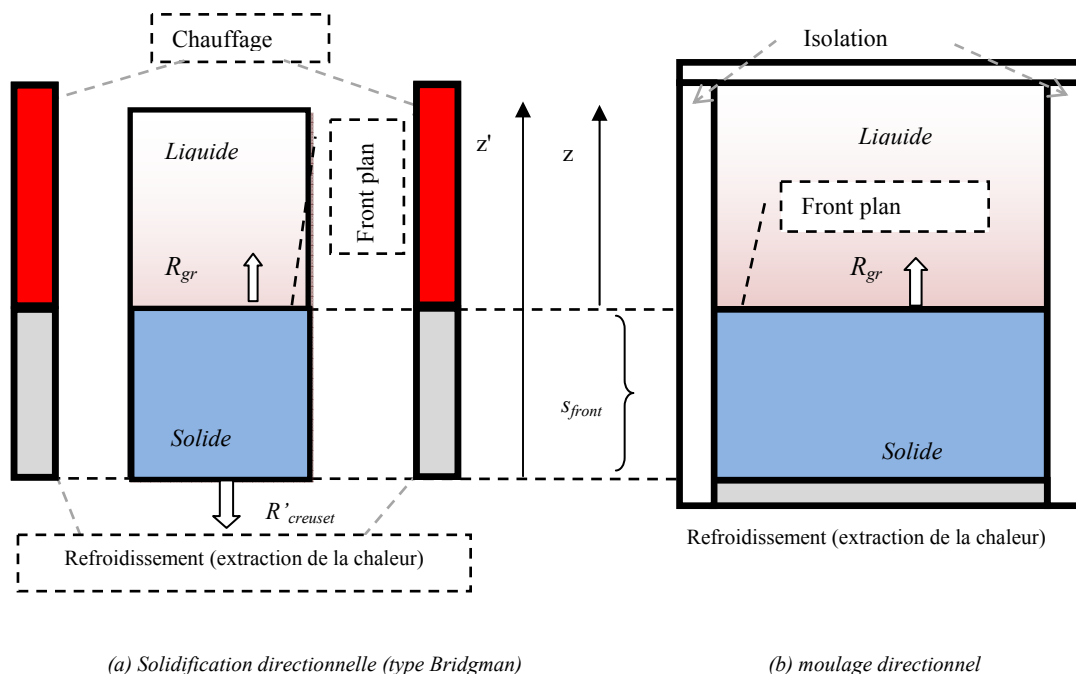


Figure 1.2 - Représentation schématique de diverses méthodes de base de solidification contrôlée : (a) *Solidification directionnelle (type Bridgman) utilisée essentiellement en croissance cristalline des monocristaux* ; (b) *Moulage directionnel utilisé dans la plupart d'alliages.*

Suivant la méthode d'extraction de chaleur, il est distingué plusieurs méthodes de solidification contrôlée qui sont les suivantes :

1.1.1.2 Diverses méthodes de solidification directionnelle

(a)- Solidification directionnelle de type Bridgman (en croissance cristalline)

La figure 1.2 illustre deux processus de solidifications, fondamentalement différents. Dans la figure 1.2a, la chaleur est extraite d'une manière presque stationnaire par le déplacement du creuset à un taux fixé (vitesse), $R'_{creuset}$, à travers le profil de température imposée par le four. De tels processus sont fréquemment utilisés dans la croissance cristalline d'un *monocristal* ou dans la solidification directionnelle. Il permet de contrôler séparément le *taux de croissance* du front (interface) solide-liquide R_{gr} (dit aussi *vitesse de croissance* ou *vitesse de solidification* : qui n'est pas nécessairement égale au taux de mouvement du creuset) et le *gradient de température* G_T .

Si la vitesse de déplacement du creuset $R'_{creuset}$ n'est pas très grande, la solidification et le flux de chaleur sont unidirectionnels. Par conséquent, le *taux de refroidissement* est relié aux paramètres G_T et R_{gr} qui sont constants tel que :

$$\dot{T} = \left(\frac{dT}{dz'} \right)_{s_{front},t} \left(\frac{ds_{front}}{dt} \right)_{z',t} = G_T R_{gr} \quad (1.3)$$

avec $s_{front} = z' - z$ la position de l'interface solide-liquide supposée *planaire et lisse* et où z' est la distance par rapport à un système fixe de coordonnées, z est la distance mesurée à partir de l'interface dans le liquide par rapport à un système de coordonnées qui se déplace avec l'interface.

Il faut noter qu'en solidification directionnelle (type Bridgman) : le creuset est tiré vers le bas en maintenant un gradient de température constant G_T , avec une vitesse uniforme ($R'_{creuset}$) et donc la microstructure de solidification obtenue est uniforme dans le spécimen à solidifier. Cependant, la méthode est limitée à des spécimens de petits diamètres et elle est coûteuse parce qu'elle est lente et, paradoxalement, la chaleur doit être fournie durant la solidification afin de maintenir le gradient de température imposé positif. Pour ces raisons, la méthode de Bridgman est employée seulement pour des raisons de recherche et dans la croissance cristalline des monocristaux.

(b)- Moulage (« casting ») directionnel

Un autre processus de moulage est illustré par la figure 1.2b. Ici, la chaleur est extraite par un refroidissement et, comme en Fig. 1.2a, la croissance se produit dans une direction qui est parallèle, et opposée, à la direction du *flux de chaleur*. Dans cette situation, le flux de chaleur diminue avec le temps comme ce sont des paramètres couplés (G_T et R_{gr}), \dot{T} varie aussi.

Notons qu'en moulage directionnel, les avantages de l'orientation, (tels que : un meilleur contrôle des propriétés et une absence d'une macro ségrégation nuisible), sont retenus mais la microstructure obtenue n'est plus uniforme le long du spécimen car le taux de croissance R_{gr} et le gradient de température G_T diminuent lorsque la distance à partir de la paroi froide augmente. Cependant, ce processus est bon marché comparé à celui de Bridgman.

1.1.1.3 Moulage conventionnel d'un lingot (orientation microscopique locale)

La figure 1.3 montre le processus de moulage conventionnel d'un alliage où est représenté un volume élémentaire de ce moulage. La différence entre les deux figures 1.2 (b) et (1.3) est la présence d'une morphologie *dendritique* à la structure de l'interface solide-liquide ainsi que le montre schématiquement la figure 1.3. Cette morphologie dépend de la composition de l'alliage et des paramètres (G_T et R_{gr}) [Kurtz & Fisher, 1984]. Elle peut posséder plusieurs branches (bras) conduisant à la forme caractéristique de *dendrite* (du grec *dendron* : arbre).

À partir de la figure 1.4, il faut souligner que, bien que dans une vaste majorité des produits de moulage, aucune orientation n'est imposée à la structure entière, mais la situation locale peut être (au niveau de dendrites) équivalente à celle qui se produit dans le moulage directionnel (figure 1.2b) (c'est-à-dire que la croissance de la dendrite colonnaire est directionnel). Ce qui est vrai pour le chemin dans lequel le solide avance (dirigé à l'intérieur à partir de la paroi du moule) pour former une *zone dendritique colonnaire* (Fig.1.3). Durant la croissance de la *zone colonnaire*, trois régions peuvent être distinguées : liquide, solide+liquide (nommée *zone biphasée* ou *pâteuse*) et solide. La région biphasée est la région où toutes les caractéristiques microstructurales et ainsi les propriétés de moulage sont déterminées, exemple : la masse volumique, la forme, la taille et la distribution de variations de concentration, les précipitées et les pores. Un volume élémentaire infinitésimalement étroit qui est fixé dans la zone pâteuse et est perpendiculaire à la direction principale de croissance

permet la description microscopique du processus de solidification et donc l'échelle et la composition de la microstructure (Fig.1.3). Donc la solidification sur une échelle microscopique (échelle de dendrite), une autre fois, prend place directionnellement, perpendiculaire à l'axe primaire de croissance des *dendrites* (Fig.1.3). Cette représentation permet une estimation simple de la micro ségrégation inter dendritique.

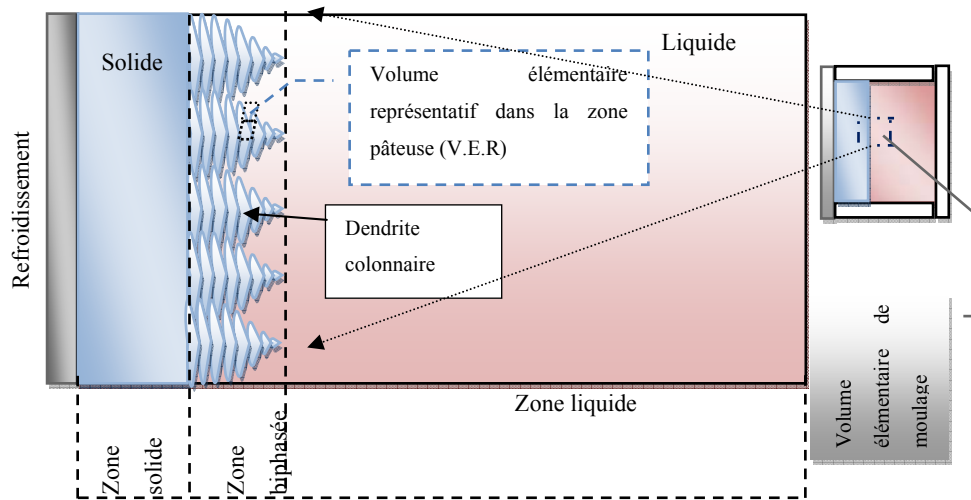


Figure 1.3 - Représentation schématique de moulage conventionnel (direction locale au niveau de dendrites) d'un alliage. Volume élémentaire d'un moulage conventionnel (ici le cas de la croissance dendritique colonnaire).

1.1.2 Microstructures de solidification (types de cristaux formés) dans un lingot de moulage

Généralement dans un lingot ou une pièce moulée (alliages métalliques de composition non-eutectique), trois zones de comportement de solidification peuvent être distinguées (Fig.1.4) [Kurtz & Fisher, 1984].

Il faut noter qu'au début avant le processus de croissance (solidification) (au temps $t=0$) les nucléats solides sont formés par le processus de nucléation qui est complètement différent du processus de solidification proprement dit.

À l'interface moule-métal, le *taux de refroidissement* étant à son maximum dû à la température initiale relativement faible du moule. Par conséquent, plusieurs petits grains ayant des orientations aléatoires, ont été nucléés à la surface du moule et une zone *équiaxe externe* dite aussi « *zone de peaux* » s'est formée. Ces cristaux rapidement deviennent des dendrites et développent des bras qui croissent le long des directions cristallographiques préférées. Une

croissance compétitive entre les *cristaux équiaxes*, aléatoirement orientés, crée ceux qui ont une direction de croissance préférée alignée parallèlement et opposée à la direction pour éliminer les autres (dendrites colonnaires). Ce qui parce que leur fort taux de croissance leurs permet de dominer la structure morphologique de l'interface solide-liquide, et conduit par conséquent à la formation de la *zone colonnaire* Fig.1.4(a).

Au-delà d'une certaine étape dans le développement des « *dendrites colonnaires* », les branches qui se détachent de ces dernières peuvent croître indépendamment. Celles-ci tendent à prendre place en une forme équiaxe parce que leur chaleur latente est extraite radialement à travers le liquide **sous-refroidi**. La région solidifiée qui les contiennent est nommée la « *zone équiaxe interne* » (Fig.1.4(b)).

La transition de la croissance colonnaire à équiaxe « *CTE* » est très dépendante du degré de convection dans le liquide. Dans les moulages à croissance continue, le *brassage* « *stirring* » *électromagnétique* est souvent utilisée pour surmonter cette transition et conduit à une solidité supérieure au centre de lingot [Kurtz & Fisher, 1984]. En effet le *brassage électromagnétique* dans les moulages continus, entre autres techniques, permet d'affiner la taille de grains, en augmentant l'intensité de la convection du liquide, et en favorisant ainsi la fragmentation (mécanique ou par dissolution) des dendrites colonnaires [Bousquet-Mélou, 2001].

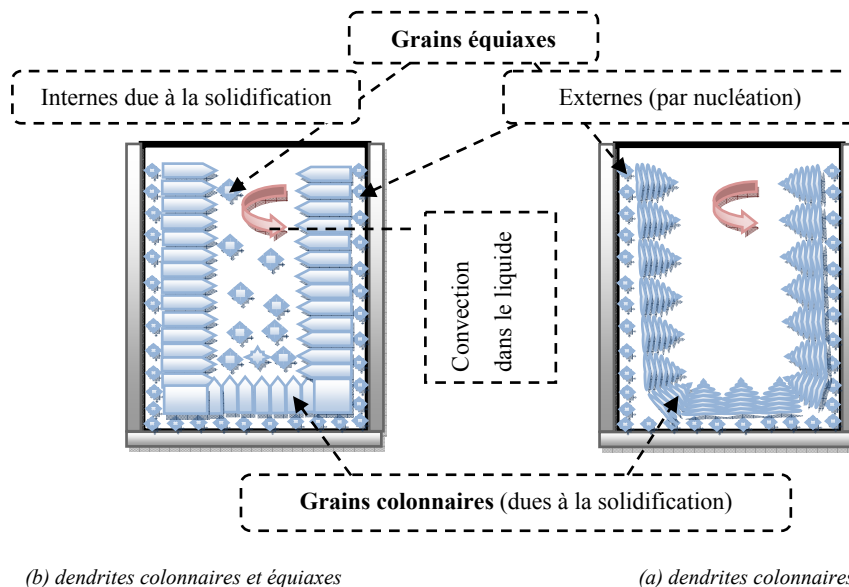


Figure 1.4 - Représentation schématique de formation de différentes zones structurales en moulage d'un lingot.

1.1.3 Principaux types d'alliages et diagramme de phase

(a) Classification des alliages binaires métalliques

Il est reconnu qu'une substance pure, (métal pur), peut se solidifier d'une manière plane et lisse ou dendrite [Kurtz & Fisher, 1984] suivant la *condition de refroidissement*. En revanche, dans les alliages métalliques binaires, la forme de microstructure de solidification dépend non seulement sur les conditions de refroidissement, mais aussi de la *nature* de l'alliage.

Selon les phases solides en présence, les alliages binaires se classifient, essentiellement, en :

- *alliages simples phases* (où une seule phase solide de morphologie dendritique existe) la zone biphasée est constituée de dendrites solide-solution (avec ou sans précipités interdendritique), (exemple figure 1.5a) ;

- *alliages péritectiques* où plusieurs phases solides s'existent (il est noté que ces alliages péritectiques tels que les aciers croissent en une forme dendritique) (exemple figure 1.5c) ; et

- *alliages dits eutectiques*, qui sont composées de plusieurs phases solides (exemple figure 1.5b et 1.6), selon la composition il est distingué les alliages hypo eutectiques (de composition $C < C_E$) ; les eutectiques de composition $C = C_E$ et les hyper eutectiques (de composition $C > C_E$) (la zone biphasée est constituée de (*dendrites + l'inter dendritique eutectique*)). Il faut noter que, la phase solide primaire (α) est la plus importante dans ce type d'alliages (Fig.1.6 **Erreur ! Source du renvoi introuvable.**). Cette phase présente la morphologie dendritique. Néanmoins, comme il est montré, pour ces alliages, généralement, il est observé que le dernier liquide à solidifier (correspondant à l'étape finale de solidification) est habituellement celui de *composition eutectique* et la *réaction eutectique* transforme ce liquide en phases solides (α et β) (c'est-à-dire formation de la *structure eutectique* ($\alpha + \beta$) composée des deux phases solides distinctes). La température à laquelle cette transformation se produit est appelée la *température eutectique*, T_E , et semblablement la composition est appelée la *composition eutectique*, C_E . Le diagramme de phase montre que cette transformation se produit à une température constante égale à la *température eutectique*.

(b) Conditions de l'équilibre local dans un système binaire

La création d'un cristal à partir d'un liquide génère un changement local (à l'échelle atomique) dans la composition. Ce qui est dû à la condition d'équilibre thermodynamique chimique pour un système binaire (A-B) contenant deux phases solide et liquide [Kurtz & Fisher, 1984], qui est donnée par l'égalité de potentiels chimiques :

$$\mu_l^A = \mu_s^A \quad \text{et} \quad \mu_l^B = \mu_s^B \quad (1.4)$$

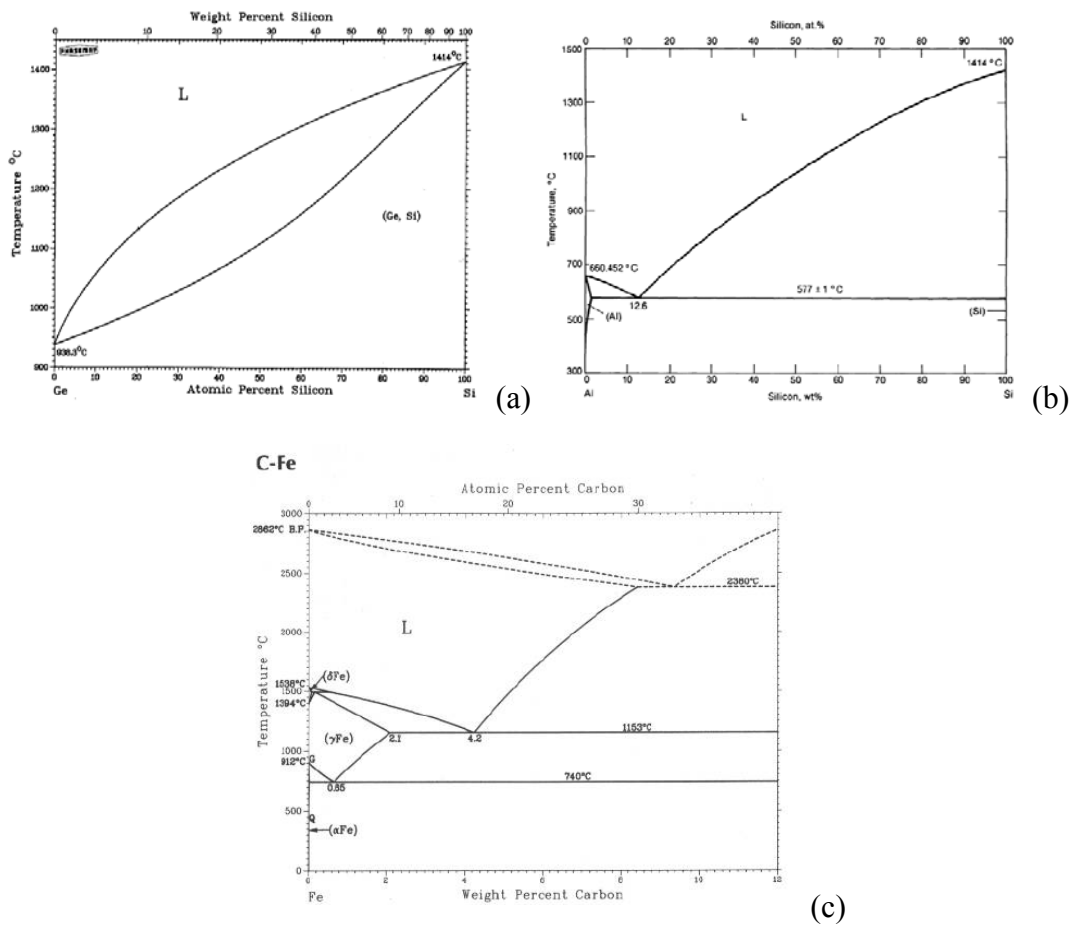


Figure 1.5 - Classification d'alliage selon le nombre de phase solide formée. Ces diagrammes sont tracés sous conditions isotherme et isobare (généralement sous un bar). (a) Diagramme de phase Si-Ge (simple phase) [Yilzid, 2005] ; (b) Diagramme de phase Al-Si (alliage eutectique) [ASM Volume 15, 1992] et (c) Diagramme de phase (Fe-C) (alliage péritectique) [ASM Volume 15, 1992]

La *différence en composition à l'interface* croissante, s'il est supposé qu'il existe un équilibre local (à l'interface) dans un alliage métallique, peut être décrite par le coefficient de partage (dit aussi de ségrégation ou de redistribution) sous les conditions isobare et isotherme (figure 8) tel que [Flemings, 1974] :

$$\kappa_p = [C_s/C_l]_{p,T} \quad (1.5)$$

(c) Diagramme d'équilibre linéarisé

Dans la plupart des traitements théoriques présentés dans la littérature, les lignes de *solidus* et *liquidus* sont supposées à être linéaires. Ce qui signifie que :

- Le coefficient de ségrégation et la pente de la ligne *liquidus* (κ_p et m_{pente}) sont alors constants. En réalité ceci viole la condition de l'équilibre de l'équation 1.4 mais permet les analyses théoriques plus faciles sans affecter sérieusement les résultats,
- La pente m_{pente} est définie de telle sorte que le produit $(\kappa_p - 1)m_{pente}$ est positif. C'est-à-dire m_{pente} étant définit $m_{pente} > 0$ lorsque $\kappa_p > 1$ et $m_{pente} < 0$ lorsque $\kappa_p < 1$.

Deux autres paramètres importants d'un système d'alliage sont donnés sur la Fig.1.7. Ceux sont : l'intervalle de température *liquidus-solidus* pour un alliage de composition C_0 et la différence de concentration entre les contenus de soluté solide et liquide à la température *solidus* de l'alliage. Ceux-ci sont exprimés respectivement par :

$$\Delta T_0 = -m_{pente} \Delta C_0 = (T_l - T_s) \quad (1.6)$$

et

$$\Delta C_0 = -\frac{C_0(1-\kappa_p)}{\kappa_p} \quad (1.7)$$

Par la suite, le processus de *nucléation* est brièvement considéré et une attention est faite aux mécanismes par lesquels les atomes dans le liquide deviennent une part d'un cristal solide croissant et donnent ainsi la morphologie de l'interface croissante : le front de solidification. En outre, puisque pour un alliage de composition initiale C_0 est inférieure à la composition eutectique C_E (alliage hypoeutectique) (Fig.1.6) le solide primaire (α) est le plus souvent formé et est le plus important lors de la solidification. Comme Il est déjà mentionné que généralement ce cristal solide se présente en morphologie dendritique. Par conséquent, par la

suite toutes les microstructures pour les alliages considérés sont relatives à ce type de solide (la phase eutectique $\alpha+\beta$ sera ignorée dans le présent chapitre).

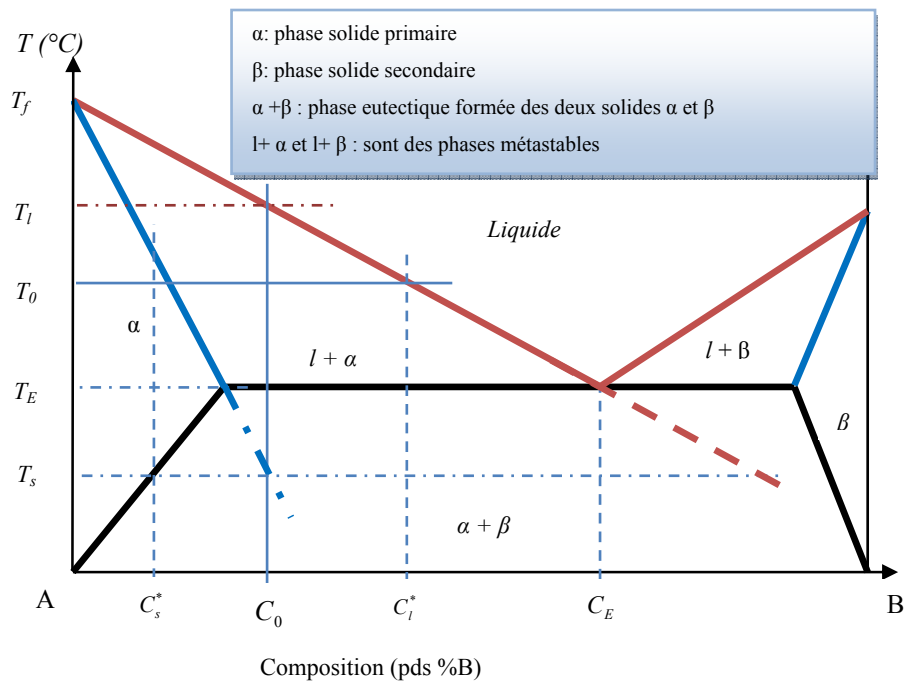


Figure 1.6 : Représentation schématique d'un diagramme de phase d'équilibre typique (linéarisé) (d'un alliage binaire eutectique A-B).

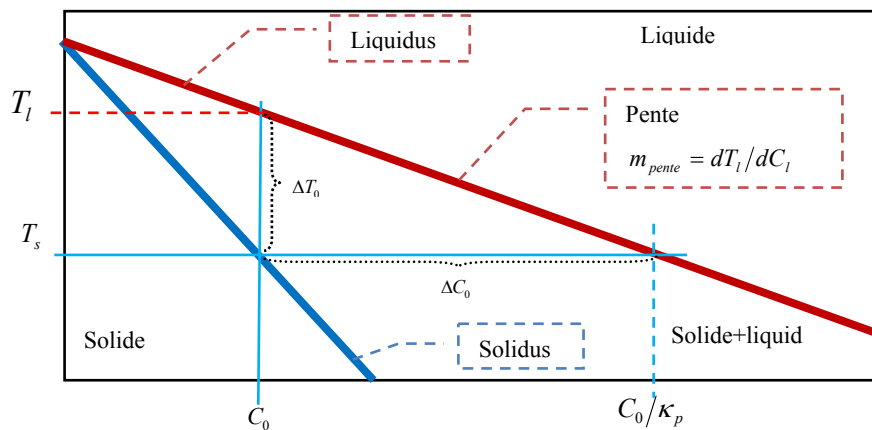


Figure 1.7 : Schéma d'un diagramme de phase d'équilibre (ici cas d'un alliage simple phase).

1.1.4 Transfert atomique à l'interface solide-liquide

1.1.4.1 Cinétique de la nucléation du solide

1.1.4.1.1 Introduction à la nucléation

Généralement, avant qu'un processus de croissance se commence (au temps $t = 0$), un phénomène de nucléation s'est produit et la solidification proprement dite ne commence qu'après l'achèvement de cette nucléation (Fig.1.8). Ainsi, le processus de *nucléation* joue un rôle clé dans la solidification des moulages par le contrôle (à une large étendue) du type de structure initiale, l'échelle de taille et la distribution spatiale des phases produites [ASM Volume 15, 1992]. Durant le processus de nucléation, l'échelle de taille des événements critiques de nucléation est très petite (atomique) et le taux de son occurrence est très rapide pour l'observation pratique exacte. Néanmoins, les effets de nucléation exercent, dans la microstructure de solidification, une grande influence sur *la taille de grain et la morphologie* aussi bien que *l'homogénéité compositionnelle*. Il faut souligner que la microstructure finale est aussi influencée par les processus de : *croissance cristalline* (c'est-à-dire solidification proprement dite) ; *l'écoulement fluide (convection)* et *le grossissement structural* qui sont importants dans les étapes qui précèdent la *nucléation* d'un lingot de moulage.

1.1.4.1.2 La condition de nucléation (sous-refroidissement de nucléation)

Plusieurs expériences et modèles [Herlach et al, 1993 ; Kurtz & Fisher, 1984] ont montré que dans un grand nombre de moulages, la température correspondante à l'initiation de refroidissement (solidification) est toujours très proche par valeur inférieure du point de fusion T_f (substance pure) ou de la température de *liquidus* d'équilibre T_l (alliage). En effet, un système d'alliage, de composition C_0 peut rester à un état fondu quelques degrés en dessous de la température de l'équilibre $T_l(C_0)$, donnée par le diagramme de phase de la (Fig.1.6). À une échelle *méso-microscopique* (celle de l'interface solide-liquide) ce qui est appelé phénomène de *sous-refroidissement* de nucléation (ou aussi *surfusion* ou *super-refroidissement* dans la littérature). Ce dernier, désigné par (ΔT_{nucl}) est généralement très faible, quelques degrés, dans les *situations pratiques*, est usuellement défini comme la différence entre la température d'équilibre d'un système d'alliage à sa température réelle ($\Delta T_{nucl} = T_l - T$). Cette dernière est inférieure à la température d'équilibre lorsque la fonte est

sous-refroidie ($\Delta T_{nucl} > 0$). Ainsi, Le *sous-refroidissement* joue un rôle fondamental dans la description de l'étape initiale de solidification qui est contrôlée par le processus de *nucléation*. En fait, une *nucléation* commence, à quelques degrés de *sous-refroidissement* ΔT_{nucl} (c'est-à-dire à des conditions de **non-équilibre thermique**).

Le degré de *sous-refroidissement* de la fonte au commencement de solidification est important à considérer dans le développement d'une compréhension de la variété de pratiques de *modifications structurales* et *raffinement de grains* dans les alliages ordinaires de moulage et est la base des technologies les plus récentes de processus de solidification utilisant des méthodes de solidification rapide [ASM Volume 15, 1992].

1.1.4.1.3 Les phénomènes de nucléation (cas de métaux purs)

La nucléation au cours de la solidification est un processus qui est activé thermiquement et implique une croissance fluctuante dans les tailles des agrégations (*clusters*) de solides formées [ASM Volume 15, 1992]. En effet, comme la température diminue ($\Delta T_{nucl} > 0$), l'agitation thermique des atomes du liquide réduit, permettant la création des petites agrégations « *clusters* » aléatoires d'atomes dans des minuscules régions cristallines.

Les changements dans la taille de *cluster* sont supposés se produire par une simple addition d'atome ou par moins d'échange entre le *cluster* et le liquide *sous-refroidi* environnant. À petites tailles de *cluster*, les énergies de formation de *cluster* révèlent que l'énergie de surface est dominante, comme il peut être observé par la notation que le rapport de l'aire de surface au volume d'une sphère est $(3/r)$. Pour les *clusters* de plus petites tailles, qui sont appelées *germes* « *embryos* », celles-ci sont plus probablement à dissoudre que grossir aux cristaux macroscopiques. En fait, l'excès d'énergie de surface due à la courbure pour les petits *clusters* est la principale contribution à la barrière d'activation (énergie d'activation) pour la *nucléation* de solide. Ce qui explique la résistance cinétique des liquides à la cristallisation et est manifestée dans des observations fréquentes des effets de *sous-refroidissement* durant la solidification [ASM Volume 15, 1992].

Nucléation homogène

La *cinétique* et *taux de croissance*, qui sont les caractéristiques principales de phénomène de nucléation durant la solidification, peuvent être illustrés en termes (les plus simples) par l'utilisation du modèle de capillarité à évaluer les facteurs de cinétique [ASM Volume 15,

1992]. Selon cette approche, il est utile d'examiner le premier cas de *nucléation homogène* dans laquelle la formation de solide se produise sans implication d'aucune impureté étrangère d'*atomes* ou *autre sites* de surface de contact (du creuset) avec la fonte. Comme une simplification supplémentaire, seulement le cas d'énergie interfaciale isotropique est traité, mais il doit être reconnu que le comportement anisotropique peut mener à des formes *facettées* pour le *cluster* [ASM Volume 15, 1992].

Le bilan énergétique de formation de *cluster* d'une géométrie sphérique peut être exprimé :

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \sigma + (4\pi r^3 \Delta G_v) / 3 \quad (1.8)$$

où σ est l'énergie de surface interfaciale (J/m^2) et avec $\Delta G(r)$ est le changement de l'énergie libre pour former un *cluster* sphérique de taille r et ($\Delta G_v = \Delta H_f \Delta T_{nucl} / T_f v_{mol}$) est l'énergie libre par unité de volume (J/m^3), et v_{mol} est le volume molaire, T_f température de fusion et (ΔH_f est la *chaleur latente* molaire de fusion).

La relation (1.8) est caractérisée (Fig.18), dans laquelle la barrière d'activation pour la nucléation, ΔG_{cr} , est atteinte à une taille critique r_{cr} (qui est donnée par la condition : $d(\Delta G(r))/dr = 0$), cette taille peut s'exprimer par:

$$r_{cr} = -\frac{2\sigma}{\Delta G_v} = -\frac{2\sigma T_f v_{mol}}{\Delta H_f \Delta T_{nucl}} \quad (1.9)$$

et

$$\Delta G_{cr} = \frac{16\pi \sigma^3}{3\Delta G_v^2} = \frac{16\pi \sigma^3 T_f^2 v_{mol}^2}{3\Delta H_f^2 \Delta T_{nucl}^2} \quad (1.10)$$

À des valeurs croissantes de *sous-refroidissement* (ΔT_{nucl}), la taille critique r_{cr} diminue (r_{cr} est proportionnel à $(\Delta T_{nucl})^{-1}$) alors que l'énergie d'activation critique ΔG_{cr} diminue plus rapidement (ΔG_{cr} proportionnel à $(\Delta T_{nucl})^{-2}$). Un *cluster* est souvent supposé atteindre l'étape d'un *nucléat* « *nucleus* » qui est capable de continuer de croître avec une diminution de l'énergie libre lorsque la taille r_{cr} est achevée, mais en fait la croissance stable de *nucléat* s'ensuit lorsque la taille de *cluster* dépasse r_{cr} par une quantité correspondant à

$(\Delta G_{cr} - \kappa_{nucl} T)$ en Figure 1.8 [ASM Volume 15, 1992] où $\kappa_{nucl} = 2/r$ est la courbure du nucléat (ayant la forme de sphère de rayon r). La relation entre la taille de *cluster* et le nombre d'atomes dans le *cluster* (n_{cr}) est exprimée par $(n_{cr} v_{atm}) = \frac{4}{3} \pi r_{cr}^3 / 3$.

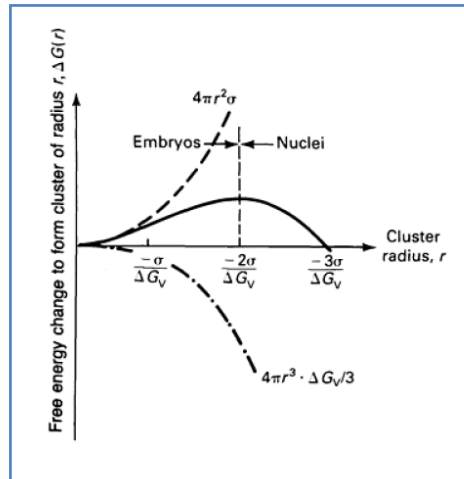


Figure 1.8 : Changement d'énergie libre pour la formation d'un cluster en fonction de taille de cluster.

La contribution de surface dans $\Delta G(r)$ est $4\pi r^2 \sigma$ et la contribution de volume est $4\pi r^3 \Delta G_v / 3$; le rayon critique r_{cr} se produit à $(-2\sigma / \Delta G_v)$ [photographie tirée de la référence ASM Volume 15, 1992]

1.1.4.2 Cinétique de croissance, structure de l'interface solide-liquide et échanges inter faciaux locaux

Une fois qu'un noyau (nucléat) est formé, il doit continuer à croître (le processus de croissance suit directement l'achèvement du processus de nucléation, c'est-à-dire à $t > 0$). De telle croissance est limité par :

- a- la capillarité ;
- b- la cinétique de l'attachement d'atome à l'interface et
- c- la diffusion de chaleur et de soluté.

L'importance relative de chacun de ces facteurs dépend de la substance en question et sur les conditions de solidification.

À l'échelle atomique, une *interface solide-liquide* est définie comme la zone intermédiaire entre les derniers atomes constituant le réseau cristallin et les premiers atomes de la phase liquide (Fig.1.9). L'interface est donc une surface très fine dont l'épaisseur est celle de quelques atomes du matériau observé.

La cinétique de croissance de cette interface est contrôlée par les contributions suivantes.

1.1.4.2.1 Effet de la courbure de l'interface (*sous-refroidissement de Gibbs-Thomson*) :

La transformation du liquide en solide implique la création d'une interface solide-liquide courbe et mobile. Il est reconnu que la courbure introduit des effets capillaires et un écoulement microscopique de chaleur et de masse (soluté) dans le cas des alliages.

À chaque interface solide-liquide d'aire (A_{front}) est associé un excès d'énergie interfaciale nécessaire à sa création. Par conséquent, des systèmes hétérogènes ou parties de systèmes qui présentent un grand rapport interfacial (A_{front}/v_{front}) doivent être dans un état d'énergie élevée et, ainsi, instables par rapport à un système où le rapport (A_{front}/v_{front}) est petit. La stabilité relative peut être exprimée par la température d'équilibre entre les deux phases (point de fusion T_f dans les *métaux purs* et température de *liquidus* T_l dans les alliages).

Le déplacement du point de fusion dû à cet effet de courbure, souvent appelé la *courbure* ou le *sous-refroidissement* de Gibbs-Thomson (*modification du point de fusion* T_f), est donné par [ASM Volume 15, 1992] :

$$\Delta T_{\Gamma} = T_f - T_{f\kappa_{s-l}} = \Gamma_{GT} \kappa_{s-l} \quad (\text{Cas d'un métal pur}) \quad (1.11)$$

avec $T_{f\kappa_{s-l}}$ la température d'équilibre entre solide-liquide à travers l'interface (point de fusion locale). Il est noté que la *courbure*, κ_{s-l} , et le *coefficient de Gibbs-Thomson*, Γ_{GT} , sont définis ici de telle sorte qu'un *sous-refroidissement* positif (diminution dans le point de fusion) est associé avec une portion d'interface qui est convexe dans la direction de la phase liquide. La courbure peut être exprimée par :

$$\kappa_{s-l} = \frac{dA_{front}}{dv_{front}} = \frac{1}{r'} + \frac{1}{r''} \quad (1.12)$$

où r' et r'' sont les rayons principaux de la courbure (valeurs minimale et maximale pour une surface donnée). Pour une interface d'aire de surface sphérique la courbure totale est égale $2/r$ et pour une surface cylindrique elle est $1/r$.

Le coefficient de *Gibbs-Thomson* est donné par :

$$\Gamma_{GT} = \sigma_{s-l} / \Delta s_f \quad (1.13)$$

où Δs_f est l'entropie de fusion par unité de volume.

Il est noté que pour la plupart des métaux, Γ_{GT} est de l'ordre de 10^{-7} K m . Ainsi, l'effet de l'énergie de l'interface solide-liquide (tension de surface σ_{s-l}), ne devient important que pour les morphologies inter faciales qui ont un rayon inférieur à $10 \mu\text{m}$ environ et par conséquent, il est souvent négligé [ASM Volume 15, 1992, Kurtz & Fisher, 1984].

1.1.4.2.2 La cinétique d'attachement d'atome à l'interface (*sous-refroidissement cinétique inter facial*) :

En addition de la courbure, la cinétique de l'interface peut être régie aussi par attachement atomique. En effet, après que la nucléation soit achevée, des atomes additionnels doivent être apportés au cristal (nucléé) dans le but de poursuivre sa croissance. Au cours de ce processus, l'interface solide-liquide s'oriente vers une structure spécifique à l'échelle atomique. Cette structure dépend des différences entre la structure de cristal et les forces entre le liquide et solide (Fig.1.9).

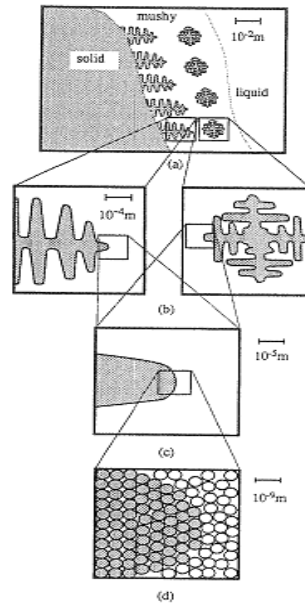


Figure 1.9 : Illustration des échelles et phénomènes physiques en solidification dendritique [photographie tirée de la référence Beckermann & Viskanta, 1993] : (a) échelle de système (macroscopique) ; (b) échelle de grains ; (c) échelle inter faciale ; (d) échelle atomique.

Il est ainsi défini la force (gradient) de guidage qui est responsable de l'attachement des atomes à l'interface solide du cristal (Fig.1.9). Celle-ci est désignée comme le *sous-refroidissement* cinétique interfacial (ΔT_{interf}), qui a un effet déstabilisant sur l'interface, et peut être approximée pour un matériau pur [Mosbah, 2008] par :

$$\Delta T_{interf} = R_{gr} / \mu_0 \quad (\text{cas d'un métal pur}) \quad (1.14)$$

où R_{gr} est la taux de croissance de l'interface (définie auparavant) et le paramètre μ_0 peut être approximé [Mosbah, 2008] par :

$$\mu_0 \approx D_l \Delta s_f v_{molaire} / a_{gap} R_{GP} T_f \quad (1.15)$$

où D_l est la diffusion de l'espèce dans le liquide, Δs_f est l'entropie volumique de fusion, $v_{molaire}$ est le volume molaire de la phase solide, a_{gap} , est la distance de lacune (*gap*) qui est de l'ordre de grandeur de la distance interatomique, R_{GP} , est la constante des gaz parfaits.

La cinétique d'attachement atomique joue un rôle important pour quelques substances pures. Par exemple : dans les métaux qui présentent des interfaces lisses, de rayons de courbure infinies, l'effet capillaire est absent et la croissance d'interface est dirigée par le *sous-refroidissement interfacial* de diffusion de chaleur.

Ainsi, les substances pures se distinguent par la présence de *cristaux facetté* et de *cristaux non-facetté*. Lorsque la substance a une morphologie de croissance (cristal) *non-facettée* typiquement pour les *métaux*, les *transferts atomiques* (d'attachement) liquide-cristal sont rapides et peuvent être *négligés*. Alors que, lorsque la substance montre une morphologie de croissance (cristal) *facettée* typique pour les substances *non-métalliques* ou *composantes intermétalliques*, les *transferts atomiques* liquide-cristal sont *importants*, ce qui ne veut pas dire qu'ils dominent le processus de croissance.

1.1.4.2.3 Échanges inter faciaux locaux : diffusion de chaleur et de soluté (*sous-refroidissements G_T dû à q_q et solutal G_c à l'interface*)

La croissance de l'interface est aussi régie par la diffusion de la chaleur (cas de substances pures) et (diffusion et rejection) de soluté (cas d'alliages). Notons que la chaleur et le soluté sont rejetés au sommet de la dendrite dans le cas d'un alliage).

Ces phénomènes peuvent conduire à des instabilités morphologiques :

Instabilité morphologique de l'interface solide-liquide dans les alliages métalliques

Dans le cas d'un alliage, les effets de la diffusion de soluté, aussi bien que l'écoulement (diffusion) de chaleur, doivent être considérés. En outre, dans le cas des alliages, en plus de la diffusion de soluté, ce dernier est rejeté dans les zones pâteuse et liquide. Ainsi, avant de

commencer avec l'étude des instabilités d'interface, il faut commencer par l'accumulation de soluté dans une couche limite de diffusion.

a- Accumulation de soluté (rejeté) à l'interface solide-liquide supposée lisse

Dans les alliages, le critère pour un comportement stable et instable est plus compliqué en raison du fait que la température de fusion d'équilibre locale peut varier le long de l'interface. Durant la solidification d'un alliage, le soluté s'accumule en avant de l'interface (Fig. 1.10) en raison de la faible solubilité du solide lorsque le coefficient de distribution ($\kappa_p < 1$) (Fig.1.10 et équation 1.4).

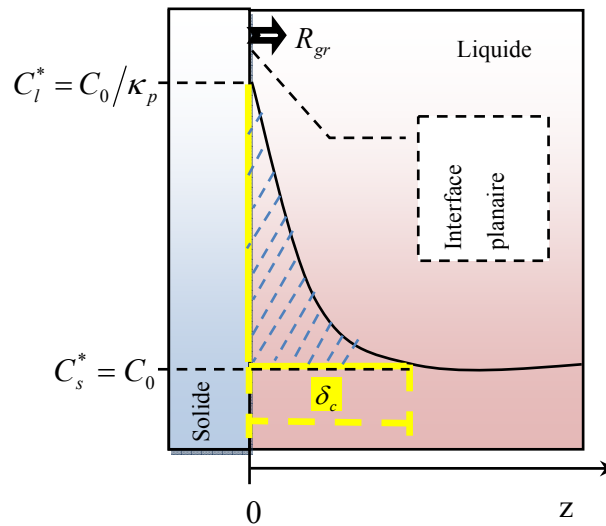


Figure 1.10 : Couche limite de diffusion solutale, à l'état stationnaire, établie en avant de l'interface solide-liquide.

L'excès de soluté rejeté à partir du solide s'accumule dans une *couche limite enrichie (en soluté)* en avant de l'interface. La *couche limite de diffusion*, entièrement développée, est illustrée en figure 1.10. Elle est établie durant une période transitoire initiale, avant que la croissance à l'état stationnaire ne commence [Kurtz & Fisher, 1984]. Dans cette situation d'état stationnaire, où toutes les concentrations sont constantes, en fonction d'un repère de référence mobile (0, z) avec l'interface solide-liquide, le solide se forme à la température du *solidus*. Donc, la composition du solide est égale à C_0 , du liquide loin en avant de l'interface (où l'effet d'accumulation de soluté n'a pas encore ressenti) (Fig. 1.10). La concentration de soluté dans la couche limite diminue exponentiellement, de C_0/κ_p à C_0 , selon :

$$C_l = C_0 + \Delta C_0 \exp(-R_{gr}z/D_l) \quad (1.16)$$

Mathématiquement, l'épaisseur (δ_c), de la *couche limite* de diffusion est infinie. Cependant, pour des raisons pratiques elle peut être prise égale à la « couche limite équivalente » (Fig. 14) [Kurtz & Fisher, 1984] :

$$\delta_c = 2D_l/R_{gr} \quad (1.17)$$

Cette longueur est égale à la longueur de base d'un triangle d'angle droit dont la hauteur est égale à l'excès de concentration en soluté à l'interface et dont l'aire est la même que celle sous une courbe exponentielle (Fig. 1.10). L'équation 1.17 révèle que l'épaisseur de la couche limite équivalente est inversement proportionnelle au *taux de croissance* R_{gr} .

Un simple bilan de flux (de soluté) montre qu'une interface d'aire A_{front} rejette J_s atomes par seconde :

$$J_s = A_{front} (dz/dt)(C_l^* - C_s^*) \quad (1.18)$$

où le terme $A_{front} (dz/dt)$ représente le volume de liquide qui est transformé en solide par unité de temps et le second terme $(C_l^* - C_s^*)$ représente la différences de concentrations en soluté dans le liquide et solide à l'interface ((* *état stationnaire à l'interface*)). Dans les conditions d'état stationnaire, le flux résultant de soluté rejeté est compensé par un flux égal qui prend le soluté loin de l'interface par diffusion. Le flux dans le liquide est :

$$J_l = -A_{front} D_l (dC_l/dz) \quad (1.19)$$

Égalisons les flux et notons que, à l'état stationnaire $C_l^* = C_0/\kappa_p$: ce qui donne le gradient de concentration (de soluté) :

$$G_c = [dC_l/dz]_{z=0} = -[R_{gr}/D_l] \Delta C_0 \quad (G_c \text{ à l'interface}) \quad (1.20)$$

b- Instabilité d'interface dans un alliage binaire (sous-refroidissement constitutif)

La couche limite de diffusion en état stationnaire, montrée dans la figure 1.10, est reproduite sur le diagramme de la Fig. 1.11 pour un taux de croissance donné. À partir de cette figure il est observé que :

Au cours de la solidification d'un alliage, il y en a un changement substantiel dans la concentration en soluté en avant de l'interface (dans la couche limite δ_c). Ce **changement doit affecter** la température locale d'équilibre de solidification, du *liquidus* (T_l) (pour un alliage), qui est reliée à la composition par (Fig. 1.10 et Fig. 1.6) :

$$T_l\{C_0\} - T_l = m_{\text{pente}}(C_0 - C_l) \quad (1.21)$$

où $T_l\{C_0\}$ est la température de *liquidus* correspondante à la composition initiale de l'alliage.

Cette relation est illustrée figure 1.11 et indique que la concentration de *couche limite* peut être conservée, en utilisant le diagramme de phase, dans une *couche limite de diffusion de température de liquidus* (dont l'épaisseur est δ_T , [Kurtz & Fisher, 1984]. La température de *liquidus* augmente avec z , lorsque la valeur de $\kappa_p < 1$, puisque la valeur de m_{pente} est alors négative. Elle représente la *température locale de l'équilibre* pour la solidification d'un élément de volume correspondant de la fonte. Pour étudier la stabilité, il est aussi nécessaire de déterminer la température T_{q_e} (imposée par le flux de chaleur q_e). Les deux températures doivent être égales à l'interface. Dans le cas d'un état stationnaire de croissance d'une *interface* supposée plane, ce qui correspond à la température *solidus* pour la composition C_0 , comme il est montré dans la Fig. 1.11.

Condition d'existence de sous-refroidissement constitutionnel (solutal) :

Selon le gradient de température ($G_T = \left[\frac{dT_{q_e}}{dz} \right]_{z=0}$) dans le liquide à l'interface solide-liquide (qui est imposé par le flux de chaleur externe) une zone de *sous-refroidissement constitutif* (figure 1.12) peut exister ou non. Cette zone est définie être le *volume* de fonte en avant de l'interface à travers laquelle la température réelle T_{q_e} , est inférieure à la température d'équilibre locale de solidification T_l (c'est-à-dire $T_{q_e} < T_l$) (Fig. 1.12b). La fonte dans cette

zone est ainsi sous-refroidie (c'est-à-dire, dans un état métastable). Il est observé que la condition requise pour l'existence de telle zone de *sous-refroidissement constitutionnel* est telle que le gradient de température G_T , à l'interface dans le liquide doit être < au *gradient de changement de la température liquidus* dans la fonte. Le dernier gradient est obtenu par la multiplication du gradient de concentration G_c , par la pente *liquidus*, m_{pente} . Donc, l'interface est *constitutionnellement sous-refroidie* lorsque :

$$G_T < m_{pente} G_c \quad (1.23)$$

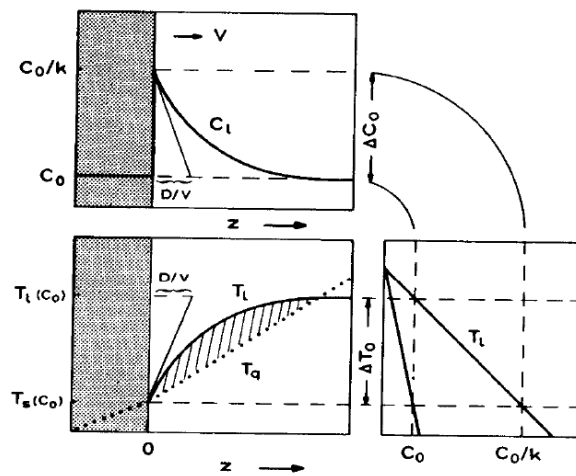


Figure 1.11 : illustration du sous-refroidissement constitutionnel dans les alliages (où l'interface est supposée lisse). Couche limites de diffusion (solutale et thermique) [Kurtz & Fisher, 1984]

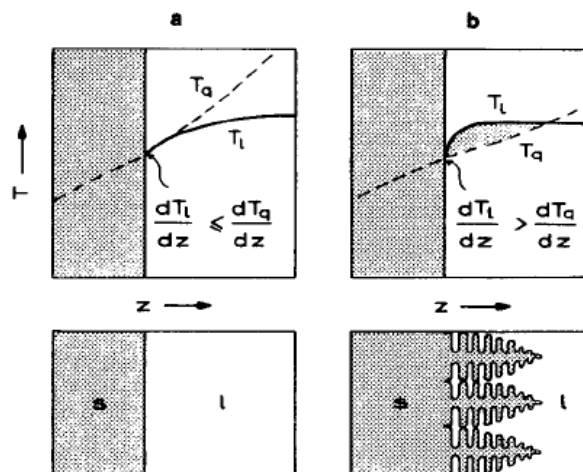


Figure 1.12 : La condition de *sous-refroidissement constitutionnel* à l'interface solide-liquide et les structures résultantes [photographie tirée de la référence Kurtz & Fisher, 1984].

Critère de l'existence de sous-refroidissement constitutionnel (critère d'instabilité) :

Depuis que le gradient de concentration à l'interface est connu, il est simple de dériver le critère de l'existence de *sous-refroidissement constitutionnel* (équation (1.22)) en une autre forme. L'interface doit toujours devenir *instable* si l'équation (1.22) est satisfaite, celle-ci peut s'écrire :

$$G_T < -m_{\text{pente}} R_{gr} \Delta C_0 / D_l \quad (1.24a)$$

Aussi, parce que « $\Delta T_0 = -m_{\text{pente}} \Delta C_0 = (T_l - T_s)$ » (équation (1.6)), la limite de *sous-refroidissement constitutionnel* (sa condition limite d'existence) peut être exprimée dans sa forme usuelle [Kurtz & Fisher, 1984] :

$$G_T / R_{gr} = \Delta T_0 / D_l \quad \text{ou} \quad (R_{gr})_{\text{critique}} = \frac{G_T D_l}{\Delta T_0} \quad (1.24b)$$

mais $\Delta T_0 = m_{\text{pente}} C_0 (\kappa_p - 1) / \kappa_p$ (équations 1.9 et 1.7).

Nous obtenons la condition d'instabilité : « une **instabilité interfaciale** » apparaît si :

$$\frac{G_T}{R_{gr}} < \frac{\Delta T_0}{D_l} \quad (1.25)$$

Dans la littérature ce phénomène a été étudié et un critère exact de l'existence de *sous-refroidissement constitutionnel* a été déterminé par Mullins & Sekerka [Mullins & Sekerka, 1964]. Notons que les deux critères sont légèrement différents.

c- Structure morphologique d'interface en fonction du rapport G_T / R_{gr} :

Si le critère (équation 1.26) est satisfait l'interface lors de solidification d'un alliage binaire métallique *de composition non-eutectique* (Fig. 1.6) est instable et présente souvent des cellules et dendrites (ce qui est équivalent à une diminution de G_T / R_{gr}). Pour de grandes valeurs du rapport G_T / R_{gr} (limite d'existence de *sous-refroidissement solutal*) l'interface montre une structure morphologique lisse (Fig.1.13a), avec la diminution de ce rapport

l'interface devient de structure cellulaire (Fig.1.13b) et lorsque la valeur du rapport est diminuée à une valeur inférieure à $\Delta T_0/D_l$ (équation 1.26) l'interface devient de morphologie dendritique (Fig.1.13c). La figure 1.13 montre la transition de la morphologie de croissance d'une interface lisse et plane, à cellulaire à dendritique lorsque le *sous-refroidissement constitutionnel* augmente.

La conclusion tirée ici c'est qu'un phénomène d'instabilité des interfaces lisses (instabilité morphologique) est à l'origine de la morphologie *dendritique* et le *critère* de l'instabilité est donné par l'équation 1.25. D'autant plus que **dans la littérature** différentes études sur ce phénomène d'instabilité morphologique ont été réalisées pour la solidification des alliages binaires de (Fig.1.6) par exemple : [Coriell & McFadden, 1989 ; 2002 ; Mullins & Sekerka, 1964 ; Trivedi & Kurz, 1986 ; Hurlé et al, 1982]. Par une étude numérique [Prescott & Incropera, 1996] ont montré qu'un alliage peut effectivement solidifier avec une interface **lisse**, si le gradient de température à l'interface est suffisamment grand, ou si le taux de croissance est très petit.

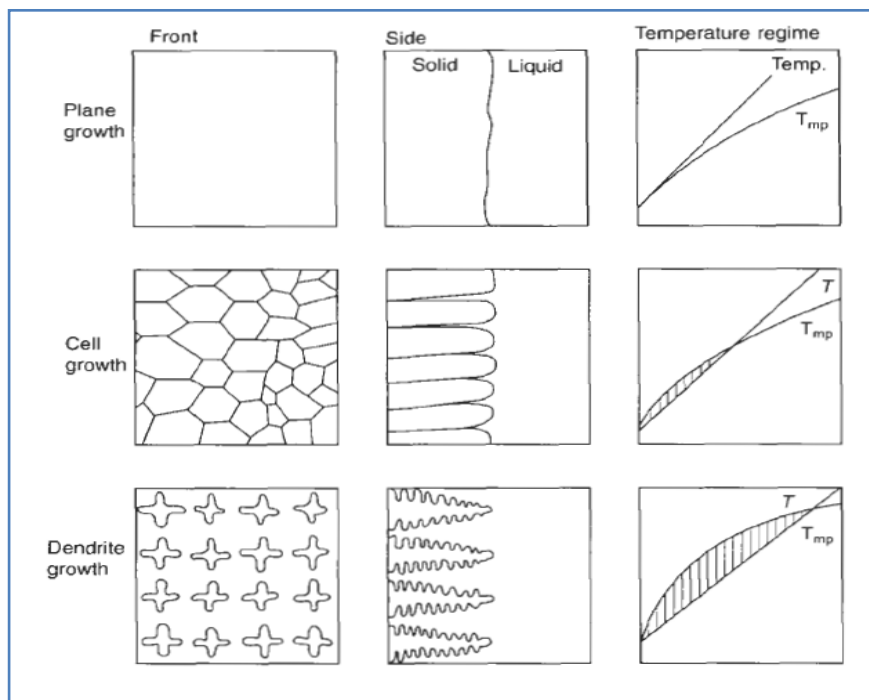


Figure 1.13 - Transition de morphologie de croissance (interface) de planaire (lisse) à cellulaire à dendritique lorsque le *sous-refroidissement constitutionnel* augmente (ce qui est équivalent à G_T/R_{gr} diminue) [photographie tirée de la référence Campbell, 2003].

Par conséquent nous aboutissons à l'important résultat suivant :

d- Résultat : existence de la zone pâteuse et caractères multiéchelles lors de solidification d'un alliage binaire de composition non-eutectique

Généralement dans la plupart des cas pratiques, la plupart des interfaces sont instables, [Kurtz & Fisher, 1984] et la structure inter faciale dendritique est la morphologie, souvent, rencontrée dans les alliages donnés par le diagramme de la (Fig. 1.6). **Par conséquent**, l'approche usuelle consiste à supposer l'existence d'une région macroscopique, dans laquelle de telle interface solide-liquide existe, (formée d'une phase solide consolidée, non transportée par le liquide) de la zone biphasée, cette région constitue la *zone pâteuse* de l'alliage (Fig.1.14), au cours de sa solidification. Cette région, séparant ainsi les régions : *liquide* pur et *solide* (Fig. 1.14), est alors classiquement assimilée à un milieu poreux, saturé par un liquide multi- composants [Beckermann & Viskanta, 1993 ; Bousquet-Mélou, 2001]. En outre, cette zone double- phase, est supposée, constituée du liquide et d'un ensemble de gains (*dendrites*) *colonnaires*, ou de *grains* (*dendrites*) *équiaxes* (Fig. 1.14). Le liquide de la zone pâteuse est appelé *liquide inter dendritique*. Les dendrites présentent des branches (bras) primaires, caractérisées par l'espacement primaire (λ_1), et des branches (bras) secondaires, caractérisées par l'espacement dendritique secondaire (λ_2). Le processus de solidification est ainsi appelé « directionnel dendritique » (Fig.1.14).

Cette hypothèse permet d'identifié ainsi le caractère multi-échelle de phénomènes de solidifications.

Il est nécessaire de distinguer les échelles microscopique et macroscopique.

- L'échelle microscopique est celle des microstructures dendritiques. Elle peut être représentée par les espacements primaire (λ_1) ou secondaire (λ_2) de dendrites (Fig.1.14b et tableau 1), qui sont respectivement de l'ordre de la centaine et de la dizaine de micromètres.

- L'échelle *macroscopique* (représentée par la longueur L ou H sur la Fig.1.14a et tableau 1 qui a la dimension caractéristique des volumes solidifiés (pièces moulées), généralement elle est de l'ordre d'une dizaine, ou centaine de centimètres, voire, des mètres.

1.2 Définition des différentes échelles du problème et contexte de ce travail

Dans la littérature, le caractère multiéchelles des phénomènes de solidification est identifié [Beckermann & Viskanta, 1993]. Ce caractère met en évidence, ainsi, de multiples d'échelles, telles que celle de l'atome, des interfaces, du grain ou du domaine. Le Tableau 1 et la Fig.1.14) résument ces échelles et les phénomènes physiques considérés lors d'un changement de phase liquide-solide.

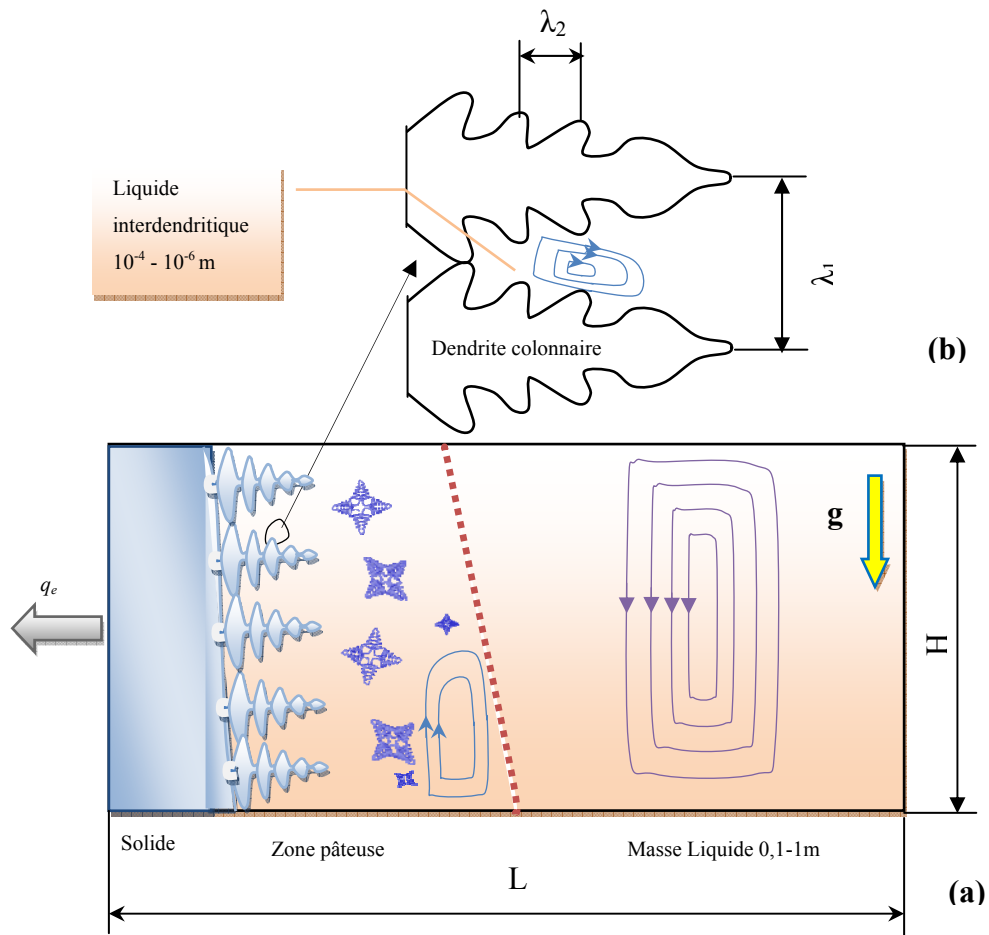


Figure 1.14 - Caractère multiéchelles de solidification directionnelle dendritique (a) l'échelle macroscopique et (b) échelle méso-microscopique (au niveau de l'interface/grain dendritique)

1.2.1 Contexte du travail présenté

L'**objectif** principal, de l'**étude présentée**, est la description des *échanges de chaleur et masse (soluté)*, qui se font généralement en deux échelles d'espace nettement séparées (microscopique et macroscopique (Fig.1.14 et tableau 1)).

-Les phénomènes macroscopiques de transport (les échanges) de : masse, quantité de mouvement et (convection et diffusion de chaleur et soluté) ; et

-les échanges inter faciaux de chaleur et de soluté (convection et diffusion) (échanges locaux ou microscopique)

Dans cette étude, l'*échelle microscopique* peut être représentée par les *espacements* (λ_1) ou (λ_2) de *dendrites* (Fig. 1.14b). L'*échelle macroscopique est celle du système de moulage* (représentée par la longueur L sur la Fig. 1.14a). Elle est ainsi caractéristique des variations des grandeurs physiques de phase (grandeurs moyennes), telles que les fractions volumiques (ou fraction massique) solide et liquide, vitesse, enthalpie (température) et concentration, définies dans des volumes élémentaires représentatifs V.E.R. d'un mélange (Fig. 1.14b) (Chapitres 2 et 3).

Ces *échanges de chaleur et de soluté (convectifs et diffusifs)* se font généralement dans les zones suivantes.

➤ **Zone pâteuse :**

Comme la figure 1.14 le montre la zone pâteuse est le lieu d'un écoulement, provoqué par les différents *sous-refroidissements (surfusions)* (*thermique* G_T et *solutal* G_c à l'interface $z=0$), discutés auparavant, d'un *fluide inter dendritique*.

En fait dans cette région il existe des couplages importants entre différents phénomènes, caractérisés par des *échelles de temps et d'espace* distinctes. Par exemple, comme il est discuté précédemment, la différence de solubilité de soluté, dans les phases solide et liquide et la *diffusion massique du soluté* est à l'origine de la *micro ségrégation* (distribution non uniforme de soluté à l'échelle des cristaux) et de l'écoulement du liquide *inter dendritique* produit par *refusion* de certaines branches dendritiques secondaires peut conduire à une *redistribution de soluté* à l'échelle du système, ou *macro ségrégation* [Flemings, 1974].

Tableau 1 - Échelles et phénomènes de solidification [Beckermann & Viskanta, 1993]

Échelle de solidification	Phénomènes considérés
(a) échelle de système (macroscopique)	- Phénomènes de transport de masse, mouvement, chaleur et soluté, taux de refroidissement, évolution de chaleur latente, modèles de grains, macro ségrégation, porosité et changement de volume.
(b) échelle de grains (microscopique)	- Cristaux colonnaires et équiaxes, chaleur latente, transferts locaux de chaleur et soluté, trainée interfaciale, espacement et grossissement.
(c) échelle interfaciale (méso-microscopique)	- Instabilités inter faciales, capillarité, équilibre local, sous-refroidissement et mouvement de sommet (<i>tip</i>) de dendrite
(d) échelle atomique (nano)	- Nucléation, structure de l'interface (facettée, non-facettée), cinétique d'attachement atomique.

La présence, d'*effets capillaires* liés à la courbure et d'*attachement d'atomes*, conduit à une modification des températures d'équilibre aux interfaces solide-liquide (comme il est discuté précédemment) et influence par conséquent les *échanges de chaleur* et de *masse* aux échelles microscopiques et macroscopiques. Soulignons que ces *effets capillaires* et d'*attachement d'atomes* sont en général négligés comme nous le faisons ici.

➤ **Phase liquide :**

Comme il est montré sur la (Fig.1.14a) la *zone liquide* (dite aussi fonte « *melt* » ou la *masse liquide* « *bulk liquid* ») est le lieu d'un écoulement fluide (dit de convection) provoqué généralement macroscopiquement par le flux de chaleur externe q_e imposé au système (*conditions de refroidissement*) (aux *frontières* du système). *En fait*, ce refroidissement provoque des gradients de température et de concentration (G_T et G_c) origines du mouvement convective dans le liquide.

En réalité, comme c'était le cas du *mouvement convectif local* du fluide inter dendritique de la zone pâteuse, dans la zone liquide, les gradients thermiques résultent des *conditions de refroidissement extérieures* imposées au système aussi bien que de l'évolution de la *chaleur latente* dans la région pâteuse. Par contre, les gradients de concentration de soluté sont provoqués par le rejection sélective de soluté à l'interface (à cause de la *différence* dans les *solubilités de soluté* dans chaque phase (Fig.1.6) et du transport de soluté rejeté par *diffusion* et *convection* dans la région liquide.

Il faut souligner que la **convection du liquide** peut résulter, en outre, de différents phénomènes, tels que la contraction « *shrinkage* » au cours du changement de phase, ou le mouvement de grains équiaxes pour un régime équiaxe de solidification. Généralement elle a une multitude d'origines [Incropera, 1997] :

(i) les gradients de masse volumique dus aux gradients macroscopiques de température et concentration extérieurement imposés (par la *condition de refroidissement* « q_e ») ;

(ii) actions d'agents externes ;

(iii) gradients dus aux tensions de surface, ou

(iv) actions externes de forces de volume telles que : champs magnétiques, forces rotationnelle ou écoulements imposés forcés, sur les gradients de densité volumique.

Seules les **première (i)** et **quatrième (iv)** cas sont considérées dans cette thèse.

Les effets de la convection sont à la fois multiples et importants. Le tableau 2 résume les différentes causes (de la cause (i)) et conséquences de convection dans les phases liquide et pâteuse.

➤ **Une bonne modélisation de la convection s'impose :**

Pour toutes ces raisons, il est important de décrire, aussi bien que possible, les phénomènes de transferts au sein de la zone pâteuse et liquide. Un meilleur discernement de

ces phénomènes et de leurs interactions est en effet nécessaire. En particulier une bonne modélisation à grande échelle nécessite de bien modéliser les phénomènes à l'échelle inférieure.

1.2.2 Phénomène de convection à modéliser

Le schéma de la figure 19 illustre les différents phénomènes de solidification considérés par l'étude :

1.2.2.1 Dans la zone pâteuse (transport local convectif et diffusif de chaleur et soluté)

Les différents phénomènes intervenant dans la zone pâteuse lors d'une solidification dendritique directionnelle d'un alliage binaire sont :

1. La redistribution de soluté (lors d'un changement de phase par diffusion) et notion de micro ségrégation & macro ségrégation :

Pour une *solidification dendritique* d'un alliage comme il est indiqué sur le diagramme de phase (Fig. 1.6), la création d'un cristal solide (α) à partir d'une *fonte* crée un changement local de composition, qui est due à la condition d'équilibre entre les deux phases (équation (1.4)). Cette différence entre les contenus en soluté entre les phases solide et liquide est connue comme la *redistribution de soluté* ou *ségrégation*, [Brody & Flemings, 1966 ; Flemings & Nereo, 1967], qui a un rôle important sur la *structure finale* de moulage aussi bien que sur les *fractions volumiques* des phases. La redistribution de soluté à l'interface solide-liquide est disponible à travers le coefficient de partage, κ_p (équation (1.5)). (Rappelons que ce paramètre décrit la différence dans la composition à l'interface solide-liquide, en *croissance*, (lorsqu'un équilibre local est établi) et sous des *conditions normales de solidification*).

Dans la littérature, il est identifié que la *ségrégation de soluté* à l'interface solide-liquide cause l'établissement d'un *gradient de concentration* G_c , donné par l'équation (1.22), dans les phases liquide et solide (à une échelle locale microscopique), et, dans la présence du

mouvement convectif du *fluide inter dendritique* (dans la zone pâteuse), mène à des inhomogénéités compositionnelles à grandes échelles, [Flemings, 1974 ; Rappaz & Voller, 1990 ; Beckermann & Viskanta, 1993 ; Beckermann & Wang, 1995].

En réalité, la *ségrégation* est généralement mesurée dans l'*état solide* d'un système d'alliage binaire initialement homogène. Elle est désignée comme une « *macro ségrégation* » lorsqu'elle est mesurée à l'échelle du système finale : le lingot du moulage. En outre, la *ségrégation* peut être mesurée entre les *grains dendritiques* ou à l'échelle de la *branches dendritique* et elle est désignée comme « *micro ségrégation* ». En outre, la *macro ségrégation* est une fonction de l'écoulement de fluide (*convection*) et du mouvement de grains.

Tableau 2- Écoulements et causes de convection.

Lieu de convection	Causes	conséquences
Convection dans la phase liquide (<i>masse liquide</i>)	<ul style="list-style-type: none"> - Gradients de température et concentration externes imposés au système ; - évolution de chaleur latente ; - transport de soluté rejeté par diffusion et convection 	Écoulement de convection thermosolutale causant la macro ségrégation.
Convection dans la phase pâteuse (<i>du fluide inter dendritique</i> formé par le phénomène de refusion de branches secondaires)	<ul style="list-style-type: none"> - Gradients de température et concentration (développés à l'interface) ; - chaleur latente ; - Rejection et diffusion de chaleur et soluté aux sommets dendritiques ; - Refusion des bras dendritique etc. 	Le partage de soluté causant la micro ségrégation au niveau local et le mouvement convectif conduit à la macro ségrégation.

Remarque 1.1. Les modèles usuels de calcul de micro ségrégation sont fournis en chapitre 2.

2- Phénomènes de grossissement de branches primaires et Refoulement de la fonte à travers la zone pâteuse

Grossissement de branches dendritiques primaires origine du fluide inter dendritique :

Le grossissement « coarsening » des branches dendritiques primaires, d'espacement λ_1 , est produit par la *refusion* « remelting » ou à la *striction* (contraction) de certaines des branches dendritiques secondaires (*i.e.* branches secondaires d'espacement λ_2) pendant la solidification [Flemings, 1974].

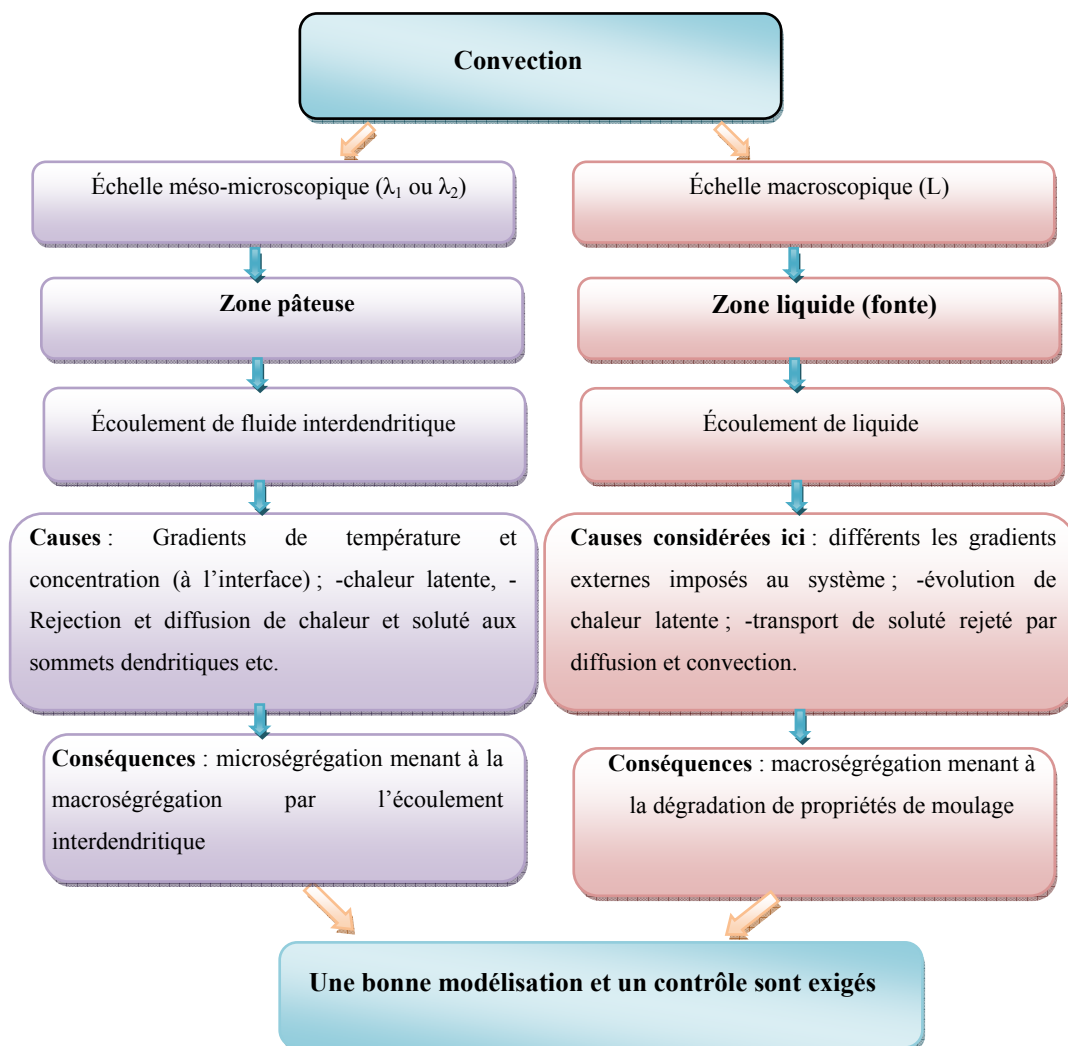


Figure 1.15 - Phénomènes de convection à modéliser, dans la présente étude, lors d'une solidification directionnelle dendritique d'un alliage binaire.

Par conséquent, le *fluide inter dendritique* (un mélange de branches solides *refondues* à une concentration inférieure et le liquide environnant à une concentration plus élevée), nouvellement produit dû à la *refusion*, provoque un écoulement de *fluide convectif local*, qui conduit à la *macro ségrégation* finale.

Phénomène de refoulement de la fonte à travers la zone pâteuse :

Dans une solidification dendritique, le phénomène du *grossissement* des branches dendritiques primaires peut également affecter, de manière significative, le procédé de *redistribution de soluté* lors d'un processus de solidification de *non-équilibre*. Dans ce contexte, il est noté qu'une *interface* solide-liquide de morphologie dendritique *colonnaire* typique de solidification dendritique d'alliage (Fig.1.6) implique des longs *chemins inter dendritiques* qui peuvent permettre le *refoulement* de la fonte à travers la *zone pâteuse*. Cependant, en raison de ce *grossissement*, la position de cette interface se déplace également, en *échelle microscopique*, pendant que la solidification s'effectue.

3-Écoulement fluide à travers la région pâteuse (Calcul de la perméabilité dans la zone pâteuse)

La (Fig.1.14a) présente une solidification dendritique d'un alliage binaire si l'hypothèse est faite que la région pâteuse est un milieu poreux. En outre, lorsque le mouvement de grains est négligé et que par conséquent la phase solide est fixée (Fig.1.14a), la zone pâteuse peut être considérée comme un *squelette* de dendrites à travers lequel le métal liquide s'écoule (Fig.1.14). Ce qui peut être représenté par un écoulement dans un milieu poreux [Felicelli et al. 1991 ; Kämpfer, 2002]. Un tel écoulement est régi par la loi de Darcy [Kämpfer, 2002], qui postule que la vitesse moyenne (\mathbf{v}) est linéaire par rapport au gradient de pression (∇p). Pour la situation où la phase solide est fixée (on parle de solidification dite *statique*, voir chapitre 3), nous avons $\mathbf{v} = g_l \mathbf{v}_l$ et la loi de Darcy s'écrit comme suit :

$$g_l \mathbf{v}_l = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (1.26)$$

où K est la perméabilité, μ la viscosité, et g_l représente la fraction volume de liquide.

Plusieurs travaux expérimentaux ont été consacrés à la validation de la loi de Darcy dans la solidification d'alliage [Piwonka & Flemings, 1966] par exemple.

Il faut noter que pour inclure et étudier les effets de la gravité (\mathbf{g}) sur l'écoulement inter dendritique, un terme de gravité est rajouté à la loi de Darcy qui s'écrit ainsi [Mehrabian et al. 1970 ; Kämpfer, 2002] :

$$g_l \mathbf{v}_l = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho_l \mathbf{g}) \quad (1.27)$$

où ρ_l est la masse volumique du liquide.

Calcul de la perméabilité de la zone pâteuse

L'équation (1.28) montre que l'écoulement de fluide inter dendritique (de vitesse $\mathbf{v} = g_l \mathbf{v}_l$) dépend du paramètre de perméabilité K , lui-même fonction de la *forme des dendrites* (et par conséquent de la *fraction volumique* de solide (g_s)) et de leurs orientations.

[Bhat et al. 1994] ont étudiés numériquement l'influence de l'*orientation* des dendrites sur l'écoulement liquide normal aux branches primaires des dendrites. Ils ont conclu que, pour des petites fractions, la dépendance à l'orientation est faible et peut être négligée. Ce qui est le cas dans la région où la *macro ségrégation* induite par la flottabilité, car le mouvement relatif entre le solide et liquide est grand pour les fractions solide faibles (voir chapitre 3).

En ce qui concerne l'influence de la forme des dendrites sur la perméabilité, différents modèles d'écoulement dans un milieu poreux peuvent être appliqués [Prescott & Incropera 1996a ; Scheidegger, 1974 ; Carman, 1939 ; Kämpfer, 2002]. L'un de ces modèles, (utilisé chapitre 3 de cette étude), est fondé sur la théorie de *Kozeny & Carman*. Qui postule que : la perméabilité s'exprime comme une fonction de la surface spécifique du milieu poreux. Si A_0 désigne la surface spécifique, définie comme la surface solide exposée au fluide par unité de volume de solide, alors, la relation de Carman-Kozeny s'écrit :

$$K = \frac{1}{5A_0^2} \frac{g_l^3}{(1-g_l)^2} \quad (1.28)$$

S'il est supposé que la surface spécifique du solide est égale à celle de sphères uniformes avec des diamètres égaux à l'espacement de la branche dendritique *secondaire*, il est obtenu [Kämpfer, 2002] :

$$A_0 = \frac{4\pi(\lambda_2/2)^2}{4/(3\pi(\lambda_2/2)^3)} = \frac{6}{\lambda_2} \quad (1.29)$$

et l'équation (1.29) devient :

$$K = \frac{\lambda_2^2 g_l^3}{180(1-g_l)^2} \quad (1.30)$$

Il est à noter que la fiabilité des modèles de perméabilité est significativement limitée par le manque de données expérimentales. Néanmoins ce modèle (1.30) est validé expérimentalement pour des fractions volumiques de solide élevées. Ce qui justifie son utilisation au chapitre 3 de l'étude présentée où le calcul de la viscosité dans la zone pâteuse est effectué comme si celle-ci était un milieu poreux.

La littérature donne d'autres modèles de perméabilité. Les modèles de perméabilité *isotrope* et *anisotrope* sont distingués. Ainsi le modèle de perméabilité *anisotrope* de [Felicelli et al. 1997]. Ce modèle estime la perméabilité *anisotrope*, obtenue expérimentalement et à partir d'une analyse de régression sur la solidification directionnelle des alliages binaires [Felicelli et al. 1997] telle que :

$$K_x(\varepsilon) = K_y(\varepsilon) = \begin{cases} 1,09 \times 10^{-3} \varepsilon^{3,32} \lambda_1^2 & \varepsilon \leq 0,65 \\ 4,04 \times 10^{-6} [\varepsilon/(1-\varepsilon)]^{6,7336} \lambda_1^2 & 0,65 < \varepsilon \leq 0,75 \\ (-6,49 \times 10^{-2} + 5,43 \times 10^{-2} [\varepsilon/(1-\varepsilon)]^{0,25}) \lambda_1^2 & 0,75 < \varepsilon \leq 1 \end{cases}$$

et (1.31)

$$K_z(\varepsilon) = \begin{cases} 3,75 \times 10^{-4} \varepsilon^2 \lambda_1^2 & \varepsilon \leq 0,65 \\ 2,05 \times 10^{-7} [\varepsilon/(1-\varepsilon)]^{10,739} \lambda_1^2 & 0,65 < \varepsilon \leq 0,75 \\ 0,074 (\log(1-\varepsilon)^{-1} - 1,49 + 2(1-\varepsilon) - 0,5(1-\varepsilon)^2) \lambda_1^2 & 0,75 < \varepsilon \leq 1 \end{cases}$$

où $\mathbf{K}(\varepsilon) = (K_x(\varepsilon), K_y(\varepsilon), K_z(\varepsilon))^T$ est le tenseur de perméabilité anisotrope dans les directions spatiale (x, y, z) et ε représente ici g_l (fraction volumique de liquide).

1.2.2.2 Dans la zone liquide (écoulement de convection naturelle thermo solutale)

Puisque le centre d'intérêt de cette étude est focalisé sur le cas où « (i) les gradients de masse volumique dus aux gradients macroscopiques de température et concentration provoqués (par le flux de chaleur externe « q_e » imposé au système) » sont considérées comme seule cause de la convection de la fonte. En conséquence, en l'absence de force de volume externe (telle que la force de Laplace, due à un champ magnétique appliqué), seuls ces gradients (macroscopiques) de température et concentration seront considérés. Par conséquent le contrôle de *transport de masse, quantité de mouvement, chaleur et soluté*, dans la zone liquide, est régi par le *taux de refroidissement initial* donné par l'équation (1.2).

1.2.2.2.1 Origine de la convection naturelle due aux gradients macroscopiques imposés au système

Nous avons déjà illustré, que lors d'une solidification d'un alliage binaire (Fig. 1.6), la structure de l'interface solide-liquide prend, généralement, la morphologie de *dendrite*, qui rejette du soluté et de la chaleur dans la *zone pâteuse* et les couches limites de diffusion thermique et solutale (δ_T et δ_c), développées, en avant, de l'interface dendritique (front de solidification). Ainsi, la fonte dans la *zone liquide* entre en interaction avec la *zone pâteuse* et ses couches limites de diffusion thermique et massique conduisant à une situation où les *gradients macroscopiques* de température et concentration en soluté (dus au flux externe q_e) jouent des rôles significatifs.

Des gradients de masse volumique sont ainsi générés par ces deux gradients et ils conduisent à un écoulement de fluide, dans la fonte (zone liquide), en raison de la flottabilité thermique et solutale dans la région liquide, provoquant la convection naturelle dite *thermo solutale* (ou double-diffusion). En outre, comme dans le cas de *l'écoulement convectif local* dans la zone pâteuse et dans la zone liquide, le soluté rejeté (à partir des sommets de dendrites), est redistribué par diffusion sur une échelle locale (microscopique), c'est le

phénomène de *micro ségrégation*. En outre, la convection naturelle thermo solutale a pour conséquence une variation de la composition de la macrostructure solidifiée, à l'échelle de la pièce solidifiée, due au transport de soluté rejeté par l'écoulement de fluide, c'est le phénomène de *macro ségrégation*.

1.2.2.2.2 Conséquences de la convection thermosolutale (du liquide et zone pâteuse)

La convection thermosolutale a de multiples effets sur la structure, et ainsi, les propriétés physiques, chimiques et mécaniques du moulage solidifié. Ces effets sont généralement :

➤ *Effets macroscopiques (dus aux interactions entre l'écoulement local dans la zone pâteuse et l'écoulement dans la masse liquide)*

La convection naturelle thermosolutale (double-diffusive) durant un processus de solidification affecte considérablement les produits solidifiés. La principale conséquence, à une échelle macroscopique, de convection est la *macro ségrégation* qui est un défaut qui nuit à la qualité des pièces solidifiées.

*En réalité, le mouvement convectif local de fluide inter dendritique, produit par la refusion des branches secondaires de dendrites, (ce dernier est alors riche en soluté dans la zone pâteuse) est couplé à la convection dans la fonte, ce couplage est la principale cause des inhomogénéités compositionnelles dans les produits finaux. Ainsi, il peut apparaître dans la pièce solidifiée de larges zones dans lesquelles la concentration en soluté est significativement plus grande ou plus petites que la composition nominale prévue. Ces zones sont souvent désignées ségrégats (*segregates*) (types A ou V voir Fig.2) ou canaux ségrégés (*freckles*) et le phénomène par lesquels ils sont produits est désigné comme *macro ségrégation* [Incropera 1997 ; Beckermann, 2008]. En outre, cette convection est à l'origine de certains autres défauts dans la fabrication des alliages tels que : microporosité, canaux (*channels*), ou veines sombres (*hot tears*) [Prescott & Incropera, 1996 ; Asta et al, 2009].*

Il est connu, que les transports macroscopiques de chaleur et soluté, induits par l'écoulement inter dendritique, peuvent modifier le *taux de solidification* d'une manière importante [Huppert, 1990 ; Worster, 1991 ; 1986 ; Goyeau et al. 1997 ; Bousquet-Mélou, 2001]. Ce qui conduit à des effets de convection, à *échelle microscopiques*.

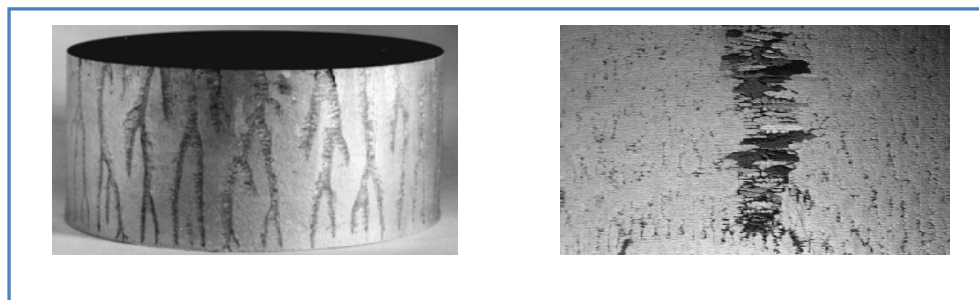
Des exemples réels de phénomènes de macro ségrégation sont présentés dans la figure 1.16.

➤ *Effets microscopiques de la convection*

1- l'écoulement *inter dendritique* affecte la microstructure de l'interface solide-liquide évoluant à travers des changements dans le *taux de refroidissement* et la *concentration en soluté*.

2- l'écoulement *inter dendritique* a un effet majeur, sur la morphologie des dendrites (colonnaires et équiaxes) et la transition morphologique « CTE » (colonnaire – équiaxe), en particulier, il peut être responsable d'une répartition non uniforme de grains [Bousquet-Mélou, 2001], influencer l'orientation des dendrites colonnaires, ou l'apparition des transitions colonnaires/ équiaxes [Rappaz, 1989 ; Roux 2005].

3-la micro ségrégation (*échanges massiques inter faciaux*) qui est créée à l'origine par la diffusion, cependant, la *microstructure de l'interface* et la *concentration en soluté* sont affectées par l'écoulement inter dendritique, la *micro ségrégation* est influencée par cet écoulement, comme il est illustré dans la section précédente.



(a)

(b)

Figure 1.16 - Défauts de macroscopique dans les moulages créés par la convection : (a) Canaux ségrégés (*freckles*) dans un lingot de moulage [Beckermann, 2008] ; (b) Vue rapprochée d'un canal ségrégé dans une aube en super- alliage en Nickel [photographies tirées des références Beckermann, 2000 ; 2008]

1.2.2.3 Modèles de l'écoulement de convection en « double diffusion »

Jusqu'à présent a été considéré, ici, le cas d'une solidification directionnelle dendritique (comme il est illustré en Fig.1.14) d'un alliage de diagramme binaire (Fig.1.6) avec un

refroidissement appliqué latéralement. Toutefois, dans la pratique, il peut y avoir des refroidissements à partir du bas ou du haut. Néanmoins le premier cas est le plus présent dans la pratique (comme nous avons déjà illustré dans les méthodes de solidification discutée auparavant).

1. Cas de refroidissement latéral (moulage conventionnel)

Le cas de refroidissement latéral d'une fonte demande une attention particulière. En raison du fait que, les gradients horizontaux de température et de composition (G_T et G_c) sont en interaction avec *l'écoulement flottable*, principalement vertical, du *fluide libéré* (interdendritique dans la zone pâteuse) (Fig.1.17a). En outre, si le *liquide interdendritique* dans la région pâteuse est *enrichi par l'espèce* (constituant de l'alliage) **la plus légère**, pendant que le solide se précipite, une inversion de densité est créée. Une telle inversion correspond au dégagement d'un *fluide moins dense* qui tend à induire un *mouvement ascendant* du liquide (écoulement conduit par *flottabilité solutale*). D'autre part, le refroidissement à travers l'interface peut conduire à un fluide, plus froid et plus dense, *en bas* (écoulement conduit par *flottabilité thermique*) (Fig. 1.17a). Ainsi, une convection naturelle thermosolutale double-diffusive instable peut s'amorcer [Incropera, 1997 ; Beckermann et al, 1991].

Pour cette configuration, de façon générale trois situations spécifiques peuvent apparaître, selon les rôles joués par les forces de flottabilité thermique et solutale.

(a)-Si le *fluide rejeté* sur le *front solidification* (interface solide-liquide) est **plus dense** que la *fonte* originale, il tend à faciliter *l'écoulement descendant* induit par *flottabilité thermique* d'un liquide, plus froid et plus lourd, le long du *front* (interface) de solidification.

(b)- si le fluide rejeté est moins dense, les effets solutaux de flottabilité peuvent s'opposer aux effets thermiques en termes de guidage de l'écoulement de fluide.

2. Refroidissement depuis le bas :

Dans le cas où une *fonte* est refroidie par *le bas* (Fig. 1.17b), la couche liquide est toujours thermiquement stable et par conséquent aucun écoulement, de *flottabilité thermique*, ne se produit. De plus, dans le cas où le système rejeterait une espèce **plus dense** sur le front de solidification (*interface*), ce qui conduit à une situation où les champs thermique et de concentration sont stables et les mouvements **convectifs sont totalement absents**.

La figure 1.17 illustre et résume les variations de masses volumiques « $\Delta\rho$ », dues aux gradients (thermique et solutale), induisant l'écoulement à travers le liquide pour différentes configurations de refroidissement imposé :

- **Solidification latérale** : les modèles de la convection thermosolutale double-diffusive sont observées ((Fig.1.17a).
- **Solidification verticale, (du bas vers le haut)** : deux situations sont possibles :
 - si $\Delta\rho \cdot g > 0$ la situation est stable (Fig.1.17b) ;
 - si $\Delta\rho \cdot g < 0$, la solidification est instable et les défauts dites canaux ségrégués « *freckles* » peuvent se former ((Fig.1.17c).

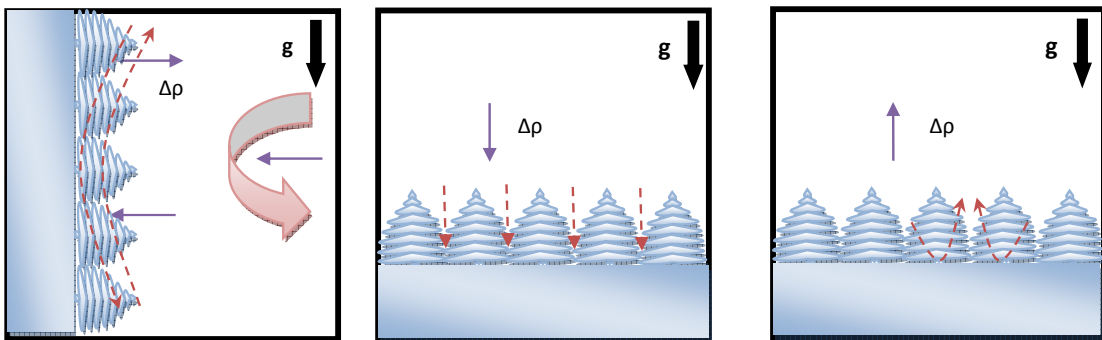


Figure 1.17 - variations de la masse volumique dues aux gradients thermique et solutale dans la phase liquide induisant l'écoulement de convection.

3. Refroidissement par le haut (convection naturelle de Rayleigh-Bénard)

Si le fluide est refroidi par le haut, la situation peut devenir thermiquement instable, quand le gradient thermique vertical dépasse une valeur critique, puisque la situation est équivalente à l'imposition d'un gradient thermique vertical décroissant vers le haut (et qui s'oppose ainsi à la direction de la gravité). De plus, les gradients solutaux sont susceptibles également d'être mis en jeu, puisqu'il y a redistribution simultanée de soluté qui est rejeté pendant le procédé de solidification lui-même. Ainsi, un type de convection double-diffusif dit de *Rayleigh-Bénard* peut se produire si le fluide est refroidi par le haut.

En conclusion, la convection double-diffusive ne conduit pas à une situation unique, puisqu'il existe des cas où les gradients solutaux peuvent aussi bien faciliter ou que s'opposer aux gradients thermiques [Incropera, 1997 ; Beckermann et al, 1991 ; Gu & Beckermann, 1999 ;

Neilson & Incropera, 1991 ; Schneider et al, 1997]. Un cas commun à toutes ces situations est l'apparition des *instabilités* convectives [Worster, 1997] qui peuvent être assez fortes, et induisent un début de la *turbulence*. Ces *instabilités* peuvent nuire à la qualité des produits de solidification [Katz & Worster, 2008] et elles doivent être évitées par une maîtrise de l'écoulement convectif, en diminuant, voire supprimant, la convection naturelle *double-diffusive*. Ce qui est possible par les procédures de *stabilisation* et de contrôle qui sont très souvent l'application des *champs magnétiques* [Prescott & Incropera, 1995 ; Prescott et al, 1996] ou bien encore la solidification en microgravité [Ma & Walker, 1996].

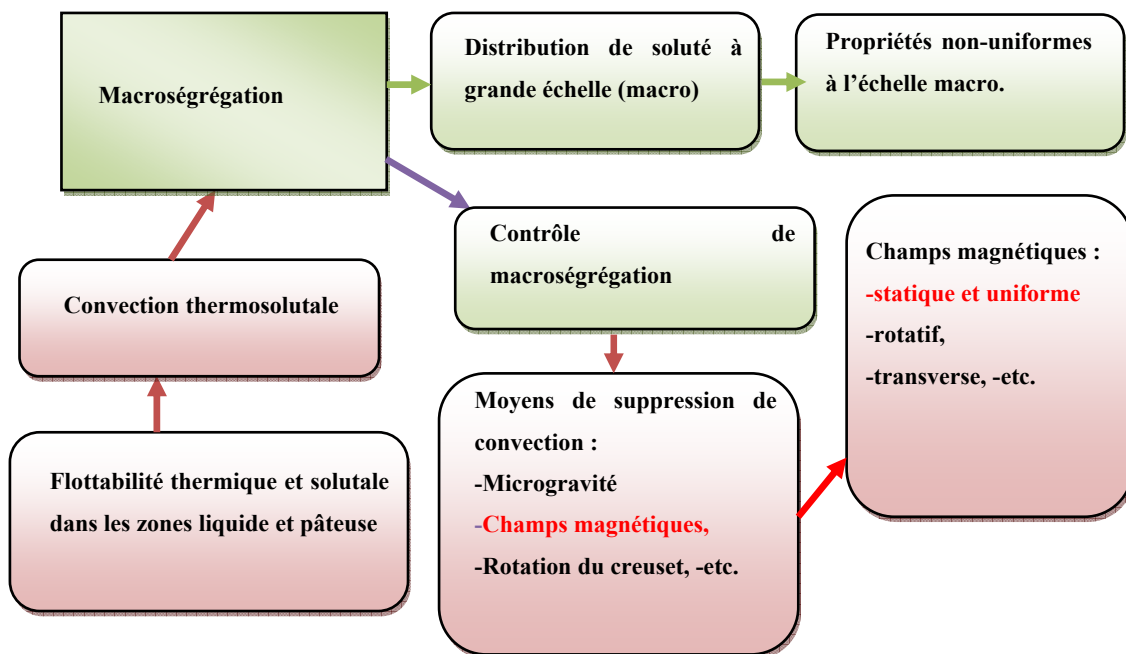


Figure 1.18 - Les causes de macro ségrégation et les méthodes de contrôle en solidification d'alliages et croissance cristalline de monocristaux

Il faut encore noter que pour les métaux et solutions aqueuses, les forces centrifuges induites par les systèmes de rotation peuvent être utilisés pour modifier significativement le mouvement du fluide.

La figure 1.18 montre les différents effets de convection lors d'un processus de changement de phase (solidification d'alliage et croissance de monocristaux) et les principales possibilités des contrôles existants.

1.2.3 Contrôle de l'écoulement de convection par champ magnétique (*Stabilisation de l'écoulement convectif*)

1. Application de champs magnétiques en solidification d'alliages binaires et croissance cristalline de monocristaux

Pour compenser ou affaiblir, voire supprimer la convection *thermosolutale*, des forces externes peuvent être appliquées pour réduire ou éliminer la macro ségrégation. Par exemple, pour les *alliages métalliques*, qui sont des *conducteurs électriques*, les *champs magnétiques* sont utilisés pour supprimer ou affaiblir, en fournissant les forces de Laplace parfois abusivement dites de **Lorentz** [Thess et al, 2007 ; Hunt et Moreau, 1976 ; Moreau, 1999] qui permettent d'opposer le mouvement transversal du fluide aux *vecteurs de champ magnétique*. En réalité, en plus de la *force de Laplace*, une *force de Kelvin*, qui dépend de la *susceptibilité magnétique*, peut apparaître dans le cas des *fontes conductrices*. Notons que dans le cas d'une *fonte non-conductrice*, seule la *force de Kelvin* est présente. Cette étude considère des fontes d'alliages binaires (*conducteurs électriques*) et cette force est ignorée.

Dans le domaine de la **croissance cristalline** (comme c'était le cas dans la solidification des alliages binaires) la *macro ségrégation*, dépend fortement de la nature de l'écoulement de fluide dans le liquide. Les écoulements résultent de la *convection naturelle* induite par la *flottabilité* et sont inévitables dans tous les systèmes *non-capillaires* de *croissance cristalline* tels que par exemples ceux présentés dans [Kim & Brown, 1991 ; Thompson & Szekely 1988]. Ainsi le contrôle de l'écoulement de fluide dans ces systèmes est l'un des premiers objectifs. Dans ce domaine l'utilisation des **champs magnétiques** est, une méthode prometteuse pour inhiber la convection en cours de la croissance liquide des semi-conducteurs.

2. Le processus de base

Le processus d'interaction entre un *champ magnétique* et métal ou/un semi-conducteur fondu (qui est *conducteur électrique*) implique que « *des courants électriques* » sont générés par le mouvement convectif de la charge électrique produite en présence d'un champ magnétique. Cet écoulement (*courant électrique*) crée une *force de Laplace* opposée réduisant, ainsi, la vitesse de l'écoulement de la *fonte*. Depuis presque quatre décennies,

l'utilité des champs magnétiques appliqués dans la croissance cristalline à partir d'une *fonte* est identifiée. Le fond de l'interaction entre les champs magnétiques et la convection est discuté pour la première fois dans [6-10]. Le chapitre 2 de cette thèse illustre la modélisation mathématique de champs magnétiques.

Remarque 1.2. Notons, que les champs magnétiques glissants «TMF» permettent un *brassage vigoureux* de la *fonte* [Zaïdat, 2005]. Des champs magnétiques tournants (RMF) [Volz et al 2005] peuvent être appliqués. Cependant, dans cette étude c'est un *champ magnétique statique et uniforme* qui est considéré.

L'Étude présentée:

Le but de cette thèse est de contribuer à la compréhension de l'effet d'amortissement « *damping* » d'un champ magnétique statique et uniforme appliqué à l'écoulement convectif thermosolutal :

Avec l'application de ce champ magnétique, l'étude consiste ainsi à l'examen d'un procédé directionnel de solidification d'alliage binaire « *conducteur électrique* » dans lequel la convection dans le liquide est induite par l'action combinée de la flottabilité (convection thermosolutale) aussi bien que des *forces de Laplace* dues à un champ magnétique externe (*convection électromagnétique*).

L'effet d'amortissement des champs magnétiques a été largement étudié dans la littérature pour de différents types et conditions de solidification ou de croissance cristalline. Le chapitre 2 en donne un aperçu.

1.3 Convection dans l'espace tridimensionnelle

1.3.1 Effet de la prise en compte de l'espace tridimensionnalité sur un processus de changement de phase

Les trois dimensions de l'espace doivent être prises en compte, quand la solidification s'effectue dans une cavité dont les dimensions caractéristiques, sont du même ordre de grandeurs. Ainsi dans une cavité cubique contenant un milieu poreux et soumise à des gradients horizontaux, opposés, de température et de concentration [Sezai & Mohamad,

1999], ont indiqué que l'écoulement est strictement tridimensionnel pour une gamme étendue de paramètres. Si, en outre, ces écoulements sont accompagnés de changement de phase (solidification), la présence d'une interface mobile lors de la solidification est un véritable défi.

Dans la littérature, des études pertinentes ont été entreprises dans les domaines de solidification d'alliage binaire et de croissance cristalline de monocristaux. Ces études illustrent les effets *indésirables* liés à un écoulement tridimensionnel sur la macro ségrégation finale. Celui-ci provoque généralement une dissymétrie, ce qui induit une non-uniformité de concentration ce qui nuit à la qualité des cristaux produits. Une analyse bibliographique de travaux illustrant ces effets est présentée en chapitre 2.

1.3.2 Phénomène de bifurcation en convection 3D (sans changement de phase)

Dans la plupart des processus de croissance cristalline comme par exemple la méthode de *Bridgman* (Fig.4a), l'interface avance dans une direction parallèle au vecteur de gravité. Par conséquent le gradient de masse volumique dans la *fonte-solution* est parallèle à la gravité et la convection s'ensuit lorsque la flottabilité vainc les effets visqueux. L'initialisation de l'instabilité convective, comme dans le cas de la convection de Rayleigh-Bénard, est caractérisée par le nombre de Rayleigh (voir chapitres 2 et 6).

Si la configuration de Bridgman de la Fig.1.4a est inversée, le *liquide* se trouve, ainsi, chauffé latéralement et par dessous et a un comportement non-linéaire très complexe. Pour des valeurs critiques des paramètres de contrôle, l'écoulement convectif dans la *fonte* devient fréquemment instable et *bifurque* à partir d'un état stationnaire (stable) vers un autre état stationnaire ou instable. Ces valeurs critiques sont appelées bifurcations. La bifurcation est ainsi un changement structural dans l'écoulement pour des valeurs critiques des paramètres de contrôle et elle joue un rôle important dans le développement du chaos. En outre, les instabilités de bifurcation dans les écoulements de *fonte* conduisent à l'apparition des *effets d'oscillation* de température 3-D et des structures *non-symétriques* d'écoulement, qui peuvent conduire à des inhomogénéités dans la structure des cristaux en croissance, et affectent la qualité de ces cristaux, [Müller & Ostrogorsky 1994].

Le problème de bifurcation dans les écoulements convectifs a été identifié dans les travaux expérimentaux de [Hurle, 1966] où il est montré que les oscillations de l'écoulement convectif créent des *striations* (défauts très connues) dans les cristaux. Ainsi, le problème de l'initialisation de l'instabilité oscillatoire des écoulements stationnaires convectifs est d'un intérêt scientifique majeur et a été largement étudiée. Par exemple, [Impey et al. 1991] ont utilisé les techniques de la théorie de bifurcation pour analyser les formes possibles de l'écoulement 2-D stationnaire induit par les forces de flottabilité solutale dans un mélange binaire dilué au cours de sa solidification verticale. Ils axés sur le rôle d'un confinement latéral dans la détermination des natures d'écoulement qui peuvent se manifester dans la fonte. [Gelfgat et al. 1999a] ont entrepris une étude paramétrique des états stationnaires multiples, leur instabilité, l'initialisation de l'instabilité oscillatoire et quelques régimes supercritiques instationnaires de l'écoulement convectif d'un fluide de Prandtl ($Pr = 0,015$) dans des cavités rectangulaires chauffées latéralement. En outre, une étude de la perte de symétrie centrale (*central symmetry breaking*) bifurcation et la stabilité des états non-symétriques de convection dans des cavités 2-D chauffées latéralement a été entreprise aussi par [Gelfgat et al. 1999b]. Des prédictions en deux et trois dimensions pour les différents modes de l'instabilité de Rayleigh-Bénard ont été effectuées par [Gelfgat, 1999]. De plus, la limite de la stabilité critique pour l'initialisation de la convection naturelle dans les écoulements 2D et la valeur de seuil pour la perte de symétrie ont été identifiés par [El Ganaoui & Bontoux, 1998].

Dans un travail récent, [Bennacer et al. 2006] ont présenté des prédictions 3-D pour une configuration de Bridgman inversée, l'instabilité de l'écoulement de fluide et les transitions aux régimes instationnaires ont été analysées. Ils ont montré que le type de bifurcation peut changer lorsque un paramètre de contrôle, à savoir le nombre de Rayleigh, est variable. [Sheu et al. 2007] ont considéré la même configuration et ils ont étendu l'étude à l'analyse des états multiples de la topologie et des bifurcations de l'écoulement fluide.

En chapitre 5 de cette étude une analyse numérique est consacrée au caractère 3D des écoulements convectifs à faibles nombre de Prandtl et focalisée sur le phénomène de perte de symétrie qui produit quelques instabilités dans l'écoulement et qui par conséquent perturbent la forme de l'interface solide/liquide et la distribution du dopant.

En outre, cette étude (chapitre 5) considère la possibilité de stabilisation de l'écoulement convectif au moyen de l'application d'un champ magnétique.

La littérature est très riche sur l'utilisation des champs magnétiques dans le domaine de solidification, la croissance cristalline et les écoulements sans changement de phase (par voies numérique ou expérimentale). Ces études ont dressées une variété de cas impliquant l'application des champs magnétiques dans : la stabilité de l'écoulement ; la suppression d'écoulement ; la stabilité de l'interface et les taux de croissance. Par exemple, l'effet des champs magnétiques appliqués aux structures de l'écoulement ; la forme de l'interface de croissance ; et le taux de croissance dans les techniques de croissance cristalline à partir d'une solution ou d'une fonte se trouvent dans les travaux de Dost et al. : [Dost et Lent (2007), Dost et Okano (2007), Liu et al (2003), Sheibani et al, (2003), Liu et al, (2004), Kumar et al, (2007), Yildiz et Dost (2007) et Armour et al, (2008)]. Les effets d'un champ magnétique sur l'instabilité et l'amortissement électromagnétique dans différents écoulements ont été rapporté par : [Hurle et al. (1974) ; Hof et al. (2003) ; Okada et Ozoe (1992) ; Piazza et Ciofalo (2002) ; Gelfgat et al, (2001) ; Dennis et Dulikravich (2002)]. L'amortissement électromagnétique des écoulements convectifs a été étudié numériquement et expérimentalement pour des écoulements dans des cavités 2D rectangulaires (exemple dans : [Hurle et al. (1974) ; Hof et al. (2003)], et dans des configurations 3-D (comme dans : [Okada & Ozoe (1992) ; Piazza & Ciofalo (2002)]).

L'effet d'un champ magnétique sur la bifurcation (perte de symétrie) en 3-D des écoulements convectifs initialement stationnaires et symétriques a été étudié dans [Gelfgat et al, (2001) ; Dennis et Dulikravich (2002) ; et Touihri, et al, (1999)]. La géométrie considérée dans ces études était cylindrique et les conditions aux limites de température considérées correspondent au problème classique de Rayleigh-Bénard. Cependant, la stabilisation électromagnétique des écoulements convectifs symétriques dans des géométries rectangulaires avec des conditions aux limites de température plus compliquées, comme celles considérées dans la présente étude, n'a pas été suffisamment étudiée. Ce qui justifie la reprise de cette étude au chapitre 5.

Chapitre 2 - Éléments de la théorie de ségrégation et état de l'art de modélisation de convection durant un processus à changement phase - Illustration de l'importance d'un champ magnétique

2.1 Introduction

Dans le chapitre 1 nous avons montré que la convection est la cause principale de la macro ségrégation, sans présenter de modèles mathématiques. Ce chapitre illustre des éléments de la théorie de ségrégation en des alliages et monocristaux. Une attention particulière est axée sur la macro ségrégation associée à l'écoulement convectif de fluide lors de solidification d'alliages binaires. Un état de l'art de la modélisation de convection est présenté.

En fin de chapitre l'attention est focalisée sur l'intérêt d'un champ magnétique appliqué pour réduire la convection et par conséquent la ségrégation associée.

2.2 Redistribution de soluté lors de solidification

Comme il est illustré en chapitre 1, tous les alliages métalliques contiennent des éléments de soluté qui sont distribués aléatoirement au cours de la solidification. La distribution de composition chimique variable au niveau microscopique dans la microstructure, comme les dendrites et grains, est référée *micro ségrégation*. La variation sur un niveau macroscopique est appelée *macro ségrégation*. Ces ségrégations détériorent généralement les propriétés physiques et chimiques des moulages, elles doivent donc être minimisées.

2.2.1 Solidification en condition d'équilibre

Il est indiqué, en section (1.2.2.1), que les éléments de soluté en alliages sont redistribués durant le processus de solidification en sorte que le potentiel chimique soit égal dans les

phases liquide et solide [Flemings, 1974]. La solidification s'effectue en **condition d'équilibre**, les compositions de soluté dans le solide C_s et le liquide C_l varient le long des lignes *solidus* et *liquidus* respectivement (Fig. 8). Le rapport C_s/C_l est référé au coefficient de partage κ_p (équation 1.5).

En **condition d'équilibre**, la composition de liquide et solide donnée par :

$$\frac{C_l}{C_0} = \frac{1}{(1 - (1 - \kappa_p)f_s)} \quad (\text{règle d'un bras de levier}) \quad (2.1)$$

où C_0 est la composition initiale d'alliage et f_s la fraction massique de solide et par :

$$C_s = \kappa_p C_l$$

Le modèle de micro ségrégation donné par l'équation (2.1), est celui de la règle de bras de levier (ou équation d'équilibre). Il est supposé une *diffusion complète* dans le liquide et solide. Les concentrations dans les deux phases sont ainsi toujours égales aux concentrations d'équilibre à l'interface solide-liquide.

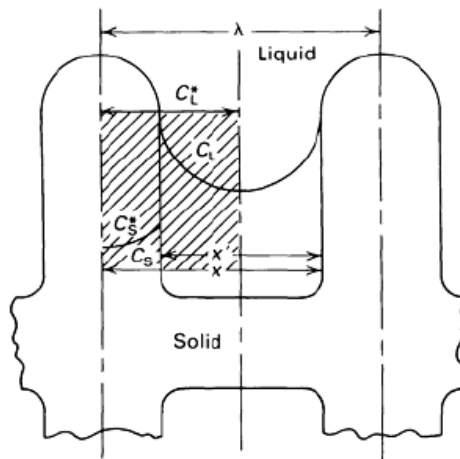


Figure 2.1 - la distribution de soluté dans un élément de volume (aire hachurée) entre les dendrites [photographie tirée de la référence [ASM Volume 15, 1992](#)].

2.2.2 Solidification en non-équilibre

Si la redistribution de soluté dans un élément de volume entre les dendrites de forme de plaque, comme il est montré en Fig. 2.1, est considérée et si le *sous-refroidissement (solotal)* à

l'interface solide-liquide est négligeable (*condition d'équilibre local*) avec l'hypothèse d'absence d'écoulement net de soluté à travers l'élément de volume, la composition liquide peut être calculée comme suit :

1- Dans le cas de $D_s = 0$ et $D_l = \infty$ (indiquant l'absence de diffusion dans le solide et un mélange complet dans le liquide), avec D_s et D_l qui sont les coefficients de diffusion respectivement dans le solide et liquide, l'équation (2.2), qui est appelée l'équation de Scheil, est retenue pour chaque morphologie de solide [Gulliver 1913 ; Scheil & Metallkd, 1942].

$$\frac{C_l}{C_0} = (1 - f_s)^{\kappa_p - 1} \quad (\text{équation de Scheil}) \quad (2.2)$$

et,
$$\frac{C_s}{C_0} = \kappa_p (1 - f_s)^{\kappa_p - 1}$$

2- Dans le cas de $D_s \neq 0$ (diffusion finie dans le solide) et $D_l = \infty$ (mélange complet dans le liquide), les équations (2.3, 2.5 et 2.6) ont été proposées [ASM Volume 15, 1992] :

$$\frac{C_l}{C_0} = (1 - \zeta f_s)^{(\kappa_p - 1)/\zeta} \quad (\text{équation de Brody- Flemings}) \quad (2.3)$$

où

$$\zeta = 1 - \frac{2C_{BD}\kappa_p}{1 + 2C_{BD}} \quad (2.4)$$

où C_{BD} est le coefficient de **rérodiffusion** « *Back-Diffusion* », dans la phase solide, donné par :

$$C_{BD} = \frac{4D_s t_f \kappa_p}{\lambda^2}$$

où t_f est le *temps local* de solidification [Kurtz & Fisher, 1984] et λ est l'espacement de branche dendritique (Fig.2.1).

Une solution plus précise et exacte pour ce modèle a été obtenue par [Kobayashi, 1985]. L'équation (2.3) dite de Brody-Flemings [Brody & Flemings, 1966] et une équation

semblable donnée par [Clyne & Kurz 1981] approchent la solution exacte si $f_s < 0,9$. L'équation (2.3) est applicable non seulement aux dendrites de forme *plaque* mais aussi aux dendrites *colonnaires* (Fig. 1.6) si $2C_{BD}$ dans l'équation (2.4) est doublée. Elle est aussi en agrément avec l'équation (2.1) pour D_s ou $C_{BD} > 1$ et avec l'équation (2.2) pour D_s ou $C_{BD} = 1$, respectivement. Néanmoins cette équation (2.3) n'est pas applicable pour $C_{BD} > 0,5$.

3- Il y en a une diffusion à l'état solide et le soluté s'accumule (s'entasse) en avant de l'interface solide-liquide (voir la discussion de la section 1.1.4.2.3). Une solution analytique pour ce cas réel a été obtenue.

Cependant, dans le cas où $D_s = 0$ et une couche limite de soluté contrôle le transport de soluté dans le liquide, un coefficient de partage effectif a été obtenue pour un élément de volume semi-infini et des conditions d'état stationnaire [Bolling & Tiller, 1961 ou Burton, Prim et Slichter, 1953] :

$$\kappa_{eff} = \frac{C_s^*}{C_0} = \frac{\kappa_p}{\kappa_p + (1 - \kappa_p) \exp(-R_{gr} \delta_c / D_l)} \quad (2.5)$$

où C_s^* est la composition solide à l'interface, R_{gr} est le taux de croissance de l'interface et δ_c est l'épaisseur de la couche limite en avant de l'interface (voir Fig.14).

Le coefficient κ_{eff} peut être utilisé pour κ_p dans l'équation de Scheil (2.2) ainsi elle s'écrit :

$$\frac{C_l}{C_0} = (1 - f_s)^{\kappa_{eff} - 1} \quad (2.6)$$

et $C_s = \kappa_{eff} C_l$

Remarque 2.1 : Il est remarqué que bien que l'équation (2.5) ne puisse pas être directement appliquée à la solidification dendritique *équiaxée*, cependant, elle est utilisée pour une compréhension de la formation de *micro ségrégation*. Davantage, elle est appliquée pour évaluer la *macro ségrégation* dans la *croissance de monocristal*.

2.3 Les phénomènes de micro ségrégation

Dans la pratique, la micro ségrégation est souvent évaluée par le *rapport de micro ségrégation*, qui est le rapport de la concentration maximale de soluté à sa concentration minimale après la solidification (C_{\max}/C_{\min}) [ASM Volume 15, 1992].

Bien que l'équation de Scheil (2.2) est souvent utilisée dans le cas de petit paramètre de *rérodiffusion* (C_{BD}) (par exemple pour les moulages d'alliage d'aluminium) et la règle de bras de levier (équation (2.1)) et l'équation de Brody- Flemings (2.3) sont utilisées dans le cas de C_{BD} élevé (par exemple, pour les moulages d'acier). Cependant, il n'est pas facile d'estimer la *micro ségrégation réelle* [ASM Volume 15, 1992], parce que les phénomènes réels sont très complexes et que la composition solide après la solidification ne peut pas être calculée par l'équation (2.3) si la diffusion solide finie n'est pas négligeable. Les aspects suivants doivent être considérés dans le choix du modèle de calcul de micro ségrégation :

Le mode et la structure de solidification.

La micro ségrégation varie avec l'historique de la croissance du solide. Par exemple, la micro ségrégation augmente souvent avec le *taux de refroidissement* (voir section 1.1.1) dans le cas de solidification dendritique *équiaxée*, mais elle diminue dans le cas de solidification unidirectionnelle (type Bridgman par exemple). Ce qui est parce que, dans le premier cas, la composition liquide est uniforme davantage dans le liquide inter dendritique et l'équation de Brody- Flemings (2.3) est applicable. Dans le dernier cas, le soluté s'accumule sur le sommet de dendrite et ne peut pas être négligé et l'équation telle que l'équation (2.5), qui considère que le soluté s'accumule en avant du sommet de dendrite et que la courbure de la dendrite, doit être utilisée.

La morphologie des dendrites et chemin de diffusion

Dans le cas où la diffusion à l'état solide n'est pas négligeable, le chemin de diffusion ou la morphologie du solide est très importante. Bien que l'équation de Brody- Flemings (2.3) puisse être appliquée à l'élément de volume pour un rang de dendrite primaire ou secondaire, la diffusion réelle s'effectue en 3D dans les deux dendrites. Par conséquent, un grand soin nécessaire pour déterminer l'espacement de la dendrite λ . Une méthode consiste à utiliser la

moyenne d'espacement des branches de dendrite primaire et secondaire $\lambda_{moy} = (\lambda_1 + \lambda_2)/2$ [Clyne & Kurz 1981]. L'équation (2.8) est aussi recommandée [Ohnaka, 1986].

$$\frac{C_l}{C_0} = (1 - \zeta_1 f_{s1})^{[(\kappa_{p1}-1)/\zeta_1]} \left\{ \frac{1 - \zeta_2 f_s}{1 - \zeta_1 f_{s1}} \right\}^{[(\kappa_{p2}-1)/\zeta_2]} \quad (2.8)$$

où les indices 1 et 2 sont utilisées pour l'état $f_s \leq f_{s1}$ et $f_s > f_{s1}$, respectivement. Ainsi, si le chemin de diffusion passe de la dendrite primaire à la dendrite secondaire pour la fraction solide f_{s1} , alors λ_1 et λ_2 , sont utilisées pour ζ_1 et ζ_2 , respectivement.

La transformation de phase solide (en alliages péritectiques)

Si une transformation de phase se produit au cours de la solidification, la micro ségrégation peut changer considérablement parce que le coefficient de partage d'équilibre varie avec la phase. Par exemple, le κ_p de phosphore dans les moulages d'acier est 0,13 en ferrite et 0,06 en austénite [ASM Volume 15, 1992].

Le grossissement ou refusion de branches de dendrite

Parce que le *grossissement* ou la *refusion* des branches de dendrites peuvent se produire durant la solidification (voir section 1.2.2.1), l'espacement de dendrite n'est pas constant et le solide *refondu* dilue la composition liquide, ce qui modifie la micro ségrégation.

Le mouvement de la phase liquide (convection)

Dans plusieurs cas, le liquide inter dendritique ne reste pas stationnaire mais s'écoule par la contraction de solidification ou par les convections thermosolutales (voir section 1.2.2.1), ce qui induit une modification des degrés de *micro ségrégation*.

La dépendance des coefficients de diffusion de température et concentration

Les propriétés physiques d'alliages telles que D_s et D_l sont, en réalité, dépendantes de la température et concentration. Le coefficient de diffusion peut varier d'un ordre de grandeur dans le cas d'un large intervalle de solidification, les deux valeurs doivent donc être rigoureusement maîtrisées.

Sous-refroidissement

En réalité, le *sous-refroidissement* à l'interface solide-liquide (c'est-à-dire au sommet de dendrite) existe. Cependant, il n'est pas un facteur qui affecte la *micro ségrégation* dans des processus typiques de solidification, à l'exception de solidification *unidirectionnelle* [ASM Volume 15, 1992].

Autres effets

Lorsqu'un gradient température très élevé existe (par exemple, en dessus de 40 K/mm), l'effet Soret, qui considère le transport de soluté induit par le gradient de température, devient un facteur qui influence la micro ségrégation [ASM Volume 15, 1992].

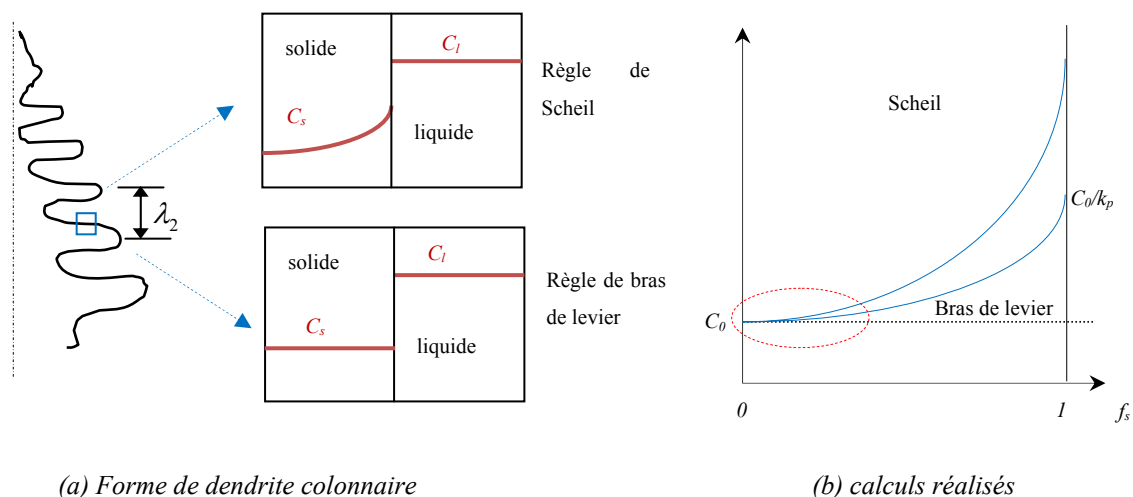


Figure 2.2 : Concentration de liquide en fonction de la fraction massique de solide pour les deux modèles de micro ségrégation présentés : celui de Scheil et le bras de levier. Au voisinage de $f_s = 0$, par conséquent proche des sommets de dendrite, les prédictions des deux modèles sont proches l'une de l'autre [calculs réalisés par Kämpfer, 2002].

Remarque 2.2. Comparaison entre la règle de bras de levier et équation de Scheil et choix du modèle de micro ségrégation adopté dans ce travail : Des calculs de la concentration liquide en fonction de la fraction solide ont été réalisés [Kämpfer, 2002] par les modèle de Scheil (2.2) et règle de levier (2.1) (Fig. 2.2), il est noté que seulement une petite différence existe près de $f_s = 0$. Ce travail considère la macro ségrégation induite par la convection thermosolutale, la prédiction de micro ségrégation la plus importante étant celle proche des sommets de dendrite où le fluide restant, peut pénétrer de la zone liquide dans la

zone pâteuse. La règle de bras de levier peut, ainsi, être considérée comme une approximation équivalente à l'équation de Scheil dans ce travail.

2.4 Les phénomènes de macro ségrégation

Nous avons vu au chapitre 1 que la macro ségrégation est créée principalement par le mouvement de liquide (convection thermosolutale) ce qui est le centre d'intérêt de ce travail. Néanmoins, il y en a d'autres causes de cette macro ségrégation. Dans le but d'une compréhension plus profonde de la formation de *macro ségrégation*, nous illustrons davantage ce phénomène par la suite.

Outre que le mouvement de liquide, la macro ségrégation est créée par le mouvement de solide, elle est caractérisée par une composition chimique différente de la composition moyenne. Les forces qui dirigent le mouvement liquide ou solide sont :

- La contraction de solidification,
- L'effet de gravité sur les différences de masse volumique créées par les variations de phases ou compositionnelle,
- Les forces externes centrifuge (de rotation) ou électromagnétique,
- Les formations de bulles de gaz,
- La déformation de phase solide due aux contraintes thermiques et pression statique,
- La force capillaire.

Généralement la macro ségrégation est évaluée [ASM Volume 15, 1992] par :

- La quantité de ségrégation (ΔC) : $\Delta C = C_{s\ moy} - C_0$
- Le taux ou indice de ségrégation : C_{\max}/C_{\min} ou $(C_{\max} - C_{\min})/C_0$
- Le degré de ségrégation (en pourcentage) : $100(C_{s\ moy}/C_0)$

où C_0 est la composition initiale d'alliage, $C_{s\ moy}$ est la composition moyenne de solide à l'emplacement mesuré, et (C_{\max} et C_{\min}) sont les compositions maximale et minimale, respectivement.

Comme nous avons vu en chapitre 1, la macro ségrégation est un phénomène très important intervenant dans de larges moulages et lingots et aussi représente un facteur à contrôler. **Dans la littérature**, une variété de types de macro ségrégation et leur mécanisme de formation sont décrites, par la suite, principalement pour le cas où $\kappa_p < 1$. Dans le cas où $\kappa_p > 1$, des résultats semblables mais inverse peuvent être obtenus.

2.4.1 Si le front de solidification est plan et lisse.

Lorsqu'un front de solidification plan se produit, comme dans la croissance d'un monocristal, le mécanisme de formation de *macro ségrégation* est plus simple et l'équation (2.6) peut être appliquée. Un schéma typique de la distribution de soluté est montré en Fig. 2.3. La composition solide de la portion initialement solidifiée est faible et a une valeur approximative de $\kappa_p C_0$, qui augmente graduellement avec le temps dû à la diffusion comme le soluté est poussé en avant, ce qui résulte, en une concentration élevée à la portion finalement solidifiée ou au centre de lingot. Cette ségrégation est appelée *ségrégation normale*. Comme il est montré à partir de l'équation (2.5), le *degré de ségrégation normale* augmente avec la diminution du taux de croissance (R_{gr}) ou l'épaisseur de couche limite de diffusion de soluté (δ_c), qui *diminue* avec l'augmentation de l'intensité de l'écoulement liquide.

Des changements supplémentaires dans le *taux de croissance* au cours de la solidification résultent en une *ségrégation* comme il est montré en Fig. 2.3. Si le taux de croissance augmente soudainement à partir de l'état stationnaire à un taux élevé, alors un *coefficient de partage effectif* large est réalisé, ce qui résulte en une concentration élevée que la composition moyenne, qui est appelée la *ségrégation positive*. Il est noté que la *ségrégation normale* est un type de *ségrégation positive*. En revanche, une diminution soudaine du taux de croissance résulte en une *bande pauvre* en soluté ou *ségrégation négative* [ASM Volume 15, 1992]. Dans chaque cas, il est essentiel de considérer l'écoulement de fluide et l'épaisseur de couche limite de diffusion de soluté (δ_c), qui est typiquement classée entre (0,1-1mm) pour la croissance d'un monocristal.

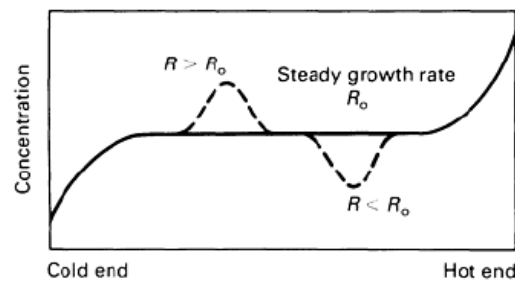


Fig. 2.3 : Distribution typique de soluté dans un front plan de solidification où R_{gr} est le taux de croissance [photographie tirée de la référence [ASM Volume 15, 1992](#)].

2.4.2 Ségrégation due à la gravité

Elle est créée par la *sédimentation* (dépôt) ou le *flottement en haut* de phases solide et liquide ayant une composition chimique différente de la valeur moyenne. Par exemple, la phase **initialement** solidifiée ou les dendrites, issus de fonte, se sédimentent au fond du système de moulage car elles sont de masse volumique plus élevée que celle du liquide. Ce phénomène peut être la source de *cône négatif*, qui s'est produit souvent dans de lingots d'acier, comme il est montré en Fig.2.4.

Par exemple dans les moulages d'acier, le liquide inter dendritique est souvent léger que la *masse liquide* et flotte en haut, ce qui résulte en *ségrégation positive* dans la partie supérieure du moulage. Bien que différents types de macro ségrégation sont créés par l'effet de gravité, le changement de concentration entre les parties supérieure et inférieure d'un moulage dû à l'effet simple de la gravité est appelé la *ségrégation de gravité*.

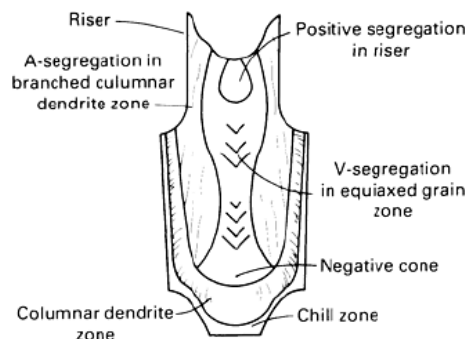


Figure 2.4 - Macro ségrégation typique observée en lingots d'acier [photographie tirée de la référence [ASM Volume 15, 1992](#)].

2.4.3 L'écoulement liquide inter dendritique induit les ségrégations dans la zone pâteuse.

Si seulement le liquide s'écoule dans région pâteuse, où un gradient de concentration existe (voir chapitre 1). L'équation (2.9) peut être obtenue par l'hypothèse de *condition d'équilibre local* et une pente de ligne *liquidus* constante (Fig.1.9) et en négligent l'effet de la courbure de dendrite (c'est-à-dire *sous-refroidissement de Gibbs-Thomson*) [Flemings, 1974] :

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = \left(\frac{1-\beta}{1-\kappa_p} \right) (1-f_s) \left[1 + A - \frac{u_n}{v_T} \right] \frac{1}{C_l} \frac{\partial C_l}{\partial t} \quad (2.9)$$

Cette équation est celle de *macro ségrégation*, qui découle de l'écoulement de liquide riche en soluté pour alimenter la solidification, elle est fondée sur le modèle de Scheil et la définition du paramètre de rétrécissement (*shrinkage*) $\beta = \frac{\rho_s - \rho_l}{\rho_s}$.

avec (ρ_s et ρ_l) représentent la masse volumique de solide et liquide, respectivement, u_n est la vitesse de l'écoulement normale aux isothermes et v_T est la vitesse d'isothermes (Fig.2.5) (qui peut être définie en utilisant l'équation (1.3) par $\dot{T} = v_T G_T$).

Dans cette équation, si $A = 0$ ce qui correspond à une diffusion nulle dans un solide et si :

$$A = \frac{\kappa_p f_s}{(1-\beta)(1-f_s)} \quad (2.10)$$

Ce qui correspond à une diffusion complète dans un solide.

Remarque 2.3. En chapitre 1, nous avons illustré qu'il est usuellement supposé que le fluide s'écoule suivant la loi de Darcy, qui est, $\mathbf{u}_l \propto K \nabla p / \mu f_l$ où \mathbf{u}_l est la vitesse du liquide inter dendritique (de décharge) ($\mathbf{u}_s = \mathbf{0}$), K est la perméabilité calculée (par exemple par le modèle de Poirier, 1997, équation (1.31), ou celui de Carman-Kozeny équation (1.30)), $f_l = (1 - f_s)$ la fraction de liquide, p la pression et μ la viscosité de liquide. À partir de la notation utilisée dans la figure 2.5 la vitesse de liquide inter dendritique est définie telle que $\mathbf{u}_l = (u_n, u_t)^T$.

1. Cas d'absence de l'écoulement de liquide et rétrécissement.

S'il est supposé qu'il n'y a pas de rétrécissement ($\beta = 0$) et pas d'écoulement relatif de fluide ($u_n = 0$), l'équation (2.9) est intégrée pour donner l'une ou l'autre d'équations d'équilibre (2.1) ou de Scheil (2.2) en dépendant sur le choix de A .

Par exemple, dans le cas de diffusion nulle dans le solide ($A = 0$), l'équation (2.9) est intégrée pour donner :

$$\frac{C_l}{C_0} = (1 - f_s)^{[(\kappa_p - 1)/\zeta]} \quad (2.11)$$

où $\zeta = (1 - \beta)(1 - u_n/v_T)$ et κ_p sont supposés constantes.

Les résultats suivants peuvent être déduits à partir de l'équation (2.11) :

- si $\zeta = 1$ ou si $u_n/v_T = -\beta/(1 - \beta)$, l'équation (2.11) est identique à l'équation (2.2) et la composition moyenne du solide est C_0 , qui signifie qu'aucune *macro ségrégation* n'est générée.
- si où $\zeta > 1$ ou si $u_n/v_T < -\beta/(1 - \beta)$, la composition de liquide C_l devient inférieure que la valeur calculée par l'équation (2.2), qui indique qu'une *ségrégation négative* peut être générée.
- si $0 < \zeta < 1$ ou si $1 > u_n/v_T > -\beta/(1 - \beta)$, une *macro ségrégation positive* peut se produire. Par exemple, si à la paroi d'un moule $u_n = 0$, ce qui implique une *ségrégation positive*.

2. Cas de présence de l'écoulement de liquide et contraction/rétrécissement.

S'il est supposé l'existence de l'écoulement de fluide (u_n non nulle) et de rétrécissement (β non nul). Il est distingué : les types de ségrégation suivants :

a- La ségrégation inverse due à l'écoulement inter dendritique lié à la contraction. La *ségrégation* est appelée *inverse* lorsque la concentration de soluté est élevée dans la portion

de moulage solidifiée en début du processus de solidification [Ohnaka & Matsumoto 1987]. Celle-ci est créée par l'écoulement inter dendritique *enrichi en soluté* dû à la **contraction** de solidification, qui est la force principale de d'orientation et à l'*augmentation* de la *masse volumique du liquide* en cours de *refroidissement*.

b- La ségrégation due à l'écoulement inter dendritique lié à la géométrie de moule. En outre, les changements en vitesse d'écoulement de liquide inter dendritiques (provoqué par changement de la géométrie de moule de solidification) peuvent créer la ségrégation, voir par exemple [Ohnaka & Matsumoto 1987].

c- La ségrégation due à l'écoulement inter dendritique lié au changement de masse volumique (convection thermosolutale). D'autre part, comme l'écoulement de fluide inter dendritique est aussi créé par le changement dans la masse volumique de liquide lié à la *redistribution de soluté* et le *refroidissement* (convection solutale et thermique) [Ohnaka & Matsumoto 1987]. Le chapitre 1 illustre des exemples de ces types de macro ségrégation créés par la convection thermosolutale.

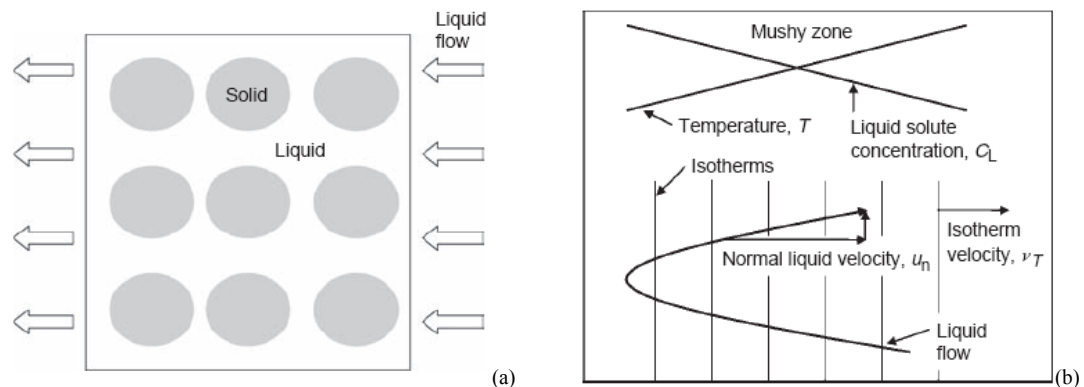


Figure 2.5 : Représentations schématiques : (a) liquide s'écoulant à travers un petit volume (élémentaire) à l'intérieur de la zone pâteuse. Les ovales gris représentent des coupes à travers les branches dendritiques. (b) de liquide s'écoulant à travers une zone pâteuse [photographie tirée de la référence Beckerman, 2008].

3 Cas de pénétration de l'écoulement de masse liquide dans la zone pâteuse.

a- Écoulement de la masse liquide et ségrégation négative. L'écoulement de masse liquide (dans la phase liquide) peut **pénétrer** dans la région pâteuse ou la *rangée de dendrites* et entraîne et balaye vers l'extérieur le liquide inter dendritique *riche en soluté*, ce qui résulte en une **ségrégation négative**. Ceci est appelé effet de lavage « *washing effect* » et est supposée

être le mécanisme primaire de la **bande blanche**, une **ségrégation négative** souvent observée dans les moulages continus utilisant un **brassage électromagnétique** [ASM Volume 15, 1992]. Quelques chercheurs prétendent que le mécanisme principal est le **changement de taux de croissance** dû au **brassage** [ASM Volume 15, 1992]. L'effet de lavage peut aussi être la cause de **ségrégation positive** ou **normale**.

b- Écoulement de la masse liquide et ségrégation de la ligne centrale. En moulage continu, le gonflement crée l'écoulement inter dendritique et il en résulte une faible **ségrégation positive** au centre de lingot [ASM Volume 15, 1992]. Ce qui est appelée **ségrégation de la ligne de centre**.

Remarque 2.4. La formation d'un grain de structure équiaxée par **brassage électromagnétique** (voir chapitre 1) ou autre méthodes peut considérablement diminuer la ségrégation parce que les deux solide et liquide sont libres de se déplacer. Dans ce cas, l'équation (2.9) n'est pas applicable.

2.4.4 Distribution inhomogène de solide et ségrégation de type canal.

Le solide n'est pas uniformément distribué et des poches liquides se forment souvent dans la région pâteuse en raison de la croissance préférentielle de quelques dendrites dues à des **agglomérations** de dendrites **équiaxées** de l'interface qui avance [ASM Volume 15, 1992]. Ces **poches de liquide** peuvent devenir une **semi-macro ségrégation** ou une **tache de ségrégation**, qui est une **ségrégation positive** de plusieurs centaines de microns en diamètre, souvent observée dans la région équiaxée de moulages continus d'aciers soumis à un **brassage électromagnétique**.

Cette distribution inhomogène de phase solide peut être à l'origine d'un **écoulement de canal préférentiel** car la résistance d'écoulement du canal connectant de telles poches de liquide est petite. Si le liquide s'écoule et si $u_n/v_T > (1 + A)$, $\partial f_s / \partial t$ devient négative dans l'équation (2.9). Ce qui signifie que la **refusion** se produit et que le **canal** élargit. Si des bulles sont formées dans le **canal**, elles accélèrent la vitesse du fluide, il en résulte un **élargissement du canal** (les pores observés après solidification sont souvent créés par la contraction à la solidification) ce qui est le mécanisme de la **ségrégation type canal**. Dans de larges lingots d'acier, des bandes comme de baguettes, enrichies en soluté, telle que de la forme « A » illustrée en (Fig.2.4), sont souvent observées, ce qui est appelé **ségrégation -A** (ou A-

ségrégates ou l'inverse de *ségrégation -V*) [ASM Volume 15, 1992]. Dans des lingots solidifiés *uni-directionnellement*, la *ségrégation type canal* est appelée *canal ségrégé* « *freckle* ».

Si le *canal préférentiel* est formé, le liquide riche en soluté flotte il en résulte une sévère *ségrégation positive* dans la partie supérieure ou inférieure du moulage.

Remarque 2.5. Parmi les méthodes qui peuvent être effectives dans la prévention de la *ségrégation de type canal* : nous pouvons citer le *brassage électromagnétique* pour former des grains équiaxés et pour obtenir une distribution solide uniforme et dense.

2.4.5 Le mouvement de la phase solide et la ségrégation.

Si des grains équiaxés sont formés ou si une dendrite colonnaire (issue de la fonte) s'est produite, le solide peut migrer par écoulement ou par contraction de solidification. Dans des lingots en acier longs avec de grain de structure équiaxée, par exemple, les régions *riches en soluté* en forme de V, qui consistent de bandes comme de baguettes tachées, apparaissent périodiquement ; celle-ci est appelée *V-ségrégation* (Fig.2.4). Dans ce cas, les grains équiaxés se déplacent en raison de la contraction de solidification et les faces de glissement, en forme de V, sont périodiquement formées par le mouvement viscoélastique des grains équiaxés [ASM Volume 15, 1992]. Dans le plan de glissement contenant un grain de structure détachée, la perméabilité est grande et les *écoulements de canaux préférentiels* peuvent être formés comme il est décrit dans le cas de la *A-ségrégation*. Il est noté que la *convection solutale* peut aussi résulter d'une ségrégation semblable, mais moins sévère [ASM Volume 15, 1992].

2.4.5. Force externe et ségrégation.

Si une force externe (par exemple une force électromagnétique) agit sur la région pâteuse où la fraction solide est élevée (par exemple, $f_s = 0,7$), alors les grains ou les dendrites s'ouvrent souvent et attirent le liquide inter dendritique, Il en résulte une *ségrégation positive*. Ce qui est appelé une guérison « *healing* » en forme de moulages et est appelée la *fissure interne* « *cracking* » dans les moulages continus. Si le liquide inter dendritique est insuffisant, une *veine sombre* « *hot tear* » se produit [ASM Volume 15, 1992].

2.5 Les macro ségrégations dues aux convections et leurs modélisations mathématiques

Une analyse de la section précédente montre que tous les types de *macro ségrégation* dans les moulages et lingots se forment, généralement, dans la zone pâteuse. Dans la plus part des cas, elle est le résultat de *l'écoulement* inter dendritique *lent et le plus faible*, principalement, dirigé par : la contraction de solidification, la géométrie du moule (rétrécissement/contraction) ; l'effet de gravité sur les différences de masse volumique créées par les variations de phases ou compositionnelle ; les forces externes (si elles sont appliquées), les formations de bulles de gaz, ou la déformation de phase solide due aux contraintes thermiques et pression statique. Dans quelques cas cet écoulement peut être le résultat du mouvement de solide dans les premières étapes de solidification [Flemings, 1974]. D'autre part, comme l'écoulement *rapide* et le *plus fort* de masse liquide peut pénétrer dans la zone pâteuse et rentre ainsi en interaction avec celle-ci. Par conséquent, la modélisation mathématique de ces écoulements de convection, à savoir dans les zones pâteuse et liquide, doit être considérée par la suite.

Remarque 2.6 (interaction de l'écoulement de masse liquide avec la zone pâteuse) : Bien que dans la littérature de la théorie de macro ségrégation, généralement, parmi les hypothèses principales faites est l'hypothèse que tous types de macro ségrégation se forment à l'intérieur de la zone pâteuse. Néanmoins, des expériences avec la solution NH₄Cl-H₂O ([Hellawell 1990]), ont suggéré que les modèles des *écoulements par canaux préférentiels* conduisent aux *canaux ségrégés* (une version de ségrégation type canal lorsque la solidification est *unidirectionnelle*) se créé dans une région située immédiatement en avant du front dendritique (c'est-à-dire proche de la ligne *liquidus* ce qui est peut être attribué à l'interaction de masse liquide avec la zone pâteuse).

2.5.1 Modélisation de l'écoulement de fluide dans la région pâteuse

Il est illustré, que l'équation (1.9) de macro ségrégation, due à l'écoulement de liquide riche en soluté, dérivée par [Flemings, 1974] est la plus utilisée. Dans cette équation, la vitesse de liquide inter dendritique est calculée, généralement, par la loi de Darcy. Il est noté que la loi de Darcy pour la simulation de l'écoulement dans la zone pâteuse et le calcul de la

perméabilité de cette zone (supposée comme un *squelette* de dendrites où le métal liquide s'écoule à travers (Fig.1.18a)) sont présentés en chapitre 1.

Calcul de la viscosité dans la zone pâteuse.

Le but de l'approche de perméabilité décrite en chapitre 1 est de modifier les équations classiques de Navier-Stokes par l'addition d'un terme de perméabilité tel que, pour des petites fractions *volumiques* de liquide (ou porosités g_l) et ainsi les petites perméabilités, les équations de l'écoulement fluide sont proches de la loi de Darcy, en revanche, pour $g_l = 1$, elles restent les équations classiques de Navier-Stokes, qui modélisent l'écoulement de masse liquide, dans la zone liquide. Si la perméabilité tend vers 0, la vitesse doit être maintenue à 0, puisque le solide est supposé fixe (voir la section 1.2.2.1). Pour la présentation de ces équations modifiées de l'écoulement fluide, le chapitre 3 illustre la dérivation de ces équations fondé sur une approche dite continue.

Addition de l'effet de la gravité sur l'écoulement de zone pâteuse.

Après les premiers modèles de l'écoulement fluide dû à l'*alimentation de solidification*, tel que la loi de Darcy ($\mathbf{u}_l \propto K \nabla p / \mu f_l$) par exemple, il devient apparent que la gravité, agissant sur le liquide de masse volumique variable, peut contribuer considérablement aux natures d'écoulement et macro ségrégations associées. [Mehrabian et al. 1970] ont décrits quantitativement les conditions sur lesquelles la convection (thermique et solutale) induite par la gravité devient importante. En outre, si les conditions critiques de l'écoulement sont atteintes (si $u_n/v_T > (1 + A)$ et $\partial f_s / \partial t < 0$) le phénomène de *refusion* peut se produire, ce qui résulte *des instabilités* de l'écoulement [Kämpfer, 2002] conduisant à la situation de la section 2.4.4.

Par conséquent, comme il est souligné en chapitre 1 (section 1.2.2.1) la loi de Darcy a été modifiée, [Mehrabian et al. 1970], pour inclure la gravité.

Force de guidage de flottabilité et approximation de Boussinesq.

L'écoulement fluide induit par la gravité est dû à de variations de masse volumique dans le liquide. Il est distingué deux contributions.

- Si la masse volumique dépend de la température, un coefficient de dilatation thermique doit être défini tel que :

$$\beta_T = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial T} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \quad (2.12a)$$

où V est un volume de référence, ρ la masse volumique et T la température. Il est noté que pour la plus part des alliages métalliques, la masse volumique augmente avec la diminution de température et ainsi $\beta_T > 0$.

- Comme la masse volumique dépend de la composition de soluté. Il est défini un coefficient de dilatation solutale

$$\beta_C = \frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial C_l} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial C_l} \quad (2.12b)$$

avec C_l est la composition de soluté dans le liquide.

Le coefficient β_C peut être positif ou négatif, selon que les éléments de soluté, qui peuvent être plus denses ou moins denses que ceux du solvant et sur le coefficient de partage κ_p , (qui peut être > 1 ou < 1).

Dans les calculs de l'écoulement de fluide, l'approximation de Boussinesq doit être utilisée et ρ_l doit dépendre sur la *température et fraction de soluté* à travers le terme source équations Navier-Stokes. Pour de valeurs fixes de référence (T_{ref} et $C_{l,ref}$) de température et concentration, respectivement, et avec $\rho_0 = \rho(T_{ref}, C_{l,ref})$, cette approximation s'écrit :

$$\rho_l = \rho_0 \left[1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \beta_C (C_l - C_{l,ref}) \right] \quad (2.13)$$

Celle-ci correspond donc à une linéarisation de ρ_l en fonction de T et C_l autour de (T_{ref} et $C_{l,ref}$).

Les forces de flottabilité thermique et solutale sont ainsi définies par : $F_{boy} = F_T + F_C$

$$F_{boy} = \rho_l g = \rho_0 g \left[\beta_T (T - T_{ref}) - \beta_C (C_l - C_{l,ref}) \right] \quad (2.14)$$

Si les forces de guidage thermique et solutale sont considérées (Fig.2.6). Du fait que les inhomogénéités solutales (gradients solutaux) sont initiées à l'intérieur de la zone pâteuse, la force de guidage solutale agit principalement dans cette région, où elle rentre en interaction avec la force thermique.

Selon le signe de β_C ($\beta_T > 0$), la flottabilité thermique et solutale peut s'amplifier ou se compenser l'une et l'autre. Dans le but de quantifier cette interaction le paramètre de flottabilité est souvent utilisé :

$$N_{boy} = \frac{\beta_C \Delta C}{\beta_T \Delta T} = \frac{\beta_C}{m_{pente} \beta_T} \quad (2.15)$$

où m_{pente} est la pente de la ligne de sur le diagramme d'équilibre de phase (Fig.1.9) (où le cas $\kappa_p < 1$ signifie que la pente est négative). Les cas suivants sont rencontrés (Fig. 2.6):

- $N_{boy} > 0$ alors les forces de flottabilité thermique et solutale s'adhèrent et s'amplifient ;
- $N_{boy} < 0$ alors les forces de flottabilité thermique et solutale se compensent.

En outre, le large $|N|$, la force de guidage la plus dominante est la force solutale.

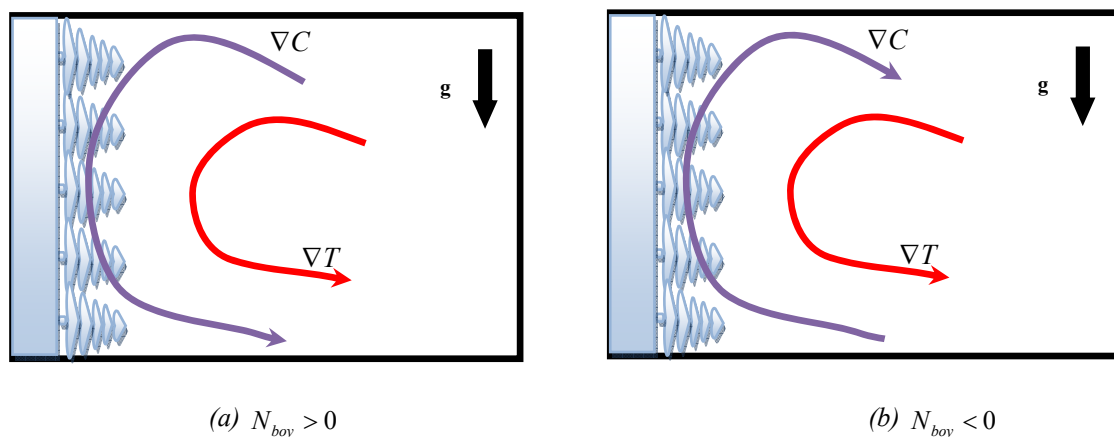


Figure 2.6 : Les forces de flottabilité thermique et solutale soient elles s'amplifient ou se compensent l'une et l'autre en fonction du signe du paramètre de flottabilité N_{boy} [Kämpfer, 2002].

Remarque 2.7. S'il est supposé que les masses volumiques de solide et liquide sont constantes et égales, ainsi $\rho_s = \rho_l = \rho$, ce qui implique que la fraction massique de solide et liquide, (f_s et f_l), sont égales à la fraction volumique de solide et liquide (g_s et g_l) respectivement : $f_s = g_s$ et $f_l = g_l$.

2.5.2 Modélisation de l'écoulement de masse liquide dans la région liquide

Les équations classiques de Navier-Stokes peuvent être utilisées pour la modélisation de l'écoulement de la masse liquide, dirigé par les flottabilités thermique et solutale, dans la phase liquide. Cet écoulement est conduit par les forces de flottabilité thermiques et solutale.

Remarque 2.8. Pour avoir un aperçu et d'illustrations des équations Navier-Stokes dans la section 2.8 ci-dessous il est illustré ces équations pour le problème de modélisation de convection (de phase liquide) en croissance cristalline des monocristaux.

Mais comment établir un couplage de deux écoulements (de zones pâteuse et liquide) et modéliser, ainsi, toutes phénomènes de convections et ségrégations associées par le même système d'équations en tenant compte de la présence de trois phases distinctes (solide, liquide et pâteuse) ? Ce qui représente, un défi pour la modélisation.

2.6 Défis pour la modélisation de convections et macro ségrégations associées

Des idées ont été développées pour surmonter les difficultés de telle modélisation.

2.6.1 La Première idée est de développer de techniques pour surmonter le problème multi-échelle

La variété des phénomènes de base, discutés auparavant, qui s'implique à la création de macro ségrégation, particulièrement due aux écoulements de liquides dans les zones pâteuse et liquide, et la complexité de leurs interactions font la modélisation mathématique un grand

défi. Même, lorsqu'on se limite à l'influence des écoulements induits par flottabilité (dans les zones pâteuse et liquide) sur la macro ségrégation, plusieurs difficultés se présentent, en particulier les suivantes :

- Les équations de conservation de masse, quantité de mouvement, énergie et soluté doivent être résolues de façon couplée, en tenant compte de la présence de plusieurs phases ;
- L'écoulement fluide se produit dans la masse fluide et dans une région étroite de la zone pâteuse très proche du *liquidus*.

Il est nécessaire de considérer deux échelles différentes : (a) la région relativement petite de la région pâteuse où le fluide immobile peut pénétrer et transporte le soluté plus loin et (b) la région liquide restante.

Les techniques suivantes ont été développées dans le but de surmonter ces problèmes :

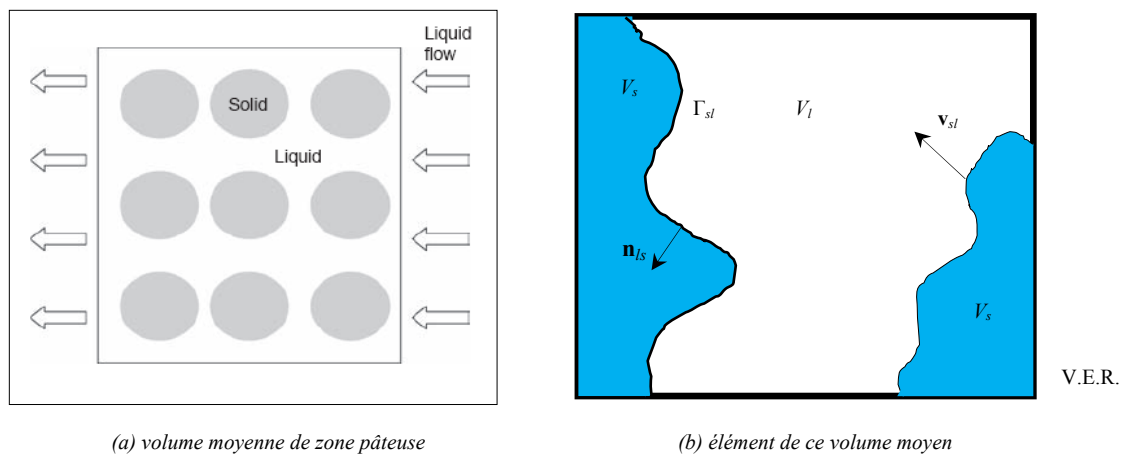


Figure 2.7 : (a) Illustration schématique d'un volume moyen à travers la zone pâteuse [Beckerman 2008]. (b) élément de ce volume moyen (ou volume élémentaire représentatif V.E.R.) contenant les phases solide et liquide occupant les volumes V_s et V_l , respectivement, l'interface solide-liquide (dont les frontières Γ_{sl}) avec sa vitesse $\mathbf{R}_{gr} \equiv \mathbf{v}_{sl}$ (supposée ici multidimensionnelle) et la normale sortante \mathbf{n}_{sl} sur Γ_{sl} par rapport à la région liquide [Kämpfer, 2002].

2.6.1.1 La technique de la moyenne volumique

Dû à la morphologie inter faciale complexe s'intervenant lors du processus de solidification dendritique d'un alliage (voir chapitre 1), il est souvent impossible de résoudre les équations de conservation sur une échelle microscopique. Une alternative possible pour surmonter cette difficulté est de dériver des modèles macroscopiques pour les phénomènes de

transport par moyennage (ou prise de la moyenne (*averaging*) des équations microscopiques sur un volume moyen de taille finie qui contient de liquide et solide à la fois. Ce volume (Fig.2.7a) est plus petit que le système mais large comparé à la taille caractéristique des structures interfaciales (ex. les espacements de branches primaire ou secondaire).

Concept général de la moyenne volumique des 'équations de conservation.

[Beckermann et Viskanta 1988] ont proposé un modèle utilisant la technique de *moyennage volumique*. [Ganesan et Poirier (1990)] ont pris ce modèle et le présente systématiquement. Le concept général de *moyennage* volumique est illustré comme suit [Ganesan & Poirier 1990 ; Kämpfer, 2002] :

Pour chaque phase $k = s, l$ (solide ou liquide) occupant l'espace de volume V_k , il est défini sa fonction indicatrice X_k par :

$$X_k(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in V_k \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.16)$$

Pour un *élément de volume moyen*, de volume V_0 , comme il est montré en figure 2.7b, , la fraction volumique de phase k est définie comme :

$$g_k = \frac{1}{V_0} \int_V X_k dV \quad (2.17)$$

Avec chaque *quantité microscopique* φ (ex. vitesse, enthalpie, fraction massique ou concentration), il est associé une *valeur moyenne* dans la phase k , notée $\langle \varphi_k \rangle$ et donnée par :

$$\langle \varphi_k \rangle = \frac{1}{V_0} \int_V \varphi X_k dV \quad (2.18)$$

et sa *moyenne volumique* globale est donc

$$\langle \varphi \rangle = \frac{1}{V_0} \int_V \varphi dV = \sum_{k=s,l} \langle \varphi_k \rangle \quad (2.19)$$

Si φ est la *vitesse du liquide inter dendritique*, sa *moyenne volumique* est nommée la *vitesse superficielle*.

La *moyenne volumique intrinsèque* de la quantité φ par rapport à la phase k est définie par :

$$\langle \varphi_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_V \varphi X_k dV = \frac{\langle \varphi_k \rangle}{g_k} \quad (2.20)$$

• **Par exemple.** L'équation de *conservation de masse* macroscopique peut être obtenue par le suivi de la procédure de [Ganesan & Poirier 1990] comme suit :

S'il est considéré l'équation de *conservation de masse microscopique* pour le liquide interdendritique :

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l) = 0 \quad (\text{microscopique}) \quad (2.21)$$

où \mathbf{v}_l est la vitesse microscopique de liquide. En multipliant l'équation (2.21) par $\frac{X_l}{V_0}$ et intégrant sur V_0 pour aboutir à :

$$\frac{1}{V_0} \int_V \frac{\partial \rho_l}{\partial t} X_l dV + \frac{1}{V_0} \int_V \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{v}_l) X_l dV = 0 \quad (2.22)$$

[Ganesan & Poirier 1990] ont appliqué à l'équation (2.22) deux théorèmes reliant la moyenne des dérivées (spatiale et temporelle) aux dérivées de la moyenne, ce qui conduit à :

$$\frac{\partial \langle \rho_l \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho_l \mathbf{v}_l \rangle) - \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_{sl}} \rho_l (\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_{sl}) \mathbf{n}_{sl} dS = 0 \quad (2.23a)$$

où \mathbf{v}_{sl} est la vitesse de l'interface (microscopique) (définie auparavant en chapitre 1 comme le taux de croissance R_{gr} (qui est unidimensionnel lorsque l'interface est lisse)), cependant, comme l'interface, n'est pas lisse elle est plutôt dendritique, et peut se déplacer dans toutes les directions, elle est ici représentée par un vecteur (Fig. 2.7b). \mathbf{n}_{sl} est la normale (sortante), à l'interface de frontière Γ_{sl} , dirigée vers la phase liquide (Fig. 2.7b).

De la même façon une dérivation d'une équation semblable pour la phase solide peut être obtenue :

$$\frac{\partial \langle \rho_s \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho_s \mathbf{v}_s \rangle) - \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_{sl}} \rho_s (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_{sl}) \mathbf{n}_{sl} dS = 0 \quad (2.23b)$$

L'addition des deux équations (2.23a et 2.23b) et notons que les deux intégrales de surfaces éliminent l'une et l'autre (la masse gagnée par le solide égale à la masse perdue par le liquide), ce qui conduit à :

$$\frac{\partial (\langle \rho_s \rangle + \langle \rho_l \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho_s \mathbf{v}_s \rangle + \langle \rho_l \mathbf{v}_l \rangle) = 0 \quad (2.24)$$

En utilisant la définition de $\langle \rho \rangle$ et supposant que le mouvement du solide est absent ($\langle \mathbf{v}_s \rangle = \mathbf{0}$ et par conséquent $\langle \mathbf{v}_l \rangle = \langle \mathbf{v} \rangle$) et que ρ_l est uniforme dans le volume moyen $\langle \rho_l \mathbf{v}_l \rangle = \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle$, on peut obtenir l'équation de conservation de masse macroscopique :

$$\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \langle \mathbf{v} \rangle) = 0 \quad (\text{macroscopique}) \quad (2.25)$$

où $\langle \mathbf{v} \rangle$ est la vitesse superficielle.

Dans le but de simplifier les notations des équations de conservation macroscopiques, les notations de la moyenne ($\langle \ \rangle$) sont souvent omises dans les présentations de équations dans la littérature.

Remarque 2.9. Il est noté qu'alors que les équations de conservation de masse, d'énergie et d'espèce la procédure de *moyennage* est faite sur les deux phases liquide et solide, l'équation de quantité de mouvement est moyennée seulement sur la phase liquide. Ce qui introduit une force de trainée naturelle du *squelette* solide sur la région inter dendritique liquide. Cette force doit être approximée par la loi de Darcy. La procédure de dérivation du système complet des équations de conservation obtenue par cette technique est disponible dans [Ni et Beckermann, 1991]. Nous ne présentons pas ici ce système, puisque il n'est pas choisi dans le cadre du présent travail.

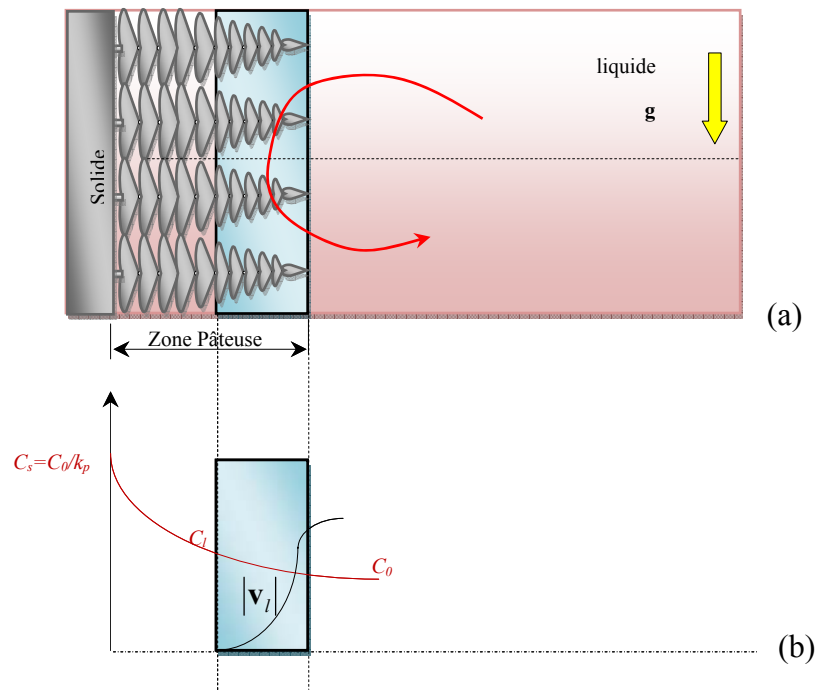


Figure 2.8- Les régions critiques durant un processus de solidification colonnaire par rapport à l'écoulement dirigé par la flottabilité et la macro ségrégation associées. (a) Il est distingué entre les régions (solide, pâteuse et liquide). (b) la zone critique où la vitesse relative de la phase liquide \mathbf{v}_l et le gradient de concentration dans le liquide ∇C_l sont différentes de zéro est une région étroite proche de *liquidus* [Kämpfer, 2002].

2.5.1.2 La méthode de décomposition de domaine

Cette méthode est fondée sur l'idée que le domaine global de modélisation pour la prédiction de la convection, et la macro ségrégation associée, à travers un alliage qui subit une solidification dendritique *colonnaire* se subdivise naturellement en trois régions : les régions solide, liquide et pâteuse figure 2.8(a). Dans le but de prédire correctement l'écoulement induit par flottabilité et la *macro ségrégation* associée, la méthode considère les points suivants :

- 1- Résoudre précisément la région, de zone pâteuse, proche de la température liquidus (Fig. 2.8(b)) où la vitesse relative de la phase liquide $\mathbf{v}_l \neq \mathbf{0}$ (écoulement dirigé par flottabilité) aussi bien que le gradient de concentration à travers le liquide $\nabla C_l \neq 0$ (due à la micro ségrégation).

2- Calculer l'écoulement de la masse liquide et le transport de soluté associé à travers la région liquide et cette région critique de la zone pâteuse.

La figure 1.8(b) est une vue approchée de la *région de zone pâteuse*, il se peut noter que la vitesse dans la zone pâteuse est non nulle seulement dans une région proche du liquidus [Kämpfer, 2002]. Cette région dite critique (où aussi $\nabla C_l \neq 0$) est, en fait, une bande étroite de la région pâteuse proche de la température liquidus où peut être l'écoulement de masse liquide peut pénétrer et entre en interaction avec cette dernière.

Nécessité de maillage non-uniforme. S'il est considéré qu'un maillage uniforme est appliqué aux deux régions (liquide et cette région étroite de zone pâteuse). Ce qui ne peut pas prédire d'une manière précise les différents gradients importants dans cette région critique. Par conséquent il faut un raffinement local de maillage dans cette région pour une meilleure prédiction.

Concept de la méthode de décomposition de domaine. L'idée de la méthode de décomposition de domaine est donc de résoudre les équations de l'écoulement fluide et de transport de soluté en utilisant les deux sous domaines avec leurs discrétisations associées (deux maillage différents):

- Le domaine de liquide où un maillage grossier en espace est défini ;
- La zone critique proche du *liquidus*, qui, pour simplicité, doit être nommée le domaine de zone pâteuse. Un maillage plus fin en espace est créé automatiquement dans cette région.

Le problème mathématique pour l'écoulement de fluide et le transport de soluté est par conséquent formulé dans une forme *multi-domaine*, qui doit permettre de résoudre itérativement le problème global suivant :

- Résoudre le sous-problème sur le maillage grossier dans le domaine liquide ;
- Sur le sous domaine d'interface, interpoler les champs calculés nouvellement à partir du maillage grossier vers celui fin.
- Résoudre le sous-problème sur le maillage fin dans le domaine de zone pâteuse ;

- Sur le sous-domaine de l'interface, limiter les nouveaux champs calculés à partir du maillage fin au grossier.

Le couplage entre les résolutions de deux sous-problèmes dans les sous-domaines de phase liquide et pâteuse est fait par imposition de conditions aux limites appropriées sur l'interface pâteuse-liquide et par itération entre les deux résolutions. Il est noté que, sur l'interface, la continuité des différents champs aussi bien que les flux normaux associés ont été assurés [Kämpfer, 2002].

Remarque 2.10. Il est clair que durant un processus de solidification, les isothermes de *solidus* et *liquidus* sont non-stationnaires et la région pâteuse avance avec le temps. Il est nécessaire, ainsi, avec temps, de déplacer la zone critique est redéfinir les sous-domaines de liquide et pâteuse ensemble avec leurs maillages correspondants (qui sont fin et grossier respectivement).

Dans la littérature il est à noter que tous les modèles mathématiques macroscopiques développés pour le calcul de convection et macro ségrégation associée sont fondés sur l'une de ces deux méthodes.

2.5.2 Les modèles utilisant la méthode de décomposition et dits *multi-domaines* dans la littérature :

Dans les littératures parmi les premiers modèles, qualifiés de *multi-domaines* ou *multi-régions*, utilisant une méthode semblable à la méthode de décomposition de domaine, il est distingué par exemple : le modèle de [Szekely et Jassal 1978] qui propose des équations de conservation indépendantes pour chaque phase et les couplent avec des conditions aux limites appropriées à l'interface de chaque phase. Cependant, la *macro ségrégation* n'a pas été calculée et les effets solutaux de flottabilité n'ont pas été considérés dans ce modèle. Pour surmonter le défaut des premiers modèles pour le calcul de la macro ségrégation (due à la convection) qui, généralement, ne considèrent pas l'écoulement de fluide dans la région liquide entière, plus tard, un premier modèle qui considère le couplage entre les régions liquide et pâteuse et inclue également la *macro ségrégation* a été rapporté par [Ridder et al. (1981)], le modèle étant considéré comme le premier à employer le concept de la méthode de décomposition de domaine décrite précédemment.

1. Le modèle de Ridder et al.

[Ridder et al. (1981)] ont développé un modèle pour prédire la macro ségrégation dans un lingot axisymétrique, moulé sous les conditions d'état stationnaire, par l'utilisation du concept de la méthode de décomposition de domaine et inclure ainsi l'influence de l'écoulement fluide dans la masse liquide et leur modèle a été validé expérimentalement. Ils ont devisé leur domaine de modélisation dans la zone pâteuse et la région liquide et ont proposé de résoudre :

-Les équations couplées de Darcy, conservation d'énergie et la distribution locale de soluté dans la zone pâteuse ; -les équations de conservation de quantité de mouvement (Navier-Stokes) dans la région liquide ; et -la dépendance entre les deux domaines est accomplie par l'application d'un algorithme itératif, qui résout d'une façon alternée les deux systèmes d'équations dans les deux domaines avec les conditions aux limites suivantes à l'interface zone pâteuse-liquide.

2. Inconvénients des modèles fondés sur la méthode de décomposition

Le modèle de Ridder et al. (et les premiers modèles dits *multi-domaines*, en général) ont été développés pour des conditions d'état stationnaire telles qu'aucun *suivi de l'interface* pâteuse-liquide n'est nécessaire (Remarque 2.10). Néanmoins, l'interface pâteuse-liquide est généralement une fonction inconnue de l'espace et du temps. Ainsi la nécessité des maillages numériques mobiles complique l'application de ces modèles, et généralement, des hypothèses simplificatrices concernant la régularité géométrique de l'interface sont faites.

Par exemple, [Prescott et al, 1991] ont rapporté que ces modèles n'étaient pas adaptés à la prédiction d'interface pâteuse-liquide irrégulière.

Par conséquent, afin de surmonter les difficultés de l'approche *multi-domaine*, l'alternative est d'utiliser des modèles continus qui utilisent un système d'équations valable dans tout les régions de domaine (solide, liquide, pâteuse) qui peut être résolu plus aisément sur des maillages fixes. Un certain nombre de modèles dits de *simple-domaine* a été proposé [Bennon et Incropera, 1987a ; Beckermann et Viskanta, 1988, Ni et Beckermann, 1991]. Ces modèles ont montré leur capacité prometteuse dans la simulation des procédés de solidification.

2.5.3 La deuxième idée est d'utiliser un même système d'équation pour l'écoulement couplé

1. Transfert des équations de conservation microscopiques en macroscopiques par l'utilisation du concept de moyennage volumique

Plusieurs auteurs [Bennon et Incropera, 1987a ; Beckermann et Viskanta, 1988 ; Ganesan & Poirier 1990 ; Voller et al. 1989] ont essayé d'inclure l'influence de l'écoulement de fluide dans la phase liquide en utilisant une forme de technique différente que celle utilisée par Ridder et al. En commençant à partir d'équations de conservation microscopiques de masse, quantité de mouvement, énergie et soluté, ils ont dérivé des relations macroscopiques, qui sont valides dans les régions solide, liquide et pâteuse de systèmes de solidification. Ces équations peuvent être alors résolues en utilisant un *domaine simple* et un maillage numérique fixe.

En effet, ce groupe de *modèle* se compose de formulations simples de chaque domaine (modèles *continus*) [Prakash et al, 1987 ; Swaminathan et Voller, 1992 ; Prakash et Voller, 1989] ce qui élimine le besoin des équations de conservation séparées de chaque phase. Ainsi, les modèles *continus* décrivent les échanges à l'aide d'un ensemble unique d'équations et les variables représentent ainsi des quantités physiques moyennes (*vitesse, enthalpie, fraction massique ou concentration d'espèce*) définis dans des volumes élémentaires représentatifs (V.E.R.) (voir la discussion de la section 2.5.1.1 et Fig. 2.7).

D'autre part, puisqu'ils n'exigent pas un suivi de l'interface, ces modèles qualifiés de *simple-régions* ou *simple-domaines* sont bien adaptées pour traiter les transitions continues entre les phases solide et liquide, aussi bien que l'évolution de la *chaleur latente* sur une gamme finie de température. De tels modèles sont généralement développés à partir les techniques de *moyennage-volumique* (de prise de *moyenne volumique*) qui sont fondés sur la théorie classique des mélanges décrite précédemment.

Dans ce groupe il est distingué deux modèles établis à l'aide de deux approches différentes (ce qui est une des principales difficultés est la présence de plusieurs phases). Nous distinguons entre les approches communes de dérivation des équations de conservation macroscopiques dans tel système. Les *modèles continus* et les *modèles en volume-moyenné*.

2. Les modèles moyennés en volume (ou modèles simple-domaines fondés sur la méthode de prise de moyenne volumique)

La procédure de [Ganesan et Poirier (1990)] de dérivation des équations de conservation microscopiques en volume moyenné en équations de conservation macroscopiques par la méthode de moyennage volumique, est présentée précédemment (voir la section 2.5.1.1). Nous présentons ici seulement les principales motivations dans le développement de modèles moyennés dans la littérature.

Les principaux développements de cette approche sont les suivants : à l'aide de théorème de prise de moyenne [Whitaker, 1969 ; Marle, 1982], Beckermann et Viskanta (1988) ont décrit un modèle en *moyennage-volumique* en utilisant des méthodes développées pour étudier des régions multiphasées [Gray, 1975 ; Hassanizadeh et Gray, 1979 ; Gray, 1983 ; Drew, 1983]. Cependant, leurs résultats ont montré un désaccord considérable avec des résultats expérimentaux. Une dérivation explicite de la technique en *moyennage-volumique* a été présentée par Ganesan et Poirier (1990) (voir la section 2.5.1.1).

En se basant sur Ganesan et Poirier (1990), Ni et Beckermann (1991) ont développé, en détail, un modèle biphasé pour la description des phénomènes de transport pendant la solidification d'un alliage métallique. Dans ce modèle, des équations séparées de conservation en *moyennage-volumique* ont été développées pour les phases solide et liquide, permettant un traitement rigoureux : des vitesses intrinsèques solide et liquide ; le « *non-équilibre thermique et chimique* » ; et les *échanges interfaciaux (de chaleur et soluté)*. Les caractéristiques microscopiques pourraient être incluses à travers les termes de *transfert interfacial* ; les modèles de *nucléation* ; et les formulations stéréologiques, expliquant la géométrie des structures solides microscopiques [Feller et Beckermann, 1993].

Les avantages en faveur de cette approche, étaient qu'elle pouvait clarifier le lien existant entre les variables microscopiques et macroscopiques [Ni & Beckermann, 1991]. Les modèles en *moyennage-volumique* fournissent une plus grande lucidité au couplage entre les *échelles macroscopique et microscopique* [Hassanizadeh et Gray, 1990].

Dans la littérature. Ce modèle de solidification [Ni et Beckermann, 1991] a été employé pour simuler la solidification dendritique *équiaxée* d'un alliage d'aluminium-cuivre dans une

cavité rectangulaire refroidie latéralement [Beckermann et Ni, 1992]. Ils ont expliqué la *nucléation*, la *croissance* et le *transport convectif* des grains et ont montré que le modèle pouvait prédire l'évolution de la *macro ségrégation*. Cependant, la validation quantitative n'a pas été effectuée. Le modèle a été utilisé dans le contexte de solidification, par exemple dans : la modélisation de la convection thermosolutale par [Ni et Beckermann, 1993] ; dans la prédiction de la formation de la *macro ségrégation*, due à la convection thermosolutale, lors de solidification d'un acier [Schneider et Beckermann, 1995a ; 1995b] ; et dans l'étude numérique de l'effet combiné de la micro ségrégation, la perméabilité et l'écoulement, causé par la convection thermosolutale et celle due à la contraction de volume [Schneider et Beckermann, 1995c]. Le modèle a été utilisé, tel qu'il est ou développé, aussi, dans les travaux de thèse par exemples : [Ahmad et al. 1998 ; Weitao Liu, 2005 ; Bousquet-Mélou, 2001 ; Roux, 2005 ; Kämpfer, 2002 ; Gouttebroze, 2005]. En outre, il est la base de codes de calcul de solidification par exemple : (R2SOL et SOLID) développés par les groupes (EPM) de Grenoble et le code de calcul THERCAST, qui un logiciel de solidification développé au laboratoire CEMEF ; en collaboration avec le laboratoire LSG2M de l'école des Mines de Nancy, est développé sur le code 2D en éléments finis (R2SOL). Toutefois, il faut noter, ici, que de nouvelles approches pertinentes développées et qui sont fondées sur les principes de la technique de moyennage volumique par exemple [Wang & Beckermann, 1993 ; Wang & Beckermann, 1996a ; Schneider et al, 1997 ; Bousquet-Mélou, 2001, Combeau et al, 1996 etc.].

3. Les modèles continus fondés sur la théorie de mélange :

Une autre percée importante, à l'égard de développement de modèle *simple-domaine*, a été la formulation d'un modèle continu de mélange par [Bennon et Incropera (1987a)], décrivant les transports de masse, quantité de mouvement énergie et espèce, misent en jeu dans la solidification des alliages binaires. Ce modèle est fondé sur les principes de la *théorie classique de mélange*. Dans cette théorie, un milieu monophasique (seule phase dont les propriétés dépendent de la *fraction massique de solide*) équivalent au système est considéré : les équations de phase sont sommées afin d'obtenir un ensemble d'équations de mélange. [Bennon et Incropera (1987a)] ont présenté un ensemble d'équations macroscopiques de conservation, qui s'appliquaient simultanément à toutes les régions (solide, pâteuse et liquide) et nécessite seulement un simple et fixe maillage numérique et un ensemble simple de conditions aux frontières externes. Par conséquent, les régions solide,

pâteuse et liquide ont été implicitement couplées. Le modèle continu de mélange, qui a été clarifié, plus tard, par [Prescott et al, (1991)], a regardé la **zone pâteuse** comme un **recouvrement** continu, qui a été occupé par le solide et le liquide simultanément avec des propriétés macroscopiques. Les interactions entre phases sont alors décrites par des *lois semi-empiriques* [Hills et al, 1983 ; Voller et Prakash, 1987].

La validation du modèle a été présentée en [Bennon et Incropera (1987b)] par l'application du modèle à la solidification dans une cavité rectangulaire. Dans le but d'extension de cette approche à d'autres systèmes de solidification, [Voller et al. 1989] ont étudié les hypothèses physiques spécifiques qui sont nécessaires dans le but de passer de modèles multi-phases aux modèles simple-phases et leurs conséquences.

Dans le présent travail cette approche est adoptée et développée pour la dérivation des équations de conservation macroscopiques de transports de masse, quantité de mouvement, énergie et espèce durant la solidification d'un alliage binaire en **chapitre 3** de cette thèse où les détails, de développement de l'approche, seront présentés. En outre les contributions de forces électromagnétiques de Laplace sont implémentées dans le modèle.

Dans la littérature. Le modèle continu de [Bennon et Incropera, 1987a] a été mis en application, avec succès, dans plusieurs investigations réalisées durant les deux décennies passées, afin d'analyser numériquement les procédés de transport lors de la solidification directionnelle des alliages binaires. Les premiers calculs numériques ont été entrepris sur le mélange $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ (eau de chlorure d'ammonium), dans une cavité rectangulaire, pour lequel le fluide le plus léger (eau) est rejeté due au fait que la solidification se procède latéralement [Bennon et Incropera 1987b]. Les résultats obtenus conduisent à des caractéristiques robustes relatives à la solidification d'alliage binaire, ces caractéristiques sont supposés vérifiées ou révélées par des expériences (voir la remarque 2.6) : le couplage entre les écoulements contrôlés par les forces de flottabilité thermosolutale associées avec les régions pâteuse et liquide ; l'établissement d'un front de *liquidus* fortement irrégulier et la formation des *poches liquides* dues à la *refusion* dans les zones pâteuse et liquide. En effet, la refusion facilite la formation des canaux qui permettent préférentiellement la *convection de l'eau-riche* (*écoulements en canaux préférentiels*, discutés de la section 2.4.4), dans le fluide inter dendritique au front *liquidus*. Par l'utilisation de ce modèle, les calculs numériques de [Bennon et Incropera, 1987c] révèlent, pour la première fois, une relation entre l'écoulement

de canal, se produisant lors des premières étapes de solidification, et la formation de la *macro ségrégation* finale de type *ségrégation –A* (dite aussi *A-ségrégates*) dans un lingot solidifié. [Christenson et Incropera, 1989b] ont identifié le phénomène de *convection thermosolutale*, observé expérimentalement, dans la solution $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$. D'autres premières applications de l'approche continue dans le contexte de la solidification ont été entreprises par [Voller & Prakash, 1987]. [Voller et al. 1989] ont étudié les hypothèses physiques spécifiques et leurs conséquences dans le but de passer de modèles multi-phases aux modèles simple-phases. [Neilson et Incropera (1991)] ont utilisé cette version pour simuler numériquement l'écoulement de fluide et le développement des *canaux* induits dans la zone pâteuse d'un système de $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$. La configuration étudiée est de géométrie 2D refroidie par dessous.

Le modèle continu a été aussi employé, pour l'étude de solidification (directionnelle) latérale de la solution $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$ dans une cavité cylindrique [Prescott et Incropera, 1994]. Les caractéristiques clés de la solidification, à savoir, le front irrégulier de *liquidus* ; la convection double-diffusive dans la fonte ; le développement des *canaux d'écoulement* dans la zone pâteuse ; la refusion du solide ; et la formation de la macro ségrégation (*A-segregates*), ont été prédits et identifiés. [Singh et Basu (1995)] ont utilisé le modèle continu pour la modélisation numérique de macro ségrégation lors de solidification de l'alliage de Fe-C dans une cavité rectangulaire. La simulation de ce processus transitoire a été effectuée jusqu'à la solidification complète et les résultats ont été présentés à de diverses étapes de solidification. Ces résultats révèlent l'influence du champ d'écoulement sur les champs thermique et solutal (et vice versa). Sous l'ensemble de paramètres donnés, il est constaté que la flottabilité thermique a affecté le champ de macro ségrégation global, tandis que la flottabilité solutale a eu un effet localisé.

Dans la prédiction de *macro ségrégation*, cette méthode continue a permis d'obtenir d'intéressants résultats. Elle a en particulier permis de prévoir la formation de *canaux ségrégés (freckles)* enrichis en soluté dans les zones inter dendritiques et les ségrégations dites « *A-segregates* » (canaux inclinés enrichis en soluté) : par voie numérique [Prescott et Incropera, 1994] et par voies numérique et expérimentale : [Prescott et al, 1994].

En outre, en utilisant l'approche continue, ou un modèle développé en se fondant sur l'approche continue, les effets de la convection durant la solidification ont été, largement, étudiés et plusieurs études numériques récentes sont consacrées à la modélisation macroscopique des phénomènes de solidification des alliages binaires telles que dans :

[Chakraborty 2001 ; Chakraborty & Dutta, 2002 ; Lee et al. 2005 ; Mechighel et al. (2009) ; Mechighel et al (2010) ; Nikrityuk et al, 2004 etc.]. Toutes ces études numériques ont présenté un aperçu général sur la convection thermosolutale lors de variété types conditions de solidification de différents systèmes binaires.

Les conclusions. Les plus importantes, tirées de toutes ces études à l'échelle macroscopique, sont : l'identification des caractéristiques clés de la solidification d'un alliage binaire et, en particulier, le fait que la convection thermosolutale et son interaction avec la solidification (front de solidification) jouent un rôle très important dans le transport macroscopique de soluté et qu'elle commande ainsi le modèle final de macro ségrégation. Généralement, les résultats en termes de macro ségrégation de ces approches montrent combien il est important de considérer la zone pâteuse aussi bien dans la région masse liquide qu'en avant du front de solidification. En outre, ces études montrent le potentiel et la pertinence de l'approche continue du choix de cette approche comme base du modèle développé dans le présent travail.

Remarque 2.11. Extensions de l'approche continue. Il faut noter que l'approche continue a été étendue, afin de prédire les phénomènes de *sous-refroidissement thermique* et de transport du solide [Prescott et Incropera, 1992]. [Ni et Incropera (1995a, b)] ont aussi intégré le *sous-refroidissement solutal* (chapitre 1) et la *nucléation de grains* dans le modèle continu. L'approche continue peut prédire les effets de *non-équilibre* et de *particules suspendues* [Ni & Incropera, 1995a, b] et la turbulence [Prescott & Incropera, 1995]. Des études significatives du phénomène de contraction à la solidification ont été entreprises par [Krane & Incropera, 1994, 1995], en utilisant une approche continue.

Remarque 2.12. Cas d'alliages multi-composants. Dans la solidification d'alliage multi-composants, l'influence de la gravité dans la convection dans la masse liquide est beaucoup plus compliquée que dans l'alliage binaire parce que chaque élément d'alliage contribue au changement de la densité liquide et le diagramme de phase de l'alliage est plus complexe. Les approches continue ou de *moyennage-volumique* ont été employées, aussi, avec des stratégies algorithmiques différentes de celles utilisées pour les alliages binaires en raison du comportement plus complexe à la solidification [Schneider et Beckermann, 1995a et 1995b ; Felicelli et al, 1997].

Remarque 2.13. Contraction à la solidification. Bien que l'écoulement de fluide dans la zone pâteuse pendant la solidification soit guidé par la flottabilité thermique et solutal,

comme par la **contraction** à la solidification, (ainsi qu'illustré précédemment) la plupart des études de la convection naturelle considèrent la flottabilité comme seule force d'entraînement puisqu'il est plus difficile d'aborder la contraction à la solidification, qui implique un changement de domaine. Par conséquent, il y en a pas beaucoup d'études disponibles de la contraction à la solidification. Toutefois, Tsai et ses collègues [Chen et Tsai, 1993] ont utilisé le modèle continu pour prédire la macro ségrégation induite par contraction à la solidification pour la solidification unidirectionnelle des alliages d'Al-Cu, en prenant en compte la diffusion complète dans le liquide et le solide, cette hypothèse était peu raisonnable pour la plupart des solidification de moulages. [Chang et Stefanescu (1996)] ont prolongé le modèle de Tsai en permettant à la viscosité de changer quand la cohérence de dendrite a été atteinte. Ils ont prouvé que dans certains cas, comme la solidification unidirectionnelle d'une pièce de moulage, la contraction à la solidification exerce un effet plus important sur l'écoulement liquide dans la région pâteuse que celui de la flottabilité

4. Comparaison des deux approches

Il faut souligner qu'en dépit de la différence des deux approches, le modèle en moyennage-volumique [Ni et Beckermann, 1991] s'exprime avec les mêmes équations macroscopiques que celles du modèle continu [Bennon et Incropera 1987a] quand les deux modèles sont simplifiées par identification des mécanismes physiques dominants dans l'écoulement de fluide [Prescott et al, 1991].

Pour des revues plus détaillées dans la littérature sur les approches continue et de volume moyenné voir les références [Beckermann & Wang, (1995) ; Prescott et Incropera 1996a et Combeau et al. 1998].

2.5.4 Autres progrès dans l'état de l'art de modélisation de convection et ségrégation lors de solidification

Comme indiqué (remarque 2.10) presque tous les travaux sur la modélisation de convection et macro ségrégation associée sont fondés soit sur les modèles continu ou volume moyenné. Néanmoins dans la littérature il y existe d'autres modèles dits micro-macroscopiques. Dans la modélisation *micro-macroscopique*, le but est la prédiction de la microstructure en utilisant les modèles de la *croissance microscopique* de l'interface et *nucléation*. Cependant, puisque ces modèles nécessitent la *condition de refroidissement*

(imposé au système par le flux de chaleur externe) comme une donnée, cette condition est prédite à partir d'un *modèle macroscopique* convenable (comme illustré au chapitre 1). Exemples les modèles de [Rappaz et Thevoz, 1987a, b ; Rappaz, 1989].

Remarque 2.14. Les revues générales sur la modélisation de convection et macro ségrégation considèrent les unes [Battle 1992, Beckermann 2001 et Flemings 2000]. [Prescott & Incropera 1996a] les modèles de phénomènes convectifs qui se produisent durant la solidification. Les autres [Flemings, 1974 ; et Kurz & Fisher 1984 ; Müller, 1988 et Dost & Lent, 2007], la **ségrégation en croissance cristalline** Cependant [Flemings, 1974 ; Kurtz & Fisher, 1984 ; Campbell, 2003 ; (ASM Volume 15, 1992) et El Ganaoui et Bennacer (2007)] couvrent les phénomènes de solidification en général.

2.7 Études expérimentales de solidification des alliages

Les conclusions les plus importantes, tirées de la plupart des études expérimentales ou expérimentales et numériques faites en particulier sur la solution aqueuses transparente ($\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$), sont l'identification et la visualisation de la convection naturelle thermosolutale et son interférence avec le front de solidification qui contrôlent le modèle de macro ségrégation finale ou les caractéristiques clés de solidification, citées auparavant, ou aussi le phénomène de l'érosion. Par exemple les études de : [Cao et Poulikakos (1989) ; Chen 1997 ; Beckermann & Viskanta, 1988 ; Christenson et al, (1989a, b) ; Tan (2005)]. Des études expérimentales et théoriques ont été, également, faites pour déterminer les effets de la convection naturelle thermosolutale sur la solidification de la solution $\text{NaCO}_3\text{-H}_2\text{O}$ dans une cavité cylindrique horizontale par exemple : [Neilson et Incropera, 1993].

Autre l'utilisation des systèmes transparents comme un milieu de solidification standard, il y en a un certain nombre d'études expérimentales du comportement en solidification des systèmes binaires d'alliages métalliques. Ainsi [Prescott et al, (1994)] ont réalisé des expériences sur la solidification d'un alliage de Pb-19% Sn dans une cavité axisymétrique. Un désaccord a été constaté entre les modes de macro ségrégation mesurés et calculés ; en raison de ce que la simulation numérique n'a pas pu prédire la nature tridimensionnelle inhérente de la redistribution de soluté. [Krane et Incropera (1997)] ont réalisé des expériences sur des alliages métalliques pour valider l'approche continue. Des lingots de deux compositions, de Pb-20% Sn et Pb-40% Sn, ont été solidifiés par [Bennon et Incropera 1987a]. Des

espacements de branches dendritiques ont été trouvés par des *micrographies optiques* de la microstructure d'alliage et ont été employés pour déterminer une constante dans la modélisation de la perméabilité de la zone pâteuse. Dans une étude de [Koster et al, (1997)], un mélange eutectique de Gallium-Indium a été soumis à un gradient de température horizontal. La visualisation en temps réel de l'écoulement a été obtenue par radioscopie.

Les études de comparaisons numériques et expérimentales et conclusions les plus importantes.

La synthèse entre les résultats des simulations numériques (utilisant les approches mathématiques macroscopiques citées auparavant) et des études expérimentales, révèle que des différences quantitatives, [Christenson et al, 1989a ; Prescott & Incropera, 1994 ; Prescott et al, 1994 ; Beckermann & Wang, 1996 ; Gu & Beckermann, 1999 ; Tan, 2005]. Le désaccord quantitatif entre les résultats prédits et mesurés est essentiellement dû :

1-Modèle de micro ségrégation. Ces différences peuvent parfois être attribuées à l'utilisation de la *règle du levier* ou de l'équation de *Scheil*, qui négligent les importants effets de diffusion massique microscopique de soluté ($D_s = 0$). En outre, comme il est illustré en (section 2.2.2) ces modèles ne prennent pas en compte le phénomène de *sous-refroidissement solutal*, qui peut être, important, en particulier au voisinage des sommets de dendrites [Kurz & Fisher, 1984].

2-Propriétés thermo physiques des matériaux. Des incertitudes demeurent aussi quant aux propriétés thermo physiques des matériaux, généralement, prises constantes dans les prédictions numériques, ces propriétés varient souvent en fonction de la température et concentration.

3-Modèle de perméabilité choisi dans la zone pâteuse. Dans tous les cas, il est constaté un manque de discussion sur l'importance des différents termes résultant du changement d'échelle, représentatifs des transports inter faciaux (modèle de Darcy ou transport de soluté), ou des effets des phénomènes microscopiques (dispersion, tortuosité des cristaux) sur les transports macroscopiques [Bousquet-Mélou, 2001]. En conséquence, l'une des principales sources de désaccord entre les résultats numériques et expérimentales réside dans la définition des propriétés de *transport effectives* de la zone pâteuse. En effet, la perméabilité des zones dendritiques colonnaires est généralement reliée à la porosité (g_l) par la loi Kozeny-Carmann

(équation (1.30)), représentative des milieux poreux homogènes et isotropes. Or, les zones pâteuses colonnaires sont, à l'évidence, très hétérogènes : la porosité varie d'une valeur nulle à l'unité au sein de la zone pâteuse. Cette propriété a été qualifiée d'hétérogénéité évolutive [Bousquet-Mélou, 2001 ; Goyeau et al., 1997 et 1999]. De plus, des expériences ont clairement démontré la forte anisotropie des zones dendritiques colonnaires [Poirier, (1987)]. Si [Poirier, (1987)] a établi un modèle anisotrope (équation (1.34)), à partir des mesures (et qui est une version anisotrope du modèle de Kozeny–Carman), des expériences numériques ont toutefois montré que ce modèle pouvait sous-estimer assez nettement la perméabilité de la zone pâteuse, en particulier au voisinage des sommets de dendrites [Ganesan et al., 1992 ; Bhat et al., 1994 ; Goyeau et al., 1999].

2.8 Modélisation de convection lors de croissance cristalline et effet d'un champ magnétique appliqué

Nous présentons dans cette section une introduction aux équations de transport pour la croissance cristalline à partir d'un liquide. Il en est fait une analyse dimensionnelle afin de familiariser avec les paramètres importants qui gouvernent les transferts de chaleur et de soluté par convection dans les systèmes de croissance cristalline. La deuxième partie de cette section discute les méthodes de réduction de la macro ségrégation associée avec la convection thermosolutale. Une attention spéciale est consacrée aux paramètres du système (substance) en croissance qui peuvent réduire les effets de convection sur la ségrégation, ainsi l'application d'un champ magnétique statique et uniforme. Enfin nous présentons une revue illustrant l'utilité de champs magnétiques dans la suppression des convections et par conséquent des ségrégations associées que ce soit dans le domaine de solidification des alliages ou en croissance cristalline.

2.8.1 Équations de transport pour la croissance cristalline d'un monocristal à partir d'un liquide

Dans tous les processus de solidification non-capillaires (sans surface libre), la région fondue (liquide) subit les effets de convection induits par les flottabilités thermique et solutale..

Remarque 2.15. Les systèmes de croissance cristalline sont des systèmes à changement de phase dont les régions de transitions ne sont pas caractérisées par des phases *séparables* discrètes, les concepts de mouvement relatif de phase et d'interactions de phase n'ont pas de signification claire. Pour tels systèmes, le transport de quantité de mouvement est mieux décrit par l'introduction d'une viscosité effective μ dans les équations classiques de Navier-Stokes. Par conséquent l'équation de quantité de mouvement peut être écrite comme (2.27). Parmi les alliages ou systèmes appartenant à la classe des substances *non-capillaires* de croissance cristalline citons les substances utilisées dans [Kim & Brown, (1991) ; Thompson & Szekely (1988) ; Dost & Lent, (2007) et Watring (1998)].

Les équations suivantes sont les équations de conservation décrivant les transports de masse, quantité de mouvement, énergie et soluté, dans la région liquide :

Équation de conservation de masse.

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (2.26)$$

Équation de conservation de quantité de mouvement. L'équation qui détermine l'intensité de convection est l'équation de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{V} + \rho \mathbf{g} \quad (2.27a)$$

La projection de cette équation selon la direction x dans l'approximation de Boussinesq de dépendance de la masse volumique à la température et à la concentration mène à :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{V}u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + \rho g \beta_T (\Delta T) + \rho g \beta_C (\Delta C) \quad (2.27b)$$

où ρ est la masse volumique du fluide, μ est sa viscosité, (notons que les propriétés thermo physiques dans ces équations sont celles de liquide et prises comme des constantes, cependant, l'indice « l » est omis), g est l'accélération due à la gravité, β_T et β_C sont, respectivement, les coefficients de dilatation thermique et solutal ΔT est la différence (gradient) de température et ΔC est le gradient de concentration, (ces deux gradients représentent les forces de guidage de convection thermosolutale). Cette équation est en fait la première loi de Newton :

$$M \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = M \left(\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) \right) = \sum \mathbf{F} \quad (2.28)$$

c'est-à-dire la sommation de forces est égale au produit d'un objet de masse M et d'accélération $\frac{D\mathbf{V}}{Dt}$ dérivée par un volume élémentaire de fluide. Ainsi, chaque terme dans l'équation (2.27b) est simplement une force. Les significations, aussi bien que la grandeur de ces termes, sont importantes dans la compréhension de base des phénomènes d'écoulement de fluide et sont présentés sur le tableau 2.1 :

Équation de conservation de l'énergie. Le gradient de température gouvernant, dans la force de flottabilité thermique, est déterminé par l'équation d'énergie :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \nabla(\mathbf{V}T) = k \nabla^2 T \quad (2.29)$$

avec c_p est la chaleur spécifique à pression constante du liquide et k sa conductivité thermique (supposées constantes).

Équation de conservation de l'espèce. Le gradient solutal dirigeant, dans la force de flottabilité solutale, est déterminé par l'équation de l'espèce :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \rho \nabla(\mathbf{V}C) = D \nabla^2 C \quad (2.30)$$

avec D est la diffusivité solutale du liquide.

Tableau 2.1 : Significations et grandeur de termes dans l'équation de quantité de mouvement

Terme	Signification	Ordre de grandeur d'estimation
$\rho \frac{\partial u}{\partial t}$	Force temporelle	$F_{tempor} \approx \rho V^2 / L$
$\rho \nabla \cdot (\mathbf{V}u)$	Force inertielle	$F_{inertie} \approx \rho V^2 / L$
∇p	Force de pression	$F_{pression} \approx \rho V^2 / L$
$\mu \nabla^2 u$	Force visqueuse	$F_{visqueuse} \approx \mu V / L^2$
$\rho g \beta_T (\Delta T)$	Force de flottabilité thermique	$F_{boyTherm} \approx \rho g \beta_T \Delta T$
$\rho g \beta_C (\Delta C)$	Force de flottabilité solutale	$F_{boySolutal} \approx \rho g \beta_C \Delta C$

2.7.2 Utilité des paramètres adimensionnels

Les équations (2.26), (2.27), (2.29) et (2.30) sont couplées entre-elles et doivent être résolues simultanément pour déterminer le niveau de convection dans un système donné.

Durant la croissance cristalline, la sévérité de convection est généralement donnée par le rapport des forces thermique et solutale aux forces visqueuses (tableau 2.1). Le rapport de ces forces est donné par un *paramètre adimensionnel* nommé le nombre de Grashof (on désigne par Gr_T le nombre de Grashof thermique et celui solutal par Gr_C) :

$$Gr_T = \frac{g\beta_T \Delta T L^3}{\nu^2} \text{ et } Gr_C = \frac{g\beta_C \Delta C L^3}{\nu^2} \quad (2.31)$$

où L est l'échelle de longueur caractéristique du système (de solidification) et ν est la diffusivité cinématique du liquide.

La force de flottabilité thermique est due aux différences de masse volumique se produisant à partir des gradients latéraux (ou radiaux) inévitables de température, dans le liquide, qui provoquent la convection. La force de flottabilité solutale est due aux différences de masse volumique, dues à la rejection de soluté durant la solidification (comme il est illustré auparavant). Dans les substances dites *dilués* la rejection de soluté a une influence minime sur la masse volumique et le Gr_C est petit comparé au Gr_T . Cependant, dans les substances dites *non-dilués* tels que (voir [Dost & Lent, 2007]). Cette force solutale est significative et ne peut être négligée. Cependant, il est de grande importance de noter que la force solutale peut augmenter ou supprimer la convection ce qui est dépendant sur le signe du coefficient de dilatation solutale β_C (comme il est discuté précédemment pour le cas des alliages binaires voir Fig.2.6).

Pour des petites valeurs du nombre Grashof, les forces visqueuses sont suffisamment larges pour supprimer la convection et le fluide est stable. En revanche, à des valeurs critiques du nombre de Grashof, les forces de flottabilité dépassent les forces visqueuses et une convection laminaire se produit. Comme le Gr augmente il y en a d'autres transitions critiques du laminaire à l'oscillatoire et finalement à la turbulence (pour illustré le phénomène de transition, davantage, voir par exemple la référence [Bennacer et al. 2006]).

Autres paramètres adimensionnels importants.

Dans un écoulement laminaire convectif l'épaisseur (dite aussi grandeur relative) des couches limites thermique (δ_T), de quantité de mouvement (δ_{mouv}) et solutale (δ_C) sont importantes. Le nombre de Prandtl (Pr) est défini comme le rapport de la viscosité cinématique à la diffusivité thermique et il est une comparaison entre les épaisseurs des couche limites de quantité de mouvement et thermique :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\delta_{mouv}}{\delta_T} \quad (2.32)$$

Semblable, le nombre de Schmidt (Sc), défini comme le rapport de la viscosité cinématique à la diffusivité solutale, est une indication de la grandeur de la couche limite de quantité de mouvement et la couche limite solutale :

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\delta_{mouv}}{\delta_C} \quad (2.33)$$

Pour la plus part des semi-conducteurs, $Pr \ll 1$ et $Sc \gg 1$, qui signifient que $\delta_C < \delta_{mouv} < \delta_T$. Ce qui indique que les effets convectifs sur la macro ségrégation sont importants mais de petits ou pas d'effet convectif sur le transfert de chaleur.

Deux autres paramètres importants sont les nombres de Péclet thermique Pe_T et solutal Pe_C . Le nombre de Péclet thermique est obtenu par la comparaison du terme de transfert de chaleur convectif avec le terme de transfert de chaleur par conduction dans l'équation d'énergie et est donné par :

$$Pe_T = \frac{U_{car} L}{\nu} \quad (2.34)$$

avec U_{car} est une vitesse caractéristique. Pour $Pe_T \ll 1$, le transfert de chaleur convectif est petit comparé au transfert de chaleur conductif et le système est nommé comme de type diffusion thermique limitée.

Par analogie le nombre de Péclet solutal Pe_C , défini comme le rapport du transport convectif de soluté au transport diffusif, et est donné par

$$Pe_c = \frac{U_{car} L}{D_l} \quad (2.35)$$

Si $Pe_c \ll 1$, le système est dit de diffusion solutale limitée.

Les groupes adimensionnels apparaissant comme un résultat de l'analyse dimensionnelle des équations de transport précédentes. La liste complète de ce groupe est donnée dans le tableau 2.2.

2.7.3 Méthodes de réduction de la convection et ségrégation associée

Comme dans le cas des alliages métalliques, les substances de la croissance cristalline contiennent des éléments de soluté qui sont, aussi, distribuée aléatoirement durant la solidification. Nous avons déjà vu que l'interface solide-liquide, lors d'un processus de croissance cristalline, étant plan et les équations (2.5) et (2.6) peuvent être appliquées dans calcul de la *micro ségrégation*.

Dans le but de contrôler la convection, et par conséquent la ségrégation associée, dans le matériau, les paramètres du système de croissance cristalline, c'est-à-dire du creuset, tels que la taille de charge ; les gradients de température et l'accélération due à la gravité doivent être modifiées, généralement, à travers des différentes alternative, par exemple :

- La croissance de cristaux ayant de petits diamètres,
- La solidification dans un milieu de gravité faible, ou
- La solidification sous l'influence des champs magnétiques appliqués.

Remarque 2.15. Il est noté que nous avons déjà l'utilité du brassage électromagnétique sur l'élimination de macro ségrégation. Ce brassage est généralement conduit à l'application d'une force électromagnétique. Par la suite nous illustrons un cas de brassages électromagnétiques (c.-à-d appliquer un champ magnétique statique et uniforme). Pour des détails sur le brassage électromagnétique voir par exemple le travail de thèse [Zaïdat (2005) et Watring (1998)].

Tableau 2.2 : Groupes adimensionnelles associées aux équations de conservations adimensionnelles

Quantité	Signification	Définition
Nombre de Prandtl	<i>Diffusivité visqueuse / Diffusivité thermique</i>	$Pr = \nu/\alpha$
Nombre de Schmidt	<i>Diffusivité visqueuse / Diffusivité solutale</i>	$Sc = D/\alpha$
Nombre de Péclet thermique	<i>Transfert de chaleur convectif / transfert de chaleur diffusif</i>	$Pe_T = VL/\alpha$
Nombre de Péclet solutal	<i>Transfert de masse convectif / transfert de masse diffusif</i>	$Pe_C = VL/D$
Nombre de Reynolds	<i>Force d'inertie / Force visqueuse</i>	$Re = VL/\nu$
Nombre de Grashof thermique	<i>Force de flottabilité thermique / Force visqueuse</i>	$Gr_T = \frac{g\beta_T \Delta T L^3}{\nu^2}$
Nombre de Grashof solutal	<i>Force de flottabilité solutale / Force visqueuse</i>	$Gr_C = \frac{g\beta_C \Delta C L^3}{\nu^2}$
Nombre de Hartmann	<i>Force de Laplace / Force visqueuse</i>	$Ha = B_0 L \sqrt{\sigma_e / \rho \nu}$
Paramètre d'interaction magnétique	<i>Force de Laplace / Force d'inertie</i>	$N_{mag} = \sigma_e B_0^2 L / \rho V$
Relations adimensionnelles importantes		
Nombre de Rayleigh thermique	$Ra_T = Gr_T Pr = \frac{g\beta_T \Delta T L^3}{\nu \alpha}$	
Nombre de Rayleigh solutal	$Ra_C = Gr_C Sc = \frac{g\beta_C \Delta C L^3}{\nu D}$	
Nombre de Péclet thermique	$Pe_T = Re Pr = VL/\alpha$	
Nombre de Péclet solutal	$Pe_C = Re Sc = VL/D$	

1. Première alternative : Réduction du diamètre de la charge. Il est révélé que la sévérité de convection en croissance cristalline à partir d'un liquide est contrôlée par le nombre de Grashof (équation 2.31) qui est dans le cas d'un spécimen de géométrie cylindrique ait une dépendance cubique sur le rayon du cristal « r_{rc} » (c'est-à-dire Gr_C ou $Gr_T \propto r_{cr}^3$). Par conséquent, le rayon est un paramètre à changer dans le but de réduire la convection. À ce fin, des expériences ont été effectuées avec diverses diamètres de charge durant une croissance cristalline de type Bridgman verticale de *Ga-Ge* [Holmes et al. 1981]. Les résultats ont montré que le diamètre de cristal à être réduit a la taille très fine pour éviter

la convection dans le liquide. Évidemment, les cristaux de tailles très fines n'ont pas de valeur en industrie électronique. Ils ont été, cependant, trouvés utiles pour des études importantes des propriétés thermophysiques de semi-conducteurs.

Pourquoi les champs magnétiques sont utiles ?

2. Seconde alternative : Réduction de la gravité. Un autre paramètre qui peut être utilisé pour contrôler la convection est l'accélération de la pesanteur due à la gravité g . Dans la littérature des expériences [Larson et al, 1994], effectués dans un environnement de gravité réduit, ont montré que la croissance est de type diffusion thermique limitée peut être obtenue. L'avantage réel de procéder en microgravité est de fournir une opportunité de croître des cristaux de larges diamètres dans un régime de diffusion limitée qu'il n'est pas possible en condition de gravité réelle. Ce qui peut être facilement montré à travers l'analyse dimensionnelle par la considération de la magnitude de vitesse v_r (composante de \mathbf{V} selon la direction r) de fluide à la force de flottabilité thermique. Cette relation est montrée sur la figure 2.9 comme le nombre de Reynolds, Re :

$$Re = \frac{v_r r_{rc}}{\nu} \quad (2.36)$$

À l'opposé du nombre de Grashof Gr_T . La multiplication de Re avec le nombre de Prandtl (Pr), pour le premier cas, et le nombre de Schmidt (Sc), pour le second cas, mène à des courbes Semblables à la figure 2.9 où ($Re Pr = Pe_T$) et ($Re Sc = Pe_c$). Notons que pour des semi-conducteurs typiques un $Re=10$ (Fig. 2.9a) conduit à un $Pe_T=0,1$ et $Pe_c=100$ (Fig. 2.9b et 2.9c) :

$$\frac{Pe_T}{Pe_c} = \frac{D}{\alpha} = 10^{-3} \quad (2.37)$$

Ces figures montrent schématiquement que le transfert de chaleur par diffusion limitée ($Pe_T < 1$) peut être obtenu à des valeurs élevées de g (c'est-à-dire : $g=9,81m/s^2$) et au même niveau de g ayant un transfert massique de soluté de type convection-dominée ($Pe_c > 1$). Par conséquent, pour avoir un transfert massique de soluté de type diffusion-limitée (c'est-à-dire réduire la ségrégation), le Gr_T (le niveau g) ait à être réduit à des niveaux bas tels que $Pe_c < 1$,

au quelle point que Pe_T est très petit (rappelons que $Pe_T/Pe_s = 10^{-3}$). Il peut être montré que la dépendance fonctionnelle de Pe_c sur Gr_T est :

$$Pe_c = \frac{V_r r v}{\nu D} \sim fct\left(\frac{g\beta_T\Delta T r^3}{\alpha\nu^2}, Pr, Sc\right) \quad (2.38)$$

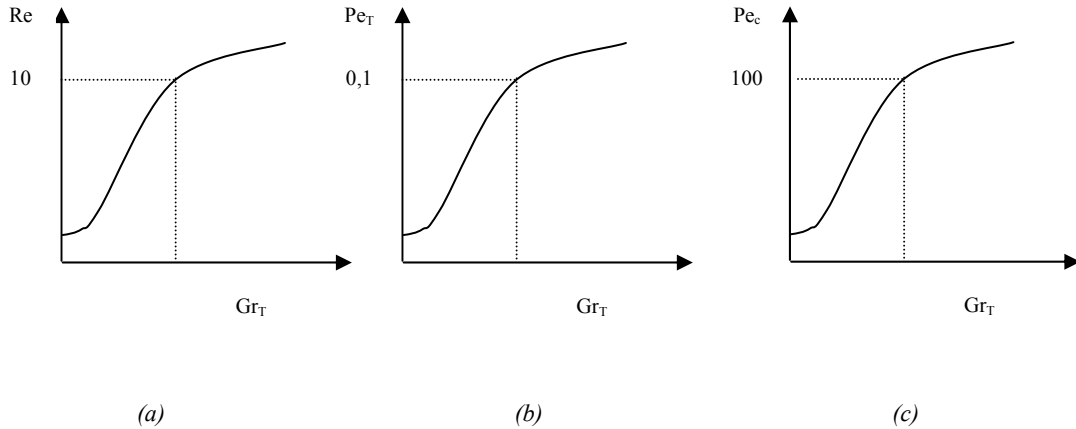


Figure 2.9 : Représentations schématiques de (a) Re en fonction de Gr_T ; (b) Pe_T en fonction de Gr_T et (c) Pe_c en fonction de Gr_T (d'une substance semi-conducteur typique).

Les quantités β_T , ΔT , ν et α sont fixées pour une substance de croissance cristalline et g est fixée sur la terre ce qui laisse le rayon du cristal comme le seul paramètre ajustable. Cependant, en microgravité g peut être réduite de 4 à 6 d'ordres de grandeur. Ainsi, à partir de l'équation (2.27b), avec tous les autres constants :

$$\frac{r_{microgravité}}{r_{gravité}} \sim \left(\frac{g_{microgravité}}{g}\right)^{-\frac{1}{3}} \sim 30 \quad (2.39)$$

Cette équation montre que la microgravité fournit une opportunité excellente pour augmenter la taille des cristaux croissants.

2. Troisième alternative : Application d'un champ magnétique statique.

Le mécanisme de base de l'interaction d'un champ magnétique appliqué et un semi-conducteur fondu (liquide) entraîne des courants électriques induits par le mouvement d'un « fluide conducteur » dans la présence d'un champ magnétique. Lorsque la convection est présente, l'écoulement de fluide électriquement conducteur perpendiculaire au champ magnétique résulte en une force de **Laplace** qui oppose ce mouvement. Pour déterminer l'efficacité du champ magnétique sur la suppression de convection il est nécessaire de résoudre les équations

de *Maxwell* et les équations de l'écoulement fluide pour les champs de vitesse et électromagnétique. Une dérivation complète des équations MHD, données dans les références [Chandrasekhar (1961) ; Gelfgat & Bar-Yoseph, (2001)], fondamentalement résulte dans l'incorporation de la force de Laplace $\mathbf{F}_{Lorentz}$:

$$\mathbf{F}_{Lorentz} = \sigma_e (\mathbf{E} + \mathbf{V} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (2.40)$$

Dans les équations de Navier-Stokes (équation 2.27), l'hypothèse qui consiste à négliger le champ électrique \mathbf{E} a montrée à être acceptable dans la limite d'un écoulement bidimensionnel [Gelfgat & Bar-Yoseph, (2001)] ce qui élimine le besoin de résoudre l'équation de conservation du potentiel électrique en bidimensionnel, plus de détails sont donnés en chapitres 3 et 4. Avec cette approximation l'équation (2.40) se réduit à :

$$\mathbf{F}_{Lorentz} = \sigma_e (\mathbf{V} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (2.41)$$

où σ_e est la conductivité électrique du fluide, \mathbf{V} le vecteur vitesse de fluide et \mathbf{B} détermine la magnitude et l'orientation du champ magnétique. En fait, l'amortissement de la convection par les champs magnétiques est semblable à une augmentation de la viscosité du liquide. Celle-ci a donné une hausse au terme de « *viscosité magnétique* » qui est analogue à la viscosité cinématique et est usuellement désigné par :

$$\nu_{magnetique} = \sigma_e \mu_0 \quad (2.42)$$

où μ_0 est la perméabilité (*magnétique*) du fluide.

Le paramètre adimensionnel qui détermine l'efficacité d'un champ magnétique sur la suppression de convection est le nombre de Hartmann Ha (tableau 2.2) :

$$Ha = B_0 L \sqrt{\sigma_e / \mu} \quad (2.43)$$

qui est le rapport de la force de Laplace à la force visqueuse. Pour des semi-conducteurs typiques et des intensités de champ moyennes à larges ($Ha \sim 10^3$) indiquant que les courants électrique sont meilleurs en transportant l'énergie sur de distances larges dans le liquide que les forces visqueuses. En utilisant un argument d'échelle semblable comme celui présenté auparavant et en notant pour la plus part de semi-conducteurs :

$$\frac{U_{\text{magnétique}}}{\nu} = 10^6 \quad (2.44)$$

il peut être montré que

$$\frac{r_{\text{magnétique}}}{r} \sim \left(\frac{U_{\text{magnétique}}}{\nu} \right)^{1/3} \sim 100 \quad (2.45)$$

Par conséquent, les deux procédés en microgravité et avec l'application d'un champ magnétique fournissent le potentiel d'augmenter la taille des matériaux semi-conducteurs. Mais la dernière alternative peut fournir une opportunité de 3 fois supérieure.

Remarque 2.17. Le dernier chapitre illustre davantage le cas 3D où on ne peut pas faire l'hypothèse qui consiste à négliger le champ électrique \mathbf{E} . Dans de ce chapitre l'équation de conservation de potentiel électrique doit être considérée et résolue.

2.9 Revues supplémentaires en général

Après avoir illustré l'utilité d'un champ magnétique statique et uniforme, et des champs magnétiques en général, dans la réduction de macro ségrégation par la suite nous présentons, brièvement, des travaux réalisées dans les domaines (solidification d'alliages et croissance cristalline de semi-conducteurs) (nous illustrons une revue d'ordre général).

- **Revue sur champs magnétiques en croissance cristalline.**

Dans la littérature, l'application des champs magnétiques pendant la croissance d'un liquide a été examinée par [Utech et Flemings en 1966]. Ils ont étudié les effets d'un champ magnétique orienté transversalement et verticalement sur la croissance d'une substance (*tellurium-doped antimonide*) dans un four horizontal lors d'une solidification directionnelle. Leurs expériences ont indiqué qu'en présence d'un champ magnétique de (1300 et 1750 Gauss), la convection naturelle thermosolutale turbulente et les fluctuations associées de la température dans la fonte ont été supprimées de même que la fluctuation associée dans la concentration de soluté (dopant) dans le cristal en croissance. Indépendamment, [Chedzey & Hurle (1966) ; et Hurle (1967)] ont réalisé des expériences semblables par la méthode de croissance de Bridgman horizontale de (*indium antimonide*) avec un champ transversal, mais

les ont appliquées le long d'un axe horizontal. Cette configuration, aussi bien, était efficace en éliminant la formation des *striations* de dopant. Depuis ces premières expériences, l'utilisation d'un champ magnétique a été appliquée à plusieurs systèmes de croissance cristalline avec de divers résultats. Pour plus de détails en chapitre 1 il est déjà introduits quelques références sur ce domaines.

- **Reuves sur champs magnétiques dans la solidification.**

L'effet d'amortissement des champs magnétiques a été largement étudié dans la littérature pour de différents types et conditions de solidification. Par exemples : [Poirier et al (1997)] ont réalisé une étude de simulation durant la solidification directionnelle d'alliages binaire et multi-composant. [Prescott & Incropera (1993)] ont investie les effets de faibles champs magnétiques sur la solidification d'un alliage Pb-Sn dans des conditions de gravité normales. [Evans (2000)] ont investie la suppression de la convection thermosolutale par exploitation de la dépendance de température-composition sur la susceptibilité magnétique. [Ganapathysubramanian & Zabarar, 2005] ont étudié la solidification de métaux et alliages avec une zone pâteuse négligeable sous l'influence de champs et gradients magnétiques, le contrôle de la solidification de matériaux conducteur et non-conducteur par utilisation de champs magnétiques adapté.

- **Reuves sur des simulations 3D en solidification d'alliage et croissance cristalline de monocristaux.**

Solidification alliages. Dans la littérature, généralement, des études pertinentes ont été entreprises dans les domaines de solidification d'alliage binaire et croissance cristalline de monocristaux. Toutes ces études illustrent les effets indésirables de l'écoulement tridimensionnel sur la macro ségrégation finale. Un écoulement tridimensionnel provoque généralement une asymétrie, ce qui induit une non-uniformité compositionnelle ce qui nuire la qualité des cristaux produits. Parmi ces études, on peut citer : l'étude entreprise par [Neilson et Incropera, 1993], *en utilisant l'approche continue*, pour des considérations de modélisation tridimensionnelle de la solidification unidirectionnelle dans un liquide binaire NH₄Cl-H₂O. [Felicelli et al, (1998)] ont entrepris des simulations 3D pour les *canaux ségrégés (freckles)* dans les alliages binaires. [Chakraborty & Dutta (2003)] ont réalisé une étude numérique fondé e la formulation continue de la convection 3D thermosolutale et la macro ségrégation durant la solidification des alliages binaires. [Guo & Beckermann (2003)] ont entrepris une

simulation de *freckles* Durant la solidification 3D d'un alliage binaire, l'effet d'espacement de maillage a été investi. [Felicelli et al, (1998b)] ont réalisé la modélisation de la formation de *canaux ségrégés* en 3-D durant la solidification des alliages multi composants, où leur modèle de perméabilité a été introduit.

Croissance cristalline de monocristaux. Dans le domaine de la croissance cristalline on peut citer des références illustrant la nature tridimensionnelle de l'écoulement de convection se produisant dans des cas industrielles de solidification : [Vizman et al, (2004)] ont entrepris une modélisation tridimensionnelle de l'écoulement dans la configuration Czochralski de croissance cristalline de GaAs. En outre, la simulation numérique de la convection thermique dans la configuration industrielle Czochralski a été rapporté par [Vizman et al, 2001a] et [Vizman et al, 2000a]. D'autre part la stabilisation de convection par un champ magnétique a été considérée dans des études par exemples : [Lan et al, (2003)], une analyse 3D de l'écoulement de ségrégation est entreprise dans une configuration de type Bridgman sous un des champs magnétique axiale et transversal. [Lan & Yeh (2004)] ont effectué une analyse d'écoulement et ségrégation dans une configuration de Bridgman sous un champ magnétique transversal avec la rotation du creuset. En outre, dans [Vizman et al. (2000b)] une simulation numérique (3D) a été entreprise pour le calcul de l'écoulement de fluide en présence d'un champ magnétique tournant. [Vizman et al. (2001b)] ont réalisé une étude de comparaison de distributions de températures calculées par une simulation numérique 3D et mesurées dans le silicium sous l'influence de différents champs magnétiques. La convection provoquée par un refroidissement de dessous a été étudié aussi, par exemple, dans le cas industriel de croissance cristalline : [G. Neumann, (1990)].

Chapitre 3 - Modèle mathématique pour la convection de chaleur et de masse dans les systèmes à changement de phase

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons le modèle mathématique utilisé, décrivant les transports de quantité de mouvement, convection de chaleur et de masse dans les systèmes à changement de phase liquide- solide. Le modèle est fondé, essentiellement, sur la formulation continue de [Bennon & Incropera 1987a]. Comme le modèle est développé pour une solidification d'équilibre, par conséquent il suppose un équilibre thermique (et solutal) local [Bennon & Incropera 1987a]. Par conséquent, les relations supplémentaires rapportées par [Bennon & Incropera 1988] seront également utilisées. En outre, l'incorporation dans le modèle de forces de volume telle que la force de Laplace, créée par l'application de champs magnétiques dans de diverses directions et avec différentes intensités ainsi que l'addition de l'équation de conservation de charge électrique.

L'idée de base du modèle de [Bennon & Incropera 1987a] se repose sur des lois semi-empiriques et des descriptions microscopiques du mécanisme de transport qui ont été intégrées à la théorie classique des mélanges pour obtenir un système d'équations de bilan continu pour des systèmes à changement de phase liquide- solide.

Après la dérivation des équations de conservation de masse, quantité de mouvement, énergie et espèce et les équations dites de fermeture, nous allons par la suite mettre ces équations en forme adimensionnelles.

Remarque 3.1. Pour la simplicité et le besoin de représenter la variable adimensionnelle (composition ou concentration) par la lettre C , dans ce chapitre nous utilisons la variable de composition (f^a) au lieu de (C^a) adoptée jusqu'ici. En outre, dans le présent chapitre nous adoptons les mêmes notations pour les compositions (concentrations) utilisées par [Bennon & Incropera 1987a].

3.2 Formulation Mathématique du Modèle

3.2.1 Hypothèses

Le développement d'équations de conservation à partir de la théorie classique de mélange est fondé sur les principes suivants [Bennon & Incropera 1987a] : -les *composants* (*constituants*) de mélange peuvent être regardés comme de sous-systèmes isolés, si des interactions avec d'autres *composants* de mélange existent, elles sont convenablement traitées ;

-toutes les propriétés de mélange sont des conséquences mathématiques des propriétés de *composant* ; et

-le *comportement commun moyen* de mélange est gouverné par des équations semblables à celles qui gouvernent les *composants individuels*.

En outre, les hypothèses suivantes sont nécessaires pour le développement du modèle : incluant : écoulement laminaire ; comportement Newtonien des phases ; des conditions saturées de mélange, équilibre thermodynamique (de Température) local ; équilibre constitutionnel (solutal) local.

Selon la formulation de [Bennon & Incropera 1987a] :

-un *constituant* (soluté) représente un élément chimique de base ou un composé et une *phase* représente une *quantité de matière* qui est *homogène en structure physique* et *contenant* un constituant ou plus ;

- les phases, sont supposées à être distinctes et séparables, composantes du continuum, bien qu'elles n'ont pas besoin d'être homogènes en composition chimique ;

- en plus, le terme « *élément de phase* » est utilisé pour représenter un agglomérat macroscopique de phase, telle qu'une inclusion liquide ou un grain solide.

Un système de α constituants (*binnaire, tertiaire etc.*) et de k phases séparables distinctes (*solide, liquide, mélange*) est regardé comme un continuum dans lequel tout emplacement

(position) $\mathbf{r}(x, y, z)$ peut être occupée simultanément par tous les constituants et toutes les phases (figure 3.1).

Sur la figure 3.1 sont définies les grandeurs suivantes :

a- la *vitesse moyenne* des constituants contenant dans la phase k , relative à un repère fixé de référence, est désignée par \mathbf{V}_k et est appelée *vitesse de phase* ;

b- la *vitesse absolue* de chaque constituant α dans la phase k , relative à un repère fixé de référence, est désignée par \mathbf{V}_k^α ; et

c- la *vitesse de diffusion* de constituant α dans la phase k est $\mathbf{V}_k^\alpha - \mathbf{V}_k$.

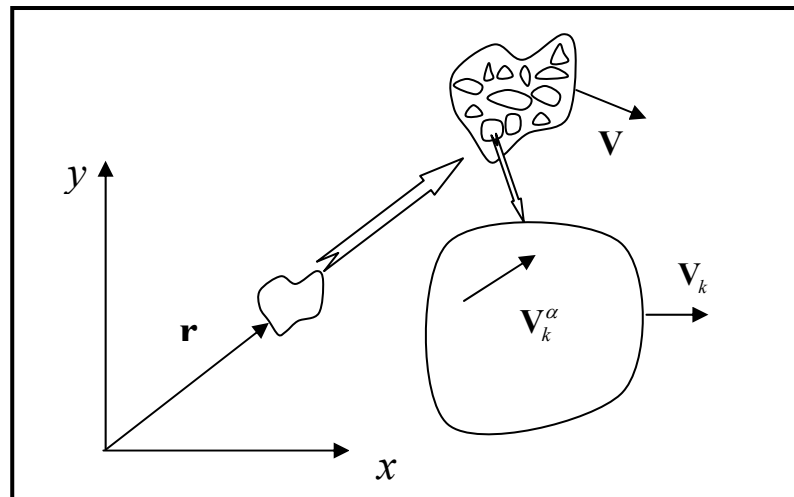


Figure 3.1 : Représentation schématique d'un continuum multi-constituants multiphase [Bennon & Incropera 1987a].

3.2.2 Développement d'équations continues

À la différence de la technique de prise de moyenne volumique illustrée en chapitre 2, le développement d'équations continues de conservation, selon [Bennon & Incropera 1987a], nécessite des relations entre les masses volumiques et fractions de volume.

Si ρ_k^α et g_k^α sont définies comme la masse volumique réelle et fraction volumique réelle de constituant α dans la phase k , respectivement, la masse volumique *partielle* de constituant α en phase k peut être exprimée comme :

$$\bar{\rho}_k^\alpha = g_k^\alpha \rho_k^\alpha \quad (3.1)$$

Semblable, si ρ_k et g_k sont définies comme la masse volumique réelle et fraction volumique réelle de phase k , respectivement, la masse volumique *partielle* de phase k est :

$$\bar{\rho}_k = g_k \rho_k \quad (3.2)$$

La fraction massique de constituant α dans la phase k est alors :

$$f_k^\alpha = \frac{\bar{\rho}_k^\alpha}{\bar{\rho}_k} \quad (3.3)$$

et la fraction massique de phase k est

$$f_k = \frac{\bar{\rho}_k}{\sum_k \bar{\rho}_k} \quad (3.4)$$

Si les *constituants* peuvent être regardés comme des *composants séparables* de phase, comme pour les *systèmes inertes* (croissance cristalline), des règles de sommation simples peuvent être utilisées pour relier les masses volumiques de phase et constituant. Cependant, pour les systèmes *non-inertes* (cas d'alliages) le lien atomique entre les constituants de phase empêche l'établissement d'un rapport, en une manière simple, entre les masses volumiques de phase et constituant (voir chapitre 1). Puisque les calculs explicites à l'échelle atomique sont impraticables, un recours doit être fait à des représentations tirées et dérivées empiriquement des masses volumiques de phase. Néanmoins, dans le but du développement de modèle, [Bennon & Incropera 1987a] ont convenablement considéré, des fractions de volume fictives associées avec les constituants *non-inertes*. À la fin, les diagrammes de phase (qui représente une description atomique), doivent circonvier le besoin de considération explicite de ces fractions volumiques.

Une déclaration explicite doit être aussi faite entre les fractions volumiques de phase. Dans la formulation de [Bennon & Incropera 1987a] la nécessité que toutes les phases ne disparaissent pas simultanément est exigée et par conséquent :

$$\sum_k g_k = 1 \quad (3.5)$$

3.2.3 Équation de conservation d'une quantité scalaire générale

Considérons le transport d'une quantité spécifique scalaire générale ϕ_k (ex. *composantes de vitesse, enthalpie, fraction massique d'espèce ou concentration*) associée avec la phase k dans un mélange multi-phase. Pour un volume de contrôle fixé arbitraire \hat{V} de surface d'aire A , qui est large devant un élément de phase mais petit devant la dimension caractéristique du domaine, la conservation de ϕ_k peut être exprimée comme le bilan d'accumulation de l'écoulement net sortant par convection et diffusion et la production volumétrique :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\hat{V}} [\rho_k \phi_k] d\hat{V}_k + \int_A [\rho_k \mathbf{V}_k \phi_k] \cdot \mathbf{n} dA_k = \int_A -\mathbf{J}_k \cdot \mathbf{n} dA_k + \int_{\hat{V}} S_k d\hat{V}_k \quad (3.6)$$

Terme temporel + terme convectif = terme diffusif + terme source

où \mathbf{n} est la normale sortante à la surface, \mathbf{J}_k est un vecteur de flux de surface et S_k est le terme source qui inclue une production ou absorption de ϕ_k .

Dans la formulation [Bennon & Incropera 1987a] le différentiel de l'aire de surface dA_k est supposé égal à $(g_k dA)$. g_k est supposée être continue, les intégrands de l'équation (3.6) sont des fonctions continues et différentiables et les théorèmes d'intégrales de **Leibnitz & Gauss** peuvent être appliquées. Le volume de contrôle est arbitraire et l'équation (3.6) peut être exprimée sous forme différentielle comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_k \phi_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_k \mathbf{V}_k \phi_k) = -\nabla \cdot (g_k \mathbf{J}_k) + g_k S_k \quad (3.7)$$

3.2.4 Équation de conservation de masse

L'équation de conservation de masse pour une phase k peut être obtenue à partir de l'équation (3.7) avec $\phi_k = 1$, $\mathbf{J}_k = \mathbf{0}$ et $S_k = \dot{M}_k$, menant à :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_k \mathbf{V}_k) = g_k \dot{M}_k \quad (3.8)$$

L'équation *continue* pour la conservation de masse est obtenue par la sommation des équations de conservation de phase et sachant que la production d'une phase k (c'est-à-dire \dot{M}_k), s'effectue aux dépens d'autres phases de mélange (c'est-à-dire $\sum_k g_k \dot{M}_k = 0$). Par conséquent :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \bar{\rho}_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k \right) = \sum_k (g_k \dot{M}_k) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (\text{macroscopique}) \quad (3.9)$$

où la masse volumique de mélange « ρ » et la vitesse *moyenne massique* de mélange « \mathbf{V} » (*dites continues*) sont données par :

$$\rho = \sum_k \bar{\rho}_k \quad (3.10)$$

$$\mathbf{V} = \frac{1}{\rho} \sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k = \sum_k f_k \mathbf{V}_k \quad (3.11)$$

3.2.5 Équation de conservation de quantité de mouvement

Si les coordonnées cartésiennes sont considérées, la vitesse de phase k est exprimée comme :

$$\mathbf{V}_k = u_k \hat{\mathbf{i}} + v_k \hat{\mathbf{j}} + w_k \hat{\mathbf{k}} \quad (3.12)$$

L'écriture de la conservation de quantité de mouvement selon la direction x pour la phase k peut être obtenue à partir de l'équation (3.7) avec $\phi_k = u_k$, $\mathbf{J}_k = -\boldsymbol{\sigma}_{kx}$ et $S_k = \rho_k B_{kx} + \dot{G}_{kx}$, menant à :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_k u_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_k \mathbf{V}_k u_k) = \nabla \cdot (g_k \boldsymbol{\sigma}_{kx}) + \bar{\rho}_k B_{kx} + g_k \dot{G}_{kx} \quad (3.13)$$

Le vecteur flux $\boldsymbol{\sigma}_{kx}$ représente la composante du tenseur général de contraintes d'un matériau qui caractérise la quantité de mouvement dans la direction x , tandis que

B_{kx} représente la composante selon x de la force de volume sur la phase k et \dot{G}_{kx} est le terme de production de quantité de mouvement due aux interactions de phases telles que la trainée et la poussée. L'équation *continue* gouvernant la conservation de quantité de mouvement selon la direction x peut être obtenue par sommation d'équation (3.13) sur chaque phase, conduisant à :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \bar{\rho}_k u_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k u_k \right) = \nabla \cdot \left(\sum_k g_k \boldsymbol{\tau}_{kx} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_k g_k p_k \right) + \sum_k (\bar{\rho}_k B_{kx}) + F_x \quad (3.14)$$

où le vecteur flux selon x « $\boldsymbol{\sigma}_{kx}$ » a été décomposé en composantes *isotropique* (p_k) et *déviatorique* ($\boldsymbol{\tau}_{kx}$), tel que : $\boldsymbol{\sigma}_{kx} = -p_k \hat{\mathbf{i}} + \boldsymbol{\tau}_{kx}$ et la force nette selon la direction x due aux interactions de phase est $F_x = \sum_k g_k \dot{G}_{kx}$.

Si le flux de quantité de mouvement convectif est décomposé en composantes représentant les contributions à partir du mouvement *moyen* de mélange et du mouvement relatif de phase :

$$\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k u_k = \rho \mathbf{V} u + \sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V})(u_k - u) \quad (3.15)$$

où la composante selon x de la vitesse *moyenne* massique de mélange (figure 3.1) est :

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_k \bar{\rho}_k u_k = \sum_k f_k u_k \quad (3.16)$$

et la composante selon x de force de volume de mélange

$$B_x = \frac{1}{\rho} \sum_k \bar{\rho}_k B_{kx} = \sum_k f_k B_{kx} \quad (3.17)$$

alors, l'équation (3.14) peut être exprimer comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u) = \nabla \cdot \left(\sum_k g_k \boldsymbol{\tau}_{kx} \right) - \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V})(u_k - u) \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_k g_k p_k \right) + \rho B_x + F_x \quad (3.18)$$

Dans l'équation (3.18) l'effet des *interactions entre les phases* est fourni par la quantité F_x (où $F_x = \sum_k g_k \dot{G}_{kx}$).

Relations constitutives semi-empiriques :

Si chaque phase de mélange est considérée comme continue, des relations constitutives peuvent alors introduites pour décrire τ_{kx} . Dans la formulation [Bennon & Incropera 1987a] le comportement de chaque phase continue est supposé Newtonien, ce qui implique que les phases rigides (comme de solides), qui sont traitées comme des fluides hautement visqueux. En raison des variations spatiales dans les fractions volumiques de phase qui se produisent dans les problèmes à changement de phase, une *prise de la moyenne* (chapitre 2) appropriée des équations constitutives Newtoniennes classiques est nécessaire. Cette exigence apparaît si la considération est donnée au taux de dilatation de la phase k . Afin de maintenir une cohérence avec l'exigence de continuité de phase, (équation (3.8)), le taux de dilatation de la phase k doit être exprimé comme $(\nabla \cdot (g_k \mathbf{V}_k)) / g_k$. Par conséquent, lorsque la fraction volumique de phase est spatialement invariante le taux de dilatation peut être exprimé comme $(\nabla \cdot (\mathbf{V}_k))$. Il s'en suit que, pour chaque phase continue, le vecteur de contrainte moyen est exprimé comme [Bennon & Incropera 1987a] :

$$g_k \tau_{kx} = \mu_k \nabla (g_k u_k) - \frac{2}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k \mathbf{V}_k) \hat{\mathbf{i}} + \tau_{kx}^0 \quad (3.19)$$

où τ_{kx}^0 représente les contraintes visqueuses non incluses dans $\mu_k \nabla (g_k u_k)$. En coordonnées Cartésiennes ce terme est exprimé comme :

$$\tau_{kx}^0 = \mu_k \left[\frac{\partial}{\partial x} (g_k u_k) \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial x} (g_k v_k) \hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial}{\partial x} (g_k w_k) \hat{\mathbf{k}} \right] \quad (3.20)$$

Si les viscosités de phase sont supposées *constantes*, il peut être montré que :

$$\nabla \cdot \left(\sum_k \left[\tau_{kx}^0 - \frac{2}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k \mathbf{V}_k) \hat{\mathbf{i}} \right] \right) = \sum_k \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k \mathbf{V}_k) \right] \quad (3.21)$$

La substitution des équations (3.19) et (3.21) dans l'équation (3.18), donne :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u) = \nabla \cdot \left(\sum_k \mu_k \nabla (g_k u_k) \right) - \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V})(u_k - u) \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x + F_x \quad (3.22)$$

où

$$p = \sum_k \left[g_k p_k - \frac{1}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k \mathbf{V}_k) \right] \quad (3.23)$$

Considération dans la zone multi phase (perméabilité dans zone pâteuse) :

La prescription de la force d'interaction de phase F_x nécessite une attention spéciale de la morphologie de la région multi phase. À la différence de l'hypothèse que la zone pâteuse est considérée comme un milieu poreux ou autre (chapitre 2). [Bennon & Incropera 1987a] regardent la zone pâteuse comme un **recouvrement continu**, qui est simultanément occupé par le solide et le liquide. Pour un large éventail de systèmes à changement de phase solide-liquide multi-constituant, la région multiphase (pâteuse) est caractérisée par une *matrice solide fine et perméable* qui peut être souvent considérée stationnaire (*solidification statique*) ou en translation forcée (*solidification continue*).

Loi de Darcy utilisé pour le liquide dans zone pâteuse.

Pour de tels systèmes, des analogies existent avec des écoulements à dans un milieu poreux (voir chapitres 1 et 2). Spécifiquement, la loi de Darcy suggère que les forces d'interaction de phase sont proportionnelles à la vitesse superficielle (ou de décharge) u_l de liquide relative à la vitesse du solide poreux u_s . Ce qui est traduit par :

$$F_x = \frac{\mu_l}{K_x} g_l u_r \quad (\text{loi de Darcy légèrement modifiée}) \quad (3.24)$$

où K_x représente la composante d'une perméabilité *anisotropique* qui influence le transport de quantité de mouvement selon la direction x et $(u_r = u_l - u_s)$ représente la composante selon x de la vitesse relative de phase.

Si de plus il est supposé que :

- les masses volumiques de phases sont constantes (ex. ρ_l et ρ_s sont constantes) ; la matrice solide est libre de contrainte interne ($\nabla(g_s u_s = \mathbf{0})$) et se déplace à une vitesse prescrite \mathbf{V}_s ; et

- les contraintes visqueuses résultantes des gradients locaux de masse volumique sont négligeables ($\nabla(\rho/\rho_l) = \mathbf{0}$). L'équation (3.24) peut être substituée dans l'équation (3.22). Par l'invocation des identités $g_l = (\rho/\rho_l)f_l$ et $f_l u_r = u - u_s$, il s'en suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right) - \frac{\mu_l}{K_x} \frac{\rho}{\rho_l} (u - u_s) - \nabla \cdot (\rho f_s f_l \mathbf{V}_r u_r) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x \quad (3.25)$$

Le terme $(-\nabla \cdot (\rho f_s f_l \mathbf{V}_r u_r))$ représente les forces internes établies comme une conséquence de variations dans les vitesses relatives de phase. Cette contribution inertielle s'apparaisse seulement dans la région multiphasés (pâteuse), où les perméabilités sont extrêmement petites et cette contribution est négligeable comparée à la force d'amortissement de Darcy $(-\frac{\mu_l}{K_x} \frac{\rho}{\rho_l} (u - u_s))$.

Par conséquent, l'expression continue finale pour la conservation de quantité de mouvement dans la direction x peut être écrite comme [Bennon & Incropera 1987a] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right) - \frac{\mu_l}{K_x} \frac{\rho}{\rho_l} (u - u_s) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x \quad (3.26)$$

Remarque 3.2. L'équation (3.26) peut se réduire aux limites de phase seule appropriée comme $K_x \rightarrow 0$ (solide pur) et $K_x \rightarrow \infty$ (liquide pur).

Par une démarche semblable les équations continues pour la conservation de quantité de mouvement dans les directions y et z peuvent être obtenues, telles que :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} v) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla v \right) - \frac{\mu_l}{K_y} \frac{\rho}{\rho_l} (v - v_s) - \frac{\partial p}{\partial y} + \rho B_y \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} w) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla w \right) - \frac{\mu_l}{K_z} \frac{\rho}{\rho_l} (w - w_s) - \frac{\partial p}{\partial z} + \rho B_z \quad (3.28)$$

Où sous forme générale telle que :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla \mathbf{V} \right) - \frac{\mu_l}{\mathbf{K}} \frac{\rho}{\rho_l} (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s) - \nabla p + \rho \mathbf{B} \quad (3.29)$$

Remarque 3.3. Cas de présence et absence de champs magnétiques. Si nous assumons que le mouvement fluide est dirigé seulement par la flottabilité thermique et solutale et invoquant l'approximation de Boussinesq, les termes de force de volume apparaissant dans les équations de quantité de mouvement sont exprimés comme :

$$\rho B_x = 0 \quad (3.30)$$

$$\text{et} \quad \rho B_y = \rho_l g \left[\beta_T (T - T_0) + \beta_C (f_l^\alpha - f_0^\alpha) \right] \quad (3.31)$$

avec la composante hydrostatique $\rho_l g y$ incluse la composante isotropique de contrainte p .

Si nous assumons la présence d'un champ magnétique la prise en compte de terme de force de Laplace (voir chapitre 1 et 2) doit être considérée. En outre l'équation de conservation de charge électrique doit être rajoutée au système d'équations. Pour plus de détails (voir chapitre 4).

3.2.8 Équation de conservation d'énergie

L'écriture de conservation d'énergie pour la phase k peut être obtenue à partir de l'équation (3.7) avec $\phi_k = h_k$, $\mathbf{J}_k = -k_k \nabla T$ et $S_k = \dot{E}_k$, conduisant à :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}_k h_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_k \mathbf{V}_k h_k) = \nabla \cdot (g_k k_k \nabla T) + g_k \dot{E}_k \quad (3.32)$$

où l'équilibre thermodynamique local [Bennon & Incropera 1987a] a été supposé ($T_k = T$) et le terme source \dot{E}_k représente la production d'énergie associée avec la phase k . L'équation continue de conservation d'énergie est obtenue :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \bar{\rho}_k h_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k h_k \right) = \nabla \cdot \left(\sum_k g_k k_k \nabla T \right) + \sum_k g_k \dot{E}_k$$

Si aucune production ou absorption n'est considérée :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \bar{\rho}_k h_k \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k h_k \right) = \nabla \cdot \left(\sum_k g_k k_k \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3.33)$$

où la conductivité de mélange est

$$k = \sum_k g_k k_k \quad (3.34)$$

Le terme convectif peut être décomposé en contributions dues au mouvement moyen de mélange et mouvement relatif de phase :

$$\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k h_k = \rho \mathbf{V} h + \sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V})(h_k - h) \quad (3.35)$$

où l'enthalpie de mélange est :

$$h = \frac{1}{\rho} \sum_k \bar{\rho}_k h_k = \sum_k f_k h_k \quad (3.36)$$

Substituons dans l'équation (3.33), il s'en suit que :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V})(h_k - h) \right) \quad (3.37)$$

Dans la formulation [Bennon & Incropera 1987a] l'enthalpie de phase k est définie comme :

$$h_k = \int_0^T c_k dT + h_k^0 \quad (3.38)$$

où c_k représente la chaleur spécifique effective de la phase k . Pour de phases consistant en des constituants *non-déformables*, la prescription des chaleurs spécifiques de phase et conductivités thermiques doivent dépendre des résultats *empiriques*. Substituant l'identité :

$$\nabla T = \frac{1}{c_k} \nabla h + \frac{1}{c_k} \nabla (h_k - h) \quad (3.39)$$

dans l'équation (3.37), il s'ensuit que :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_k} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_k} \nabla (h_k - h) \right) - \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}) (h_k - h) \right) \quad (3.40)$$

où, pour le cas spécial d'un système de deux phase (solide-liquide) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho f_s (h_l - h_s) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)] \quad (3.41)$$

3.2.9 Équation de conservation de soluté (espèce chimique)

L'écriture de conservation pour l'espèce peut être obtenue à partir de l'équation (3.7) avec $\phi_k = f_k^\alpha$, $\mathbf{J}_k = -\rho_k D_k \nabla f_k^\alpha$ et $S_k = \dot{M}_k$, menant à :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_k f_k^\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_k \mathbf{V}_k f_k^\alpha) = \nabla \cdot (\mathbf{g}_k \rho_k D_k \nabla f_k^\alpha) + \mathbf{g}_k \dot{M}_k \quad (3.42)$$

où \dot{M}_k représente la production ou l'annihilation de l'espèce α dans la phase k . L'équation continue de conservation des espèces est obtenue par sommation des équations de conservation pour chaque phase et reconnaissant que la production d'espèce α dans la phase k doit être accompagnée par une destruction de l'espèce α dans les autres phases ($\sum_k \mathbf{g}_k \dot{M}_k = 0$). De là :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_k \bar{\rho}_k f_k^\alpha \right) + \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k f_k^\alpha \right) = \nabla \cdot \left(\sum_k \mathbf{g}_k \rho_k D_k \nabla f_k^\alpha \right) \quad (3.43)$$

Le flux convectif d'espèce peut être décomposé en contributions à partir de mouvement moyen de mélange et de mouvement relatif de phase :

$$\sum_k \bar{\rho}_k \mathbf{V}_k f_k^\alpha = \rho \mathbf{V} f_m^\alpha + \sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}) (f_k^\alpha - f_m^\alpha) \quad (3.44)$$

où la concentration de mélange (m) d'espèce α est :

$$f_m^\alpha \equiv f^\alpha = \frac{1}{\rho} \sum_k \bar{\rho}_k f_k^\alpha = \sum_k f_k f_k^\alpha \quad (3.45)$$

Substituant les équations (3.44) et (3.45) dans l'équation (3.43), il s'en suit que :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho f_m^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f_m^\alpha) = \nabla \cdot \left(\sum_k \mathbf{g}_k \rho_k D_k \nabla f_k^\alpha \right) - \nabla \cdot \left(\sum_k \bar{\rho}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}) (f_k^\alpha - f_m^\alpha) \right)$$

par conséquent :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho f_m^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f_m^\alpha) = \nabla \cdot \left(\sum_k \rho_k \mathbf{g}_k D_k \nabla f_k^\alpha \right) - \nabla \cdot \left(\sum_k \rho_k \mathbf{g}_k (\mathbf{V}_k - \mathbf{V}) (f_k^\alpha - f_m^\alpha) \right) \quad (3.46)$$

Pour un système deux-phase solide-liquide, la diffusion dans la phase solide peut être négligée relativement que celle dans la phase liquide $D_l \gg D_s$. Avec cette hypothèse et l'identité :

$$\nabla f_l^\alpha = \nabla f^\alpha + \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha) \quad (3.47)$$

l'équation (3.44) s'exprime comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho f^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f^\alpha) = \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) + \nabla \cdot [\rho D \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha)] - \nabla \cdot [\rho (f_l^\alpha - f^\alpha) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)] \quad (3.48)$$

où le coefficient de diffusion de masse de mélange est

$$D = f_l D_l^\alpha \quad (3.49)$$

Pour des systèmes binaires, les équations de conservation doivent être considérées pour un constituant, depuis que la conservation entière d'espèce nécessite $(\sum_k f_k^\alpha = 1)$.

3.3 Relations supplémentaires de fermeture du système d'équations (équilibre local en composition)

La fermeture du système d'équations de conservation nécessite des relations supplémentaires pour les fractions de masse de phases f_k et les compositions f_k^α . Pour une large gamme d'applications pratiques, la solidification des systèmes binaires peuvent être approximées par l'hypothèse de l'équilibre local *de composition* (*absence de sous-refroidissement solutal*) aux interfaces de phases. L'hypothèse d'interface en *équilibre* n'élimine pas la possibilité des gradients de composition de phase, mais laisse plutôt entendre que la résistance au transport des atomes de constituant à travers l'interface est négligée (voir chapitre 1). Sous de telles conditions les compositions de phase, continues, peuvent être reliées à la température au moyen des diagrammes d'*équilibre* de phase de la figure 3.2, la conservation de l'espèce α peut être exprimée comme :

$$f^\alpha = f_m^\alpha = f_s f_s^\alpha + f_l f_l^\alpha \quad (3.50)$$

pour des conditions *saturées*, $f_l + f_s = 1$, et l'équation (3.50) peut être exprimée comme :

$$f_s = 1 - f_l = \frac{f^\alpha - f_l^\alpha}{(f_s^\alpha - f_l^\alpha)} \quad (3.51)$$

L'équation (3.51) est usuellement nommée *règle de levier* (chapitre 2) et est une déclaration de conservation locale de l'espèce α . La règle de levier suit directement l'expression continue pour la concentration de mélange, équation (3.45), sans égard pour le diagramme de phase binaire. Ainsi, le *diagramme de phase* sert de représentation graphique de la conservation d'espèce. Plus significativement, le diagramme de phase permet la description du transport de constituant à l'échelle atomique en termes de variables macroscopique mesurables telles que la température et composition.

Compte tenu de la remarque 3.1, nous pouvons définir le coefficient de partage à l'équilibre κ_p (chapitre 1 et 2) comme :

$$\kappa_p = f_s^\alpha / f_l^\alpha \quad (3.52)$$

Comme illustré en chapitre 1, la courbure des lignes *solidus* et *liquidus* est souvent légère, et elles peuvent être approximées par des lignes droites. Le rapport de partage d'équilibre peut ainsi être interprété comme le rapport des pentes des lignes *solidus* et *liquidus*, et l'équation (3.51) s'exprime comme :

$$f_s = \frac{1}{1 - \kappa_p} \left[\frac{T - T_{liq}}{T - T_f} \right] \quad (3.53)$$

où T est la température locale, T_{liq} , est la température de *liquidus* correspondante à f^α , et T_f est la température de fusion du système quand $f^\alpha \rightarrow 0$. En outre, les équations (3.50) et (3.52) peuvent être utilisées pour relier les compositions de phase et de mélange :

$$f_s^\alpha = \left[\frac{\kappa_p}{1 + f_s(\kappa_p - 1)} \right] f^\alpha \quad (3.54)$$

$$f_l^\alpha = \left[\frac{1}{1 + f_s(\kappa_p - 1)} \right] f^\alpha \quad (3.55)$$

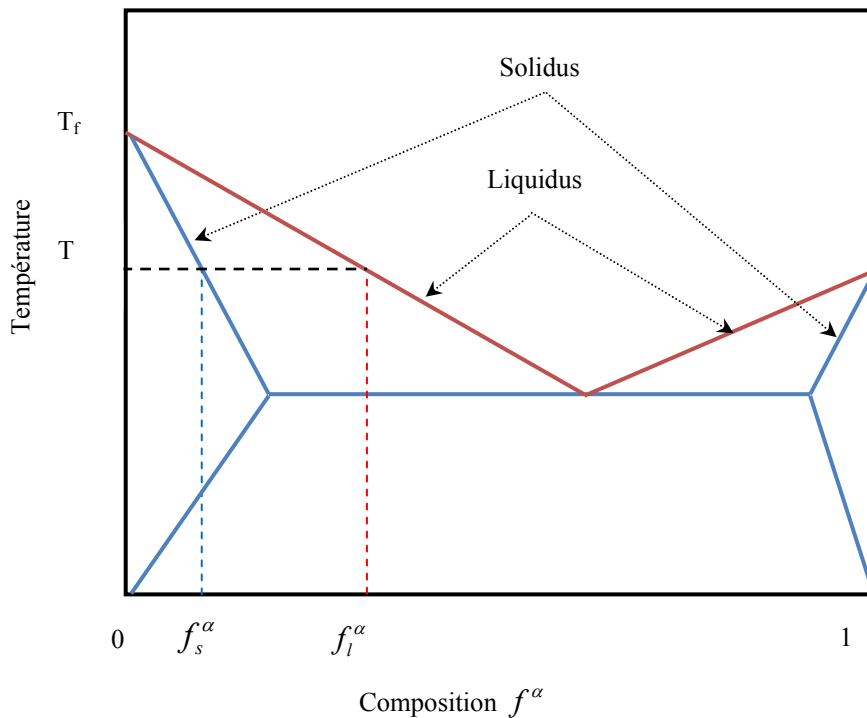


Figure 3.2 : Représentation schématique d'un diagramme d'équilibre binaire [Bennon & Incropera 1987a].

Remarque 3.3. Cette relation (3.55) est identique à l'équation (2.1) (chapitre 2).

Il est important de reconnaître que l'hypothèse de l'équilibre local n'exclue pas l'existence de conditions de *non-équilibres* sur une **large échelle macroscopique**. La redistribution macroscopique d'espèce « macro ségrégation » par les deux transports convectif et diffusif est dirigée par l'équation (3.48).

3.4 Mise des équations continues en forme adimensionnelle

Les équations (3.9 ; 3.29 ; 3.41 et 3.48) peuvent être mises sous forme adimensionnelle par l'introduction des longueurs, vitesse, temps, température, enthalpie et concentration de l'espèce, de telle sorte que les termes dominants sont de l'ordre de l'unité.

Dans le présent travail, nous nous limitons au cas bidimensionnel et nous adoptons le choix des échelles suivantes. Ce choix est fait selon des critères de telle sorte qu'elles sont appropriées aux problèmes conduits par flottabilités thermique et solutale (Byungsoo (2002) et Bennon & Incropera 1987b)) :

- Les échelles de longueur et vitesse (X_c et U_c) sont sélectionnées comme L et $\sqrt{g\beta_T \Delta T L}$ où ΔT est une échelle appropriée de température et sont typique pour les problèmes de convection induite par la flottabilité thermique ;
- L'échelle de temps t_c est le rapport de la longueur aux échelles de vitesse $\sqrt{L/g\beta_T \Delta T}$
- L'échelle de l'enthalpie (h_c) est choisie $c_l \Delta T$ et
- L'échelle de la concentration de l'espèce f_c^α est $(-\Delta T/m_{pente})$, où m_{pente} est la pente de la ligne *liquidus* sur le diagramme d'équilibre de phase (Fig. 3.3 ou 1.11), qui simplifie les relations thermodynamiques utilisées pour la fermeture (voir ci-dessous).

3.4.1 Notations adimensionnelles utilisées

Nous introduisons les variables adimensionnelles, (nous considérons le cas 2D) telles que :

Variables dépendantes adimensionnelles : $U = u/U_c$, $V = v/V_c$, $P = p/P_c$, $H = h/h_c$, $C^\alpha = f^\alpha/f_c^\alpha$, sont les composantes de vitesses, pression, température, enthalpie et concentration, respectivement, (avec $U_c = V_c$, P_c , h_c , f_c^α , sont les échelles définies précédemment respectivement).

Variables indépendantes adimensionnelles : $X = x/X_c$, $Y = y/Y_c$, $\tau = t/t_c$ coordonnées Cartésiennes et le temps (avec $X_c = Y_c$, et t_c , sont les échelles définies précédemment respectivement pour la longueur et temps) et

Caractéristiques thermo physiques adimensionnelles : dans les équations de conservation la masse volumique et la viscosité dynamique sont normalisées telles que $\underline{\rho} = \rho/\rho_c$, $\underline{\mu} = \mu/\mu_c$.

En outre, nous considérons l'approximation de Boussinesq l'équation (2.13) et la remarque 3.1, par conséquent les forces de flottabilité thermique et solutale sont données par l'équation (2.14) et

$$F_{boy} = \rho_l g = \rho_0 g [\beta_T (T - T_{ref}) - \beta_C (f_l^\alpha - f_{l,ref}^\alpha)]$$

avec
$$\rho_l = \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_{ref}) - \beta_C (f_l^\alpha - f_{l,ref}^\alpha)]$$

En forme adimensionnelle, les équations de conservation sont :

Équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho}) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V}) = 0 \quad (3.56)$$

Équation de quantité de mouvement selon x :

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho} U) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V} U) = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} \nabla U) - \frac{1}{Da} \frac{1 - g_l}{Gr_T^{1/2} g_l^3} (\underline{\rho} (U - U_s)) \quad (3.57)$$

Équation de quantité de mouvement selon y :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho} V) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V} V) = & -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} \nabla V) - \\ & - \frac{1}{Da Gr_T^{1/2}} \frac{(1-g_l)^2}{g_l^3} (\underline{\rho} (V - V_s)) + (\Theta + N_{boy} C_l^\alpha) \end{aligned} \quad (3.58)$$

avec $N_{boy} = \beta_c \Delta C / \beta_T \Delta T$ mais $\Delta C = -m_{pente} / \Delta T$ alors $N_{boy} = -\beta_c / m_{pente} \beta_T$

Équation de l'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho} H) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V} H) = & \frac{1}{Pr Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{CS} \nabla H \right) + \\ & + \frac{1}{Pr Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{CS} \nabla (H_s - H) \right) - \nabla \cdot (f_s \underline{\rho} (H_l - H_s) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)) \end{aligned} \quad (3.59)$$

avec $\lambda = 1 + g_s \left(\frac{k_s}{k_l} - 1 \right) = 1 + g_s (Rk - 1)$ et $CS = cp_s / cp_l$ et $Rk = \frac{k_s}{k_l}$.

Équation de l'espèce α :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho} C^\alpha) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V} C^\alpha) = & \frac{1}{Sc Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} (1 - f_s) \nabla C^\alpha) + \\ & + \frac{1}{Sc Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} (1 - f_s) \nabla (C_l^\alpha - C^\alpha)) - \nabla \cdot (f_s \underline{\rho} (C_l^\alpha - C_s^\alpha) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)) \end{aligned} \quad (3.60)$$

où $\Theta = \frac{T - T_E}{\Delta T}$, $H = \frac{h}{cp_l \Delta T}$; $C^\alpha = \frac{f^\alpha}{\Delta C} = \frac{-m_{pente} f^\alpha}{\Delta T}$; $C_l^\alpha = \frac{f_l^\alpha}{\Delta C} = \frac{-m_{pente} f_l^\alpha}{\Delta T}$

avec aussi (H_l, H_s) et (C_l^α, C_s^α) sont les enthalpies et compositions associées aux phases solides et liquide respectivement. En outre, les quantités adimensionnelles Gr_T , Pr , Da , Sc sont les nombres de Grashof thermique, de Prandtl, de Darcy et de Schmidt définis en tableau 2.2.

Dans le but de simplifier les relations supplémentaires pour la fermeture, les hypothèses suivantes sont faites :

1. l'équilibre thermodynamique local existe entre les phases solide et liquide ;
2. les propriétés thermo physiques de chaque phase sont constantes (exemple : pour la phase solide cp_s , k_s , sont constantes) ;
3. les lignes *liquidus* et *solidus* sur le diagramme d'équilibre de phase sont linéaires cette hypothèse signifie que la pente et le coefficient de partage sont des constantes m_{pente} et κ_p (voir chapitre 1). Alors les relations supplémentaires (tableau 3.1) de [Bennon & Incropera, 1988] peuvent être utilisées ; et
4. le coefficient de ségrégation est constant et le cas où $\kappa_p < 1$ est choisi.

3.4.2 Diagramme de phase linéaire adimensionnel

Nous étudions dans le présent travail la solidification d'un alliage binaire dont le diagramme de phase est donné par la figure 1.6.

La figure 3.3 montre la portion pertinente du diagramme d'équilibre de phase (Fig.3.2), le diagramme est linéarisé et mis sous forme adimensionnelle en terme de variables adimensionnelles Θ et C^α . Dans ce diagramme les lignes de concentration correspondent à ($\Theta_E = 0$) et celle de température ($C^\alpha = 0$). À partir de la figure 3.3, nous définissons la pente adimensionnelle de la ligne *liquidus* telle que : (nous utilisons l'équation 1.6) :

1. Droite de *liquidus*. l'axe des ordonnées correspond à Θ_{liq} et l'équation de la droite s'écrit :

$$\Theta_{liq} = m^{AD} C^\alpha + \Theta_F$$

où m^{AD} est la pente adimensionnelle de *liquidus*, qui peut être calculée comme suit :

de l'échelle de concentration : $C_l^\alpha = \frac{f_l^\alpha}{\Delta C} = \frac{-m_{pente} f_l^\alpha}{\Delta T}$; la pente s'écrit :

$$m_{pente} = -\frac{\Delta T C_l^\alpha}{f_l^\alpha} \text{ alors } m^{AD} m_c = -\frac{\Delta T C_l^\alpha}{\Delta C C_l^\alpha} \text{ ce qui implique que } m^{AD} \frac{\Delta T}{\Delta C} = -\frac{\Delta T C_l^\alpha}{\Delta C C_l^\alpha} \text{ alors :}$$

$m^{AD} = -1$. D'où l'équation de la ligne de *liquidus*

$$\Theta_{liq} = \Theta_F - C^\alpha \quad (3.61)$$

2. Droite de *solidus*. l'axe des ordonnées correspond à Θ_{sol} et l'équation de la droite s'écrit :

$$\Theta_{sol} = m_{solidus}^{AD} C^\alpha + \Theta_F$$

où $m_{solidus}^{AD}$ la pente adimensionnelle de *solidus* mais il est claire que :

$$m_{solidus}^{AD} = \frac{m^{AD}}{\kappa_p} = \frac{-1}{\kappa_p}, \text{ d'où}$$

$$\Theta_{sol} = \Theta_F - C^\alpha / \kappa_p \quad (3.62)$$

3.4.3 Détermination de l'état de l'alliage (méthode des enthalpies) :

L'état local de l'alliage est déterminé à partir de ses compositions de mélange C^α , sur lesquelles H_{sol} et H_{liq} dépendent et l'enthalpie de mélange :

$$H = f_s H_{sol} + f_l H_{liq} = f_s H_s + f_l H_l :$$

Nous avons $\Theta = (T - T_E)/(T_h - T_E)$; $\Theta_E = 0$ et le nombre de Stefan de liquide :

$$Ste_l = c_l (T_0 - T_E) / h_f = cp_l (T_h - T_E) / h_f \quad (3.63)$$

Tableau 3.1 : Les relations supplémentaires de l'enthalpie en fonction de la température, [Bennon & Incropera 1988]

Enthalpie de mélange (h_m)	Température (T)	Fraction massique de solide (f_s)
$h_m \leq h_{sol}$ (phase solide)	h_m/c_s	1
$h_{sol} < h_m \leq h_E$ (réaction eutectique)	T_{sol}	$1 - \frac{h_m - h_{sol}}{h_f}$
$h_E < h_m < h_{liq}$ (région pâteuse)	Racine de $(a_1 T^2 + a_2 T + a_3 = 0)$ où $a_1 = c_l - \frac{c_l - c_s}{1 - \kappa_p}$ $a_2 = \frac{(c_l - c_s)T_{liq}}{1 - \kappa_p} - \frac{\kappa_p h_l^0}{1 - \kappa_p} - c_l T_f - h_m$ $a_3 = (h_m - h_l^0)T_f + \frac{h_l^0 T_{liq}}{1 - \kappa_p}$	$\frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{T - T_{liq}}{T - T_f} \right)$
$h_m \geq h_{liq}$ (phase liquide)	$(h_m - h_l^0)/c_l$	0

$h_{sol} = c_s T_{sol}$

$h_E = h_{sol} + \left[1 - \frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{T_{sol} - T_{liq}}{T_{sol} - T_f} \right) \right] h_f$

$h_{liq} = c_l T_{liq} + h_l^0$

$h_l^0 = (c_s - c_l)T_E + h_f$

Le diagramme illustre la relation entre l'enthalpie et la température. La courbe est composée de trois segments linéaires : un segment à pente positive jusqu'à la température T_{sol} , un segment horizontal à T_{sol} jusqu'à la température T_{liq} , et un segment à pente positive à partir de T_{liq} . Les points (T_{sol}, h_{sol}) et (T_{liq}, h_{liq}) sont explicitement marqués sur la courbe.

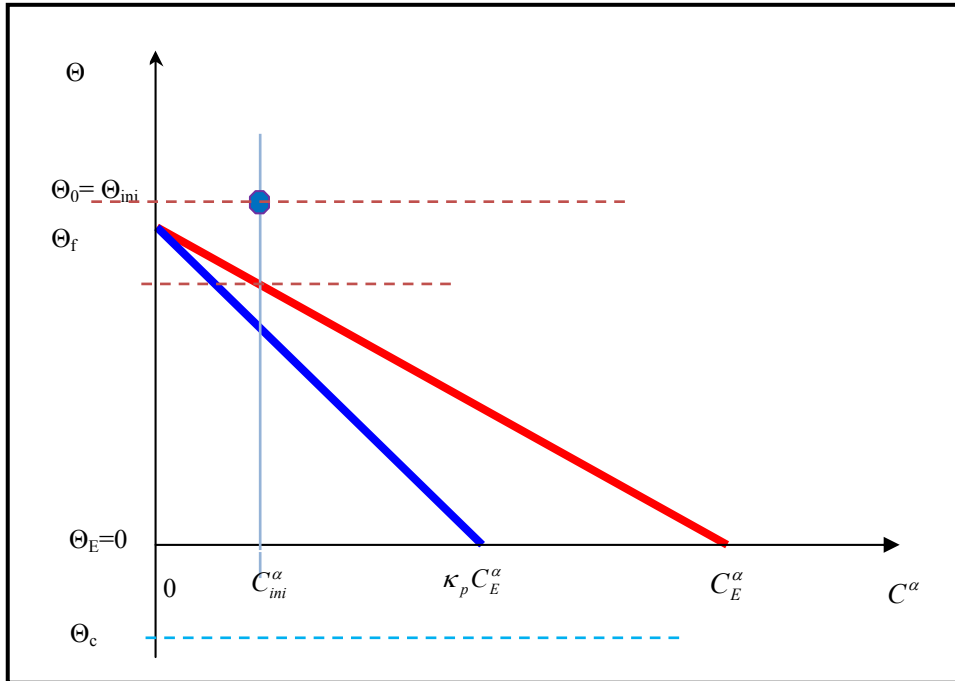


Figure 3.3 : Diagramme d'équilibre de phase linéaire et adimensionnel (Byungsoo (2002) et Bennon & Incropera 1987b))

1. Températures et enthalpies adimensionnelles

Les enthalpies adimensionnelles associées avec les températures *solidus* et *liquidus* sont données respectivement par :

Dans la phase solide (*Solidus*). ($h_m \leq h_{sol}$)

Le tableau 3.1 indique que $\{T = h/c_s\}_{sol}$ alors $\{T_{sol} = h_{sol}/c_s\}$ c'est-à-dire $T_{sol} = h_{sol}/c_s$, (aussi du tableau 3.1 nous avons : $h_{sol} = c_s T_{sol}$)

Après la mise en forme adimensionnelle la température *solidus* adimensionnelle s'écrit

$$\Theta_{sol} = H_{sol} / CS \quad (3.64a)$$

Ce qui donne l'enthalpie *solidus* adimensionnelle telle que

$$H_{sol} = CS \Theta_{sol} \quad (3.64b)$$

Dans la phase solide (*Liquidus*). ($h_m \geq h_{liq}$)

Le tableau 3.1 indique que $\{T = (h - h_l^0)/c_l\}_{liq}$ ce qui s'écrit $\{T = h/c_l - h_l^0/c_l\}_{liq}$ (aussi du tableau nous avons : $h_{liq} = c_l T_{liq} + h_l^0$)

ce qui implique que

$$T_{liq} = \frac{h_{liq}}{c_l} - \left[\frac{(c_s - c_l)T_E + h_f}{c_l} \right]$$

Sa mise en forme adimensionnelle se traduit par :

$$\Theta_{liq} = H_{liq} - \left[\frac{h_f}{c_l \Delta T} \right] = H_{liq} - \left[\frac{h_f}{c_l (T_h - T_E)} \right] = H_{liq} - \left[\frac{1}{Ste_l} \right]$$

d'où la température de *liquidus* adimensionnelle s'écrit :

$$\Theta_{liq} = H_{liq} - \frac{1}{Ste_l} \quad (3.65a)$$

Ce qui résulte à l'expression de l'enthalpie de *liquidus* adimensionnelle :

$$H_{liq} = \Theta_{liq} + \frac{1}{Ste_l} \quad (3.65b)$$

Réaction Eutectique. ($h_{sol} < h_m \leq h_E$)

Le tableau 3.1 indique que : $\{T = T_{sol}\}_E$ c'est-à-dire $T_E = T_{solE}$

Du diagramme linéarisé adimensionnel (Fig.3.3) : $\Theta_E = 0$ alors :

$$\Theta_E = \Theta_{sol} = 0 \quad (3.66a)$$

Du tableau 3.1 le calcul de h_E : $h_E = h_{sol} + \left[1 - \frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{T_{sol} - T_{liq}}{T_{sol} - T_f} \right) \right] h_f$

$$H_E = H_{sol} \quad (3.66b)$$

Région pâteuse. ($h_E < h_m < h_{liq}$)

- Le tableau 3.1 donne la température dans la zone pâteuse est la racine de ($a_1T^2 + a_2T + a_3 = 0$) pour sa solution il est choisi la racine suivante, [Bennon & Incropera (1988)] :

$$T = \frac{-a_2 - \sqrt{a_2^2 - 4a_1a_3}}{2a_1}$$

où les coefficients $a_1 = c_l - \frac{c_l - c_s}{1 - \kappa_p}$, $a_2 = \frac{(c_l - c_s)T_{liq}}{1 - \kappa_p} - \frac{\kappa_p h_l^0}{1 - \kappa_p} - c_l T_f - h_m$, et

$$a_3 = (h_m - h_l^0)T_f + \frac{h_l^0 T_{liq}}{1 - \kappa_p}$$

- $a_1 = c_l - \frac{c_l - c_s}{1 - \kappa_p}$ où sous forme adimensionnelle il s'écrit :

$$A_1 = \left(1 - \frac{1 - CS}{1 - \kappa_p}\right) = 1 + \frac{CS - 1}{1 - \kappa_p} \quad (3.67a)$$

- $a_2 = \frac{(c_l - c_s)T_{liq}}{1 - \kappa_p} - \frac{\kappa_p h_l^0}{1 - \kappa_p} - c_l T_f - h_m$; et $h_l^0 = (c_s - c_l)T_E + h_f$, sous forme adimensionnelle il s'écrit :

$$A_2 = \frac{(1 - CS)\Theta_{liq}}{(1 - \kappa_p)} - \frac{\kappa_p}{1 - \kappa_p} \left[\frac{1}{Ste_l} \right] - \Theta_f - H \quad (3.67b)$$

- $a_3 = (h_m - h_l^0)T_f + \frac{h_l^0 T_{liq}}{1 - \kappa_p}$ où sous forme adimensionnelle il s'écrit

$$A_3 = \left\{ H - \frac{1}{Ste_l} \right\} \Theta_f + \frac{\Theta_{liq}}{(1 - \kappa_p)} \left[\frac{1}{Ste_l} \right] \quad (3.67c)$$

- Alors la température adimensionnelle dans la zone pâteuse est la racine de ($A_1\Theta^2 + A_2\Theta + A_3 = 0$). Cette racine est donnée par :

$$\Theta = \frac{-A_2 - \sqrt{A_2^2 - 4A_1A_3}}{2A_1} \quad (3.68a)$$

2. Fractions massiques et compositions en fonction des températures et enthalpies

Dans la région solide (*Solidus*). ($h_m \leq h_{sol}$)

Le tableau 3.1 montre que $T_{sol} = h_{sol}/c_s$ On a trouvé $H_{sol} = CS \Theta_{sol}$ aussi

$$f_s = 1 \quad (3.68b)$$

Mais $f_m^\alpha = f_s f_s^\alpha + f_l f_l^\alpha$ implique $f_m^\alpha = f_s f_s^\alpha = f_s^\alpha$

Alors $C_m^\alpha \Delta C = f_s C_s^\alpha \Delta C$

$$C_s^\alpha = C^\alpha / f_s = C^\alpha / 1 = C^\alpha$$

D'où $C_s^\alpha = C^\alpha$

En utilisant les relations (3.61) et (3.62) et avec $C_s^\alpha = \kappa_p C_l^\alpha$ ce qui donne

$$C_l^\alpha = C_s^\alpha / \kappa_p = C^\alpha / \kappa_p = (\Theta_f - \Theta_{sol})$$

Dans la région liquide (*Liquidus*). ($h_m \geq h_{liq}$)

Le tableau 3.1 donne $\{T = (h - h_i^0)/c_l\}_{liq}$ et nous avons trouvé que $H_{liq} = \Theta_{liq} + \frac{1}{Ste_l}$

aussi le tableau 3.1 donne la fraction solide :

$$f_s = 0 \quad (3.69a)$$

mais $f_m^\alpha = f_s f_s^\alpha + f_l f_l^\alpha$ ce qui implique que $f_m^\alpha = f_l f_l^\alpha = f_l^\alpha$

sa mise en forme adimensionnelle celle-ci implique que

$$C_m^\alpha \Delta C = f_l C_l^\alpha \Delta C$$

$$C_{liq}^{\alpha} \equiv C_l^{\alpha} = C^{\alpha} / f_l = C^{\alpha} / 1 = C^{\alpha}$$

Alors la composition de phase liquide dans la région liquide s'écrit : $C_l^{\alpha} = C^{\alpha}$

En utilisant les relations (3.61) et (3.62) et avec $C_s^{\alpha} = \kappa_p C_l^{\alpha}$ ce qui donne

$$C_s^{\alpha} = \kappa_p C_l^{\alpha} = \kappa_p C^{\alpha} = \kappa_p (\Theta_f - \Theta_{liq})$$

Réaction Eutectique. ($h_{sol} < h_m \leq h_E$)

Le tableau illustre que $\{T = T_{sol}\}_E$ et nous avons trouvé $\Theta_E = \Theta_{sol} = 0$ et du diagramme

($H_E = H_{sol}$). Aussi la fraction solide est donnée en tableau 3.1 telle que $\left\{f_s = 1 - \frac{h_m - h_{sol}}{h_f}\right\}_E$

et avec des enthalpies adimensionnelles

$$f_{s,E} = 1 - Ste_l(H - H_{sol}) \quad (3.69b)$$

Région pâteuse $h_E < h_m < h_{liq}$

on a trouvé $\Theta = \frac{-A_2 - \sqrt{A_2^2 - 4A_1A_3}}{2A_2}$ et aussi du

(tableau**) :

$$f_s = \frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{T - T_{liq}}{T - T_f} \right), \text{ alors } f_s = \frac{1}{1 - \kappa_p} \left(\frac{\Theta - \Theta_{liq}}{\Theta - \Theta_f} \right) \quad (3.70)$$

Tableau 3.2 : les équations de conservation continues et descriptions des paramètres continus les plus importants :

Terme temporelle	Terme convectif	Terme diffusif	Terme source		
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi_m)$	$+$	$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \phi_m)$	$= \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi_m)$	$+$	S_ϕ
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho)$	$+$	$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V})$	$= 0$		
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u)$	$+$	$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V} u)$	$= \nabla \cdot \left(\mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right)$	$-$	$\frac{\mu_l}{K_x} \frac{\rho}{\rho_l} (u - u_s) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x$
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h)$	$+$	$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V} h)$	$= \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \right) - \nabla \cdot [\rho f_s (h_l - h_s) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)]$		
$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f^\alpha)$	$+$	$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f^\alpha)$	$= \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) + \nabla \cdot [\rho D \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha)] - \nabla \cdot [\rho (f_l^\alpha - f^\alpha) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)]$		
Variable dépendante continue		$\phi_m = f_s \phi_s + f_l \phi_l$			
Masse volumique continue		$\rho = g_s \rho_s + g_l \rho_l$			
Conductivité thermique continue		$k = g_s k_s + g_l k_l$			
Coefficient de diffusion massique continu		$D = f_l D_l^\alpha \quad (D_s^\alpha \rightarrow 0)$			
Enthalpie de phase		$h_k = \int_0^T c_k dT + h_k^0$			
Perméabilité (équation de Carman-Kozeny (1.30))		$K_x = K_0 \frac{g_l^3}{(1 - g_l)^2}$			

3.5 La méthodologie de solution :

Chacune des équations continues de conservation est mise sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi_m) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\phi_m) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi_m) + S_\phi \quad (3.71)$$

où ϕ_m , Γ et S_ϕ , représentent une variable continue dépendante générale (à savoir : U, V, H ou C^α), un coefficient de diffusion général et un terme source général, respectivement.

Le tableau 3.2 fournit un résumé des équations de conservation et les descriptions des paramètres continus pertinents. D'autre part, en outre, chaque équation a été intentionnellement posée en forme générale :

$$\partial(\rho\phi_m)/\partial t + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\phi_m) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi_m) + (S_c + S_p\phi_m) \quad (3.72)$$

où ϕ_m représente une variable continue générale telle que l'enthalpie ou la fraction massique de soluté ou une composante de vitesse de masse moyenne, alors que le dernier terme représente le terme source S_ϕ qui a été linéarisé.

Équations Continues Discrétisée Générale :

Le schéma en différences-finies fondé sur la méthode de volume de contrôle (méthode de volumes finis) [Patankar, 1980] et son application aux problèmes de changement de phase **peut être appliqué pour la discrétisation de l'équation (4.3)**. Il est supposé que le lecteur est familier de la nomenclature utilisés dans le développement de cette procédure de résolution. Les détails de dérivation de plusieurs des équations discrétisées sont donnés par [Patankar, 1980].

La figure 3.4 illustre un volume de contrôle typique partiellement solidifié et la nomenclature pertinente à un système cartésien 2D est considérée. La figure 3.3 illustre un diagramme binaire de phase linéarisé qui fournit les prescriptions nécessaires de fraction de masse solide (f_s) et la composition liquide (f_l^α) en termes des variables dépendantes température ou enthalpie et la composition moyenne (f_m^α). Ces descriptions sont fondées sur

les hypothèses d'équilibre invoquées dans la région pâteuse [Bennon & Incropera 1987a] et sont applicables en dessus de la température *solidus* et en dessous de la température *liquidus*.

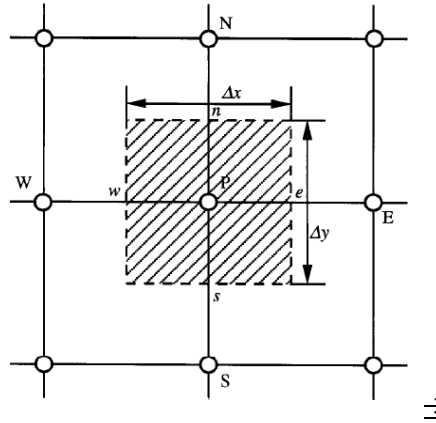


Figure 3.4 : illustration d'un volume de contrôle [Patankar, 1980]

- En dessus de la température *liquidus*, la fraction massique de solide est identiquement zéro ($f_s = 0$) et ($f_l^\alpha = f_m^\alpha$).
- Semblable, en dessous de la température *solidus*, où ($f_s = 1$) la composition liquide f_l^α n'a pas de signification physique.
- L'hypothèse de l'équilibre global n'exclue pas l'existence des conditions de non-équilibre sur une échelle macroscopique. La redistribution macroscopique d'espèce par les deux mécanismes de convection et diffusion est régie par l'équation de conservation de l'espèce montrée en tableau 3.2.

Remarque 3.5. Pour plus de détails concernant la méthodologie de résolution numérique voir chapitre 4.

Chapitre 4 - Étude numérique de solidification d'un alliage binaire dans une cavité rectangulaire

4.1 Introduction

Dans le présent chapitre nous appliquons le modèle mathématique, présenté en chapitre 3, pour étudier numériquement la solidification d'un alliage binaire dans une cavité rectangulaire. En particulier, le modèle développé a été appliqué pour calcul des écoulements de convection double-diffusive et macroségrégations associées aux trois cas de solidification de systèmes d'alliages binaires.

➤ Les calculs ont été entrepris, en premier lieu, sur un cas de solidification latérale du système d'alliage binaire ***Pb-10 pds% Sn***. Un examen de stabilisation de l'écoulement par champ magnétique a été également réalisé. Les résultats de calculs numériques pour la solidification de ce système sont présentés par la suite (section 4.4.2).

➤ D'autre part, dans le but de valider le modèle présenté, des calculs ont été également entrepris sur les alliages ***Sn- 5% pds Pb et Pb- 48 pds %Sn***. Le cas test de Hebditch et Hunt (1974), qui considère la solidification de petits lingots parallélépipédiques d'alliages ***Sn-5%Pb*** et ***Pb-48%Sn***, est considéré. Ce test est intéressant car il a déjà fait l'objet d'études comparatives dans la littérature [Ahmad et al (1998) ; Kämpfer (2002) et Weitao (2005) ; Gouttebroze et al 2007]] et il implique des tendances opposées en termes de convection thermosolutale. Dans le cas du premier alliage (***Sn-5%Pb***), les convections thermique et solutale se conjuguent, donnant lieu à une forte tendance à la formation de *canaux ségrégés* (discutés en chapitre 2). Dans le cas du second alliage (***Pb-48%Sn***), ces convections s'opposent, mais la macroségrégation est également marquée. ***La comparaison*** entre les résultats de simulation du *modèle présenté* avec des résultats de simulation par d'autres modèles et *mesures expérimentales*, montre un bon accord *qualitatif*. Les influences de la discrétisation spatiale (taille de maillage) et temporelle (pas de temps) sont alors discutées, notamment par rapport à la capacité de prédiction des *canaux ségrégés*. Les résultats sont présentés dans les sections 4.5.1 et 4.5.2. Il est montré que les *canaux ségrégés* (ceux *inclinés*)

peuvent être détectés à condition d'utiliser des tailles de maillage et pas de temps suffisamment fines.

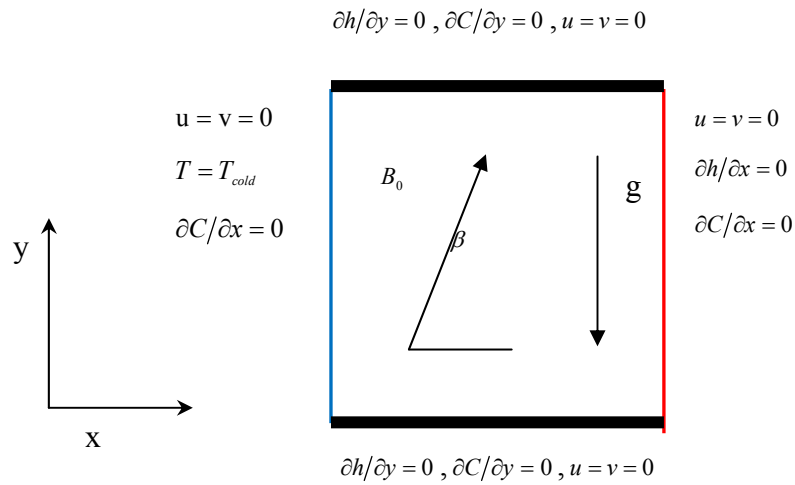


Figure 4.1 : géométrie rectangulaire de cavité et conditions aux limites considérées.

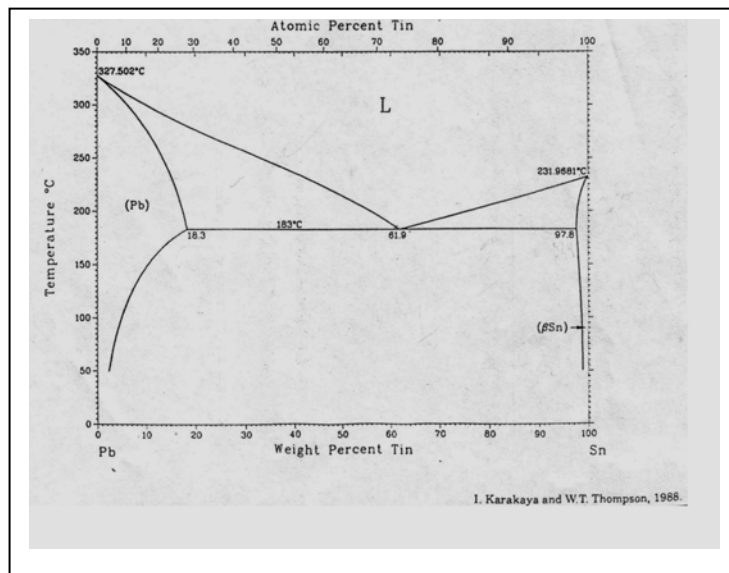


Figure 4.2: Diagramme binaire de l'alliage Pb-Sn (Plomb-étain).

Tableau 4.1 : Propriétés thermophysiques de l'alliage *Pb- 10 pds% Sn* (dans ce cas le constituant $\alpha = \text{Sn}$) [Weitao 2005]

Propriétés	Liquide	Solide
Chaleur spécifique ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)	167	167
Conductivité thermique ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)	18,2	18,2
Masse volumique (kg m^{-3})	10100	10100
Coefficient de diffusion de masse ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	3×10^{-9}	-
Viscosité dynamique ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$2,4947 \times 10^{-3}$	-
Chaleur latente de fusion, h_f (J kg^{-1})	26000	
Espacement de bras dendritique secondaire (m)	40×10^{-6}	
Coefficient de dilatation thermique, β_T (K^{-1})	$1,2 \times 10^{-4}$	
Coefficient de dilatation solutale, β_s ($\text{pds}\%^{-1}$)	$5,15 \times 10^{-3}$	
Température eutectique, T_e ($^{\circ}\text{C}$)	183	
Température de la paroi froide, T_c ($^{\circ}\text{C}$)	25 $^{\circ}\text{C}$	
Composition eutectique, $f_{l,e}^{\alpha}$ ($\text{pds}\%$)	61,9	
Point de fusion de Pb, T_f ($^{\circ}\text{C}$)	327,5	
Rapport de partage d'équilibre, κ_p	0,307	
Conductivité électrique (estimée) (S/m)	10^6	
Rapport de forme, A ($H = 0,1 \text{ m}$ et $L = 0,1 \text{ m}$)	1	

Tableau 4.2 : Nombres adimensionnels et autres paramètres (calculés) de l'alliage binaire *Pb- 10pds% Sn*

Quantité adimensionnelle	Symbole	Valeur
Nombre de Darcy	$Da = K_0/L^2$	$2,22 \times 10^{-5}$
Nombre de Prandtl	$Pr = \nu/\alpha$	0,023
Nombre de Grashof	$Gr = \beta_T g \Delta T L^3 / \nu^2$	$2,3347 \times 10^9$
Nombre de Schmidt	$Sc = \nu/D_l$	82,33
Nombre de Hartmann	$Ha = B_0 L \sqrt{\sigma_c / \nu \rho_l} \approx 2304 B_0$	les valeurs suivantes sont supposées 57,62 ; 115,23 ; 172,84 et 230,48
Nombre de Stefan	$Ste_l = c_p \Delta T / h_f$	0,777
Rapport de chaleurs spécifiques	$CS = c_s / c_l$	1,00
Rapport de conductivités thermiques	$Rk = k_s / k_l$	1,00
Rapport de flottabilité	$N_{boy} = \beta_s \Delta C / \beta_T \Delta T$	18,3

Remarque 4.1. Pour examiner l'effet d'un champ magnétique, l'hypothèse qui consiste à négliger le champ électrique \mathbf{E} a montrée à être acceptable dans la limite d'un écoulement bidimensionnel [Gelfgat & Bar-Yoseph, 2001] ce qui élimine le besoin de résoudre l'équation de conservation du potentiel électrique en bidimensionnel (du fait que, dans le cas 2D, l'équation de conservation de charge électrique (potentiel) se réduit à $\nabla^2\Phi = 0$) (voir section 2.7.3 (Chapitre 2)), par conséquent, les conditions aux limites (pour le champ magnétique) sur les parois ne sont pas illustrées sur la Fig. 4.1.

4.2. Considérations générales et modèle mathématique

Géométrie et alliage choisis (pour le premier cas *Pb-10%Sn*)

En premier lieu, la solidification est considérée dans une cavité rectangulaire de dimensions (L x H) avec (L = H = 0,10 m), comme il est montré en figure 4.1. Initialement la cavité est isolée et chargée avec une fonte surchauffée de température T_0 et composition $f_{l,0}^\alpha$ et le système est supposé en équilibre (Fig.4.2). Le changement de phase est initié au temps ($t=0$) par l'apport d'une limite verticale à une température T_c qui est moins que la température eutectique T_E .

Les calculs numériques ont été réalisés, en premier lieu, pour l'alliage fondu (*Pb-10pds% Sn*) (un conducteur électrique), qui a des propriétés thermophysiques bien établies et solidifie en une manière qui est typique de plusieurs alliages métalliques [Weitao 2005]. En outre, le système montre une croissance dendritique qui est analogue à une classe importante d'alliages métalliques.

Dans ce premier cas d'étude **trois situations** sont considérées :

1- **La situation I** : pour illustrer la signification de mouvement dans les régions pâteuse et masse liquide pour le comportement de transport macroscopique, la solidification est induite par réduction de température d'une surface verticale d'une valeur T_c , qui est inférieure de la température eutectique T_E , alors que nous considérons que la condition sur surface opposée est adiabatique (aucune stabilisation par champ magnétique n'est considérée). Les deux autres surfaces sont considérées à être isolées (adiabatiques).

2- **La situation II** : la solidification est induite par réduction de la température d'une surface verticale à T_c , avec l'application d'un champ magnétique dans la direction horizontale. Les valeurs (Ha) de (57,62 ; 115,23 ; 172,84 ; 230,48 et 460 (c.-à-d. $B_0=0,025$; 0,05 ; 0,075 ; 0,1 et 0,2 Tesla)) sont considérées.

3-**La dernière situation (III)** : consiste à examiner la stabilisation par champ magnétique appliqué verticalement. Les valeurs (Ha) de (57,62 ; 115,23 ; 172,84 et 230,48 ($B_0=0,025$; 0,05 ; 0,075 et 0,1 Tesla)) sont considérées.

Dans chaque situation la composition initiale uniforme f_0^{Sn} est choisie à être 0,10 (c.-à-d. 10%) et la température initiale (T_0) et la température de la paroi froide (T_c) sont sélectionnées comme étant : 304°C et 25°C, respectivement. La composition et température eutectique sont $f_E^{Sn} = 0,619$ (soit 61,9%) et $T_E=183^\circ\text{C}$ respectivement.

Remarque 4.2. Il est Noté que le gradient de température appliqué ici est très important, ce qui résulte en un nombre de Grashof très élevé $Gr_T \approx 2,33 \times 10^9$ (Tableau 4.2), ce qui donne un nombre Rayleigh $Ra_T \approx 5,35 \times 10^7$, ceci peut conduire à des conditions de convection caractérisées par des écoulements *instables* de *fortes* intensités. En outre, depuis que le rapport de force flottabilité N_{boy} pour le système *Pb-10%Sn* est de l'ordre de (≈ 18) ce qui implique que la convection solutale est *fortement* dominante.

Remarque 4.3. Pour maintenir la saturation de mélange à l'intérieure de la cavité, les masses volumiques de phase liquide et solide sont assumées, ici, égales et la phase solide est assumée stationnaire ($\mathbf{V}_s = \mathbf{0}$). Le mouvement de convection est ainsi dirigé par les forces de flottabilité thermique et solutale seulement dans la première situation et aussi par la force de Lorentz pour les autres situations. Dans chaque situation, les propriétés thermophysiques sont assumées constantes, avec l'exception de variations de masse volumique qui apparaissent dans les termes de flottabilité. Les propriétés thermophysiques pertinentes du système *Pb-10pds% Sn* ont été tabulées (tableau 4.1) [Weitao 2005]. Les quantités adimensionnelles du système, calculées à partir de ces propriétés, sont tabulées en tableau 4.2.

La version adimensionnelle du système des équations continues de conservation de masse, quantité de mouvement, chaleur et soluté dans les systèmes binaires à changement de phase solide-liquide, présentées en chapitre 3 ((3-56)-(3-60)) et résumées en tableau 3.2 avec les

relations supplémentaires fournies dans ce tableau sont considérées, ici, avec les hypothèses suivantes.

Hypothèses : les hypothèses incluent (i) les conditions d'un mélange saturé $g_s + g_l = 1$; (ii) l'écoulement dans la phase liquide est laminaire, de viscosité constante et Newtonien ; (iii) les masses volumiques de phases sont constantes excepter pour les variations des termes de flottabilités (iv) la validité de l'approximation de Boussinesq ; (v) l'équilibre thermique et solutal local et (vi) la diffusion d'espèce dans la phase solide est négligeable ($D_s^\alpha = 0$). En outre, (vii) la phase solide est assumée à être non-déformable et sans contraintes internes, alors que (viii) la région multi-phase est regardée comme étant une *matrice solide fine et perméable caractérisée* par une perméabilité isotropique K (avec la condition de solidification statique $\mathbf{V}_s = \mathbf{0}$). Bien que pas de restrictions générales sont associées avec la prescription des chaleurs spécifiques et conductivités thermiques des phases, chacune est assumée à être constante dans la présente analyse (tableau 4.1). Les enthalpies de phases, définies en tableau 3.2, sont considérées.

Remarque 4.4. L'exigence d'un mélange saturé et une phase solide sans contrainte à travers la cavité imperméable nécessite l'hypothèse que $\rho_s = \rho_l$ et d'ici l'égalité des fractions de volume et de masse des phases ($g_k = f_k$). Sans cette hypothèse la formation d'un vide, pour $\rho_s > \rho_l$, doit violé la contrainte de mélange saturé $g_s + g_l = 1$. Similairement, pour $\rho_s < \rho_l$, la contrainte d'une phase solide sans contrainte peut être forcée. Les équations de conservation continues sont simplifiées davantage en assumant la phase solide à être stationnaire (immobile) ($\mathbf{V}_s = \mathbf{0}$).

Remarque 4.5. Modèle de Perméabilité choisi. La prescription d'une perméabilité de la région multi-phase nécessite la considération de *morphologie de croissance* spécifique au système binaire sous considération. Dans la présente analyse la perméabilité est assumée à varier avec la fraction de volume du liquide en accordant à l'équation de Kozeny-Carman (ou Blake-Kozeny) (équation 1.30) (chapitre 1)).

$$K = K_0 \left[g_l^3 / (1 - g_l)^2 \right] \quad (4.1)$$

où K_0 est une constante qui dépende de la morphologie spécifique de la région multi-phase. Dans le solide pur ($g_l = 0$) et le liquide pur ($g_l = 1$), l'équation (4.1) se réduit aux limites appropriées, à savoir, $K=0$ et ∞ , respectivement.

Il faut noter que l'équation (4.1) est généralement considérée comme valide dans le régime d'écoulement laminaire et pour les fractions de volume du liquide inférieures que 0,5 [Bennon & Incropera 1987b]. À proprement parler, la relation peut devenir suspect dans les régions près de l'interface liquidus où les passages d'écoulement deviennent dilatées. Dans l'analyse présentée la sélection de l'équation de Kozeny-Carman est basée sur la disponibilité de la donnée géométrique (espacement de bras de dendrite) pour le système *Pb-10Sn* et son implémentation réussie par des investigateurs précédents [Bennon & Incropera 1987b ; Weitao, 2005 ; Kämpfer, 2002]. D'autres modèles de perméabilité convenablement justifiés peuvent, cependant, être aisément adaptés dans la formulation présentée en chapitre 3.

4.3 Procédure de résolution numérique

Discretisation :

Les équations de conservation du modèle continu sont mises en une forme générale (convection-diffusion) dans le but d'utiliser la méthode basée sur les volumes de contrôle (volumes finis). La forme générale étant :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (4.2)$$

alors

$$\partial(\rho\phi)/\partial t + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + (S_c + S_p\phi) \quad (4.3)$$

où ϕ , Γ et S_ϕ , représentent une variable dépendante continue générale (U , V , H , Θ et C^a), un coefficient de diffusion général et un terme source général, respectivement et $(S_c + S_p\phi)$ est un terme source linéarisé. L'algorithme « SIMPLER » dû à [Patankar, 1980] est utilisé pour coupler les équations de continuité à celle de quantité de mouvement. Pour la discrétisation des termes convectifs, dans le but d'éviter les erreurs de diffusion numériques du schéma de différences centrales « Central Difference Scheme (CDS) », largement reconnues dans les

problèmes dominés par convection, qui ont de large gradients de composition liquide (source induisant la convection solutale), [Prescott et al. 1991 et Byungsoo (2002)], au lieu que le schéma CDS, un schéma alternatif d'ordre élevé, nommé QUICK, [Hayase et al. 1992], est utilisé dans la discrétisation des termes de convection dans les équations d'énergie et espèce. Cependant, depuis que les équations de quantité de mouvement (dans les directions X et Y) nécessitent un traitement spécial, dans l'algorithme « SIMPLER », elles sont discrétisées en utilisant le schéma CDS [Patankar, 1980].

Choix de la taille de maillage et pas de temps

Pour la résolution du problème transitoire d'écoulement avec transfert de chaleur et masse (écoulement de convection double-diffusive), la taille de maillage sélectionnée doit être seulement regardée comme un compromis entre l'exactitude (précision) et le coût de calcul (temps en CPU) associés avec de telles simulations. Une attention spéciale est prise pour résoudre correctement toutes les échelles de longueurs associées avec les différents processus de transport. En raison de la très petite diffusivité massique du liquide (pour *Pb-10%Sn*, le coefficient de diffusion $D_l^{Sn} = 3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$), les longueurs caractéristiques de couches limites de soluté sont extrêmement minces comparées à celles de couches limites hydrodynamique et thermique (voir chapitre 2).

Tests pour le choix de la taille de maillage (nombre de mailles)

Dans le but de déterminer la taille *appropriée* de maillage (nombre de mailles), des tests de calcul de simulation ont été entrepris (pour l'alliage *Pb-10%Sn*) en utilisant différentes tailles de maillage (nombres de grilles). Un pas de temps relativement petit, fixé à $\Delta\tau = 0,005$ (soit $\Delta t \approx 0,004 \text{ s}$), est utilisé dans ces tests et les calculs ont été réalisés en *couplage-complet* avec itérations (c.à.d. dans chaque pas de temps *des itérations* sont effectuées pour coupler les champs de vitesse, température (enthalpie) et concentration). Les critères pour terminer les itérations, dans le cas de cet alliage, sont donnés comme suit : $\left| \frac{U^{(n+1)} - U^{(n)}}{U^{(n)}} \right| \leq 10^{-5}$; $\left| \frac{V^{(n+1)} - V^{(n)}}{V^{(n)}} \right| \leq 10^{-5}$; $\left| \frac{T^{(n+1)} - T^{(n)}}{T^{(n)}} \right| \leq 10^{-5}$ et $\left| \frac{C^{(n+1)} - C^{(n)}}{C^{(n)}} \right| \leq 10^{-5}$ (avec n est le nombre d'itérations), pour la résolution des équations de conservation de quantité de mouvement (dans les directions X et Y), énergie et soluté (avec n désigne le nombre d'itération).

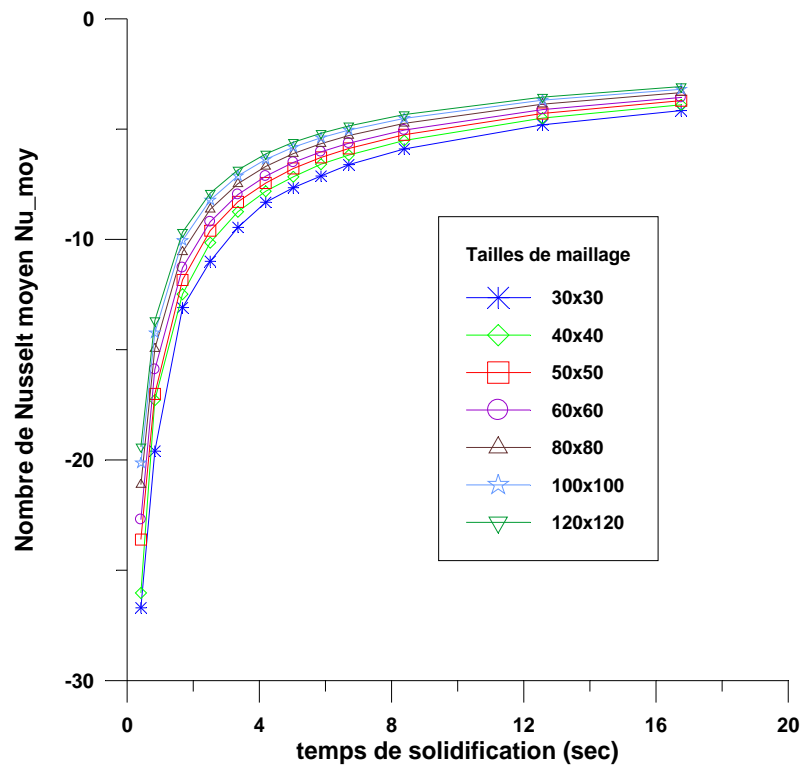


Figure 4.3 : Test numérique pour le choix de la taille appropriée de maillage. Variation Nombre de Nusselt moyen (le pas de temps utilisé dans ce test est de 0,004 s) dans l'intervalle (0-20s) où le régime est fortement transitoire.

Dans ces tests, les champs pour l'écoulement, température (et enthalpie) et concentration sont résolus sur un système de maillage qui utilise (30x30 ; 40x40 ; 50x50 ; 60x60 ; 80x80 ; 100x100 et 120x120) nœuds, dans les directions x et y , respectivement (cas de cavité carrée). Un espacement *non-uniforme* de maillage est utilisé sur tout le domaine de calcul pour le système de maillage. La sensibilité des solutions numériques à l'espacement de maillage est conduite par la comparaison des solutions à partir du système de maillage mentionné avec autant d'arrangement de maillage plus fin. La figure 4.3 montre la distribution du nombre de *Nusselt* moyen (calculé sur la paroi froide de lingot), en fonction de temps de solidification dans l'intervalle entre [0 et 20 sec], pour laquelle le régime est fortement *transitoire* (non établi), avec les tailles de maillage mentionnées auparavant. Notons que le nombre de *Nusselt* local représente le *transfert de chaleur*, et il dépend sur le gradient de température sur une surface plane, $\partial T / \partial \mathbf{n}$, où \mathbf{n} est la normale à la surface. Par conséquent, nous pouvons

calculer le *taux de flux de chaleur* (Nu_{moy}) sur chaque surface de la cavité. Le nombre de *Nusselt* moyen correspondant, pour la paroi froide est défini tel que : $Nu_{moy} = \frac{1}{H} \int Nu \, dy$.

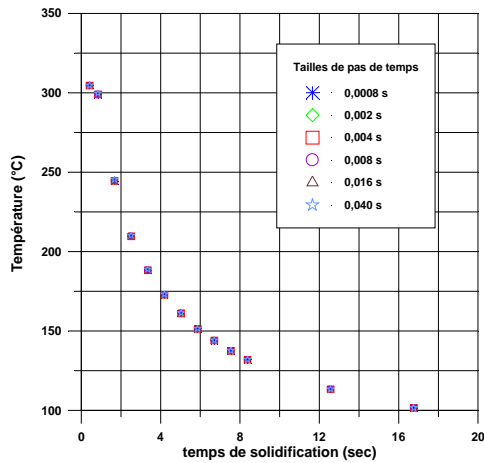
Bien que, tous les profils de nombre de *Nusselt* moyen (par conséquent, ceux de température (Fig. 4.3) suivent la même tendance. Cependant, depuis que la température est moyennée à partir de températures aux grilles avoisinantes autour d'une location de maillage, Nu_{moy} (par conséquent la température) varie avec le nombre de grilles. Si nous considérons une variation relative (moyenne) de $< 10\%$ comme un seuil, le nombre de grilles doit être supérieur ou égale à (50 x 50).

Presque un agrément parfait entre les solutions à partir des systèmes de maillage sélectionnés au-delà de (50 x 50) est achevée pour différents gradients *thermiques* appliqués (c.-à-d. valeurs de Gr_T). Il est noté, ici, qu'en fait dans le présent test les conditions initiales et aux limites utilisées sont celles données sur le tableau 4.1, cependant, d'autres tests ont été entrepris auparavant et ne sont pas présentés ici.

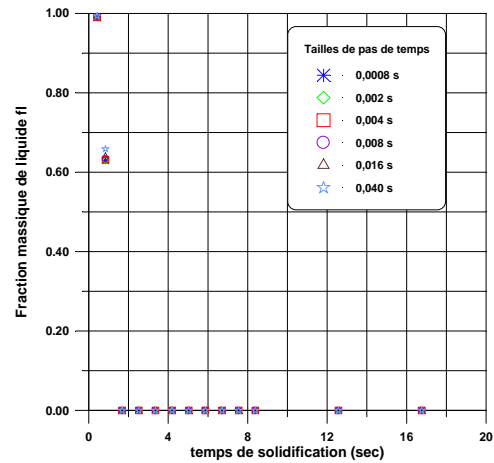
Tests numériques pour le choix du pas de temps

De la même façon, pour déterminer la taille *adéquate* pour le pas de temps, des tests de calcul de simulation ont été réalisés, pour le même système binaire, en utilisant différentes tailles pour le pas de temps. En particulier, les pas de temps de (0,001 ; 0,0025 ; 0,005 ; 0,010 ; 0,02 et 0,05) (ce qui correspond à 0,0008 s ; 0,002 s ; 0,004 s ; 0,008 s ; 0,016 s et 0,040 s) ont été utilisés dans ces tests de stabilité et précision des solutions numériques. Les mêmes critères, pour terminer les itérations, sont appliqués. En premier lieu, la taille de maillage est de 50x50 (soit la taille admissible ayant la plus faible résolution) a été utilisée dans ces tests. La figure 4.4 montre les distributions de la température, fraction massique de liquide ; fonctions de courant « ψ » et ségrégation calculées au point de lingot donné par ($x = 5$ mm et $y = 10$ mm) pour les temps entre [0 et 20 s] en utilisant les différents pas de temps mentionnés auparavant. Par exemple, à la différence des variations de température (en différentes taille de grille), dans ce cas les températures sont exigées à être les mêmes si le pas de temps est suffisamment petit. Sur la figure 4.4, les résultats de calcul pour les pas de temps de $\Delta t = 0,016$ s et 0,04 s montrent une divergence par rapport aux autres, indiquant que ces temps de calcul sont très larges pour résoudre le problème *transitoire*. Par conséquent, le pas de temps qui peut être utilisé dans le calcul doit être inférieur à ($< 0,016$ s).

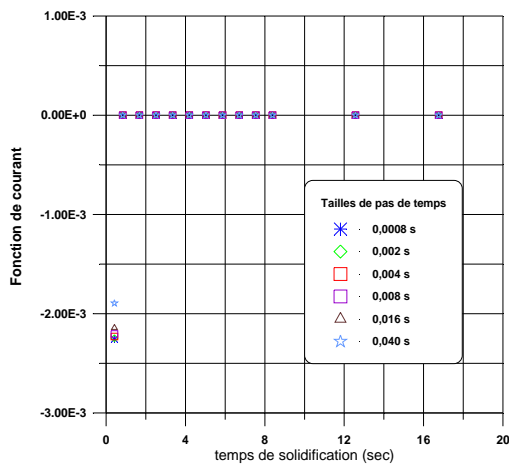
Également, un test numérique a été réalisé en utilisant un maillage de bonne résolution soit 100x100, nous conduisons la même démarche que celle pour le premier test. La figure 4.5 montre les résultats de ce test calculés au point de lingot donné par ($x = 15 \text{ mm}$ et $y = 94 \text{ mm}$), (situé au coin supérieur de lingot près de la paroi froide, où les *gradients compositionnelles* sont importants), pour les temps entre [0 et 20 s]. Les résultats de deux tests montrent que le *pas de temps*, indépendant de la solution, est obtenu pour ($\Delta t < 0,016 \text{ s}$).



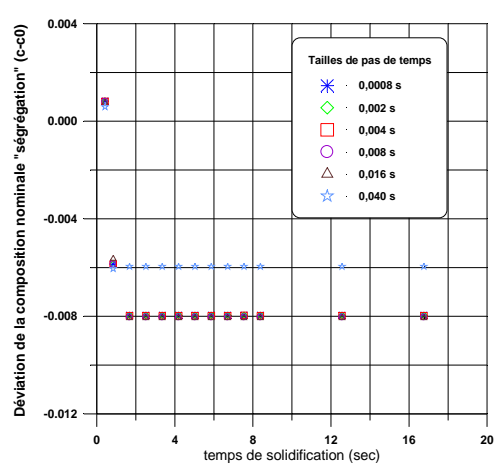
Température



Fraction massique de liquide



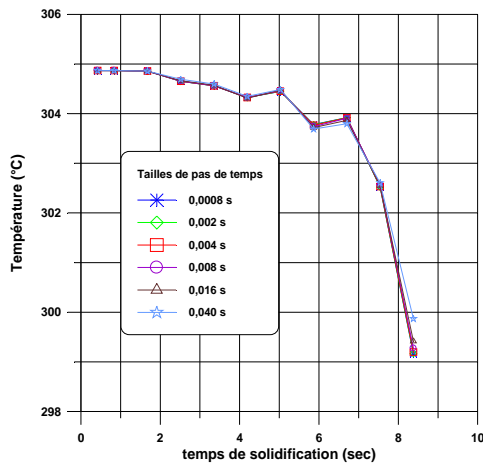
Fonctions de courant « ψ »



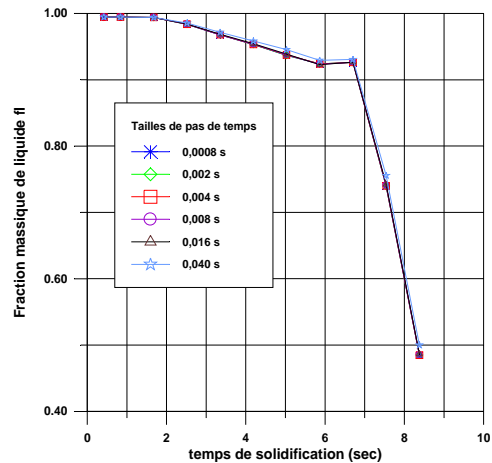
Ségrégation ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$)

Figure 4.4 : Distributions de température, fraction massique de liquide, composantes de vitesse et déviation de la composition nominale « ségrégation » au point ($x= 5\text{mm}$; $y= 10 \text{ mm}$) (Maillage 50x50).

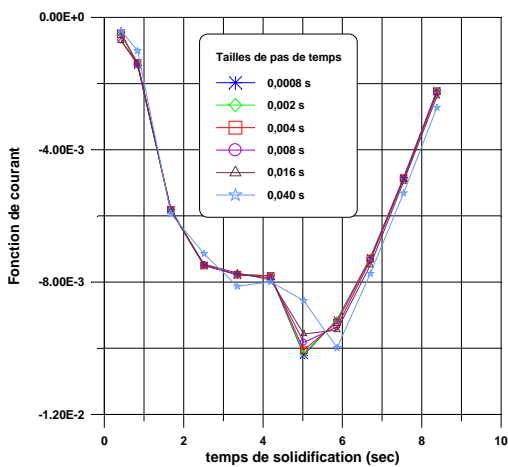
D'autre part, il faut souligner, en outre, la grande influence de la taille de maillage sur les calculs de champs de l'écoulement, température et concentration, par exemple, une différence relative (moyenne) d'environ 10% dans le calcul du nombre de *Nusselt* si nous augmentons la taille de maillage de 2 (figure 4.6). Cette influence de maillage sur les résultats sera discutée davantage dans les calculs concernant le cas test Hebditch et Hunt (1974), dans les sections 4.5.1 et 4.5.2.



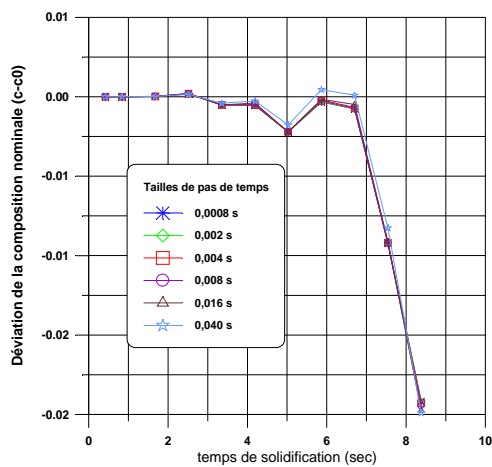
Température



Fraction massique de liquide f_l

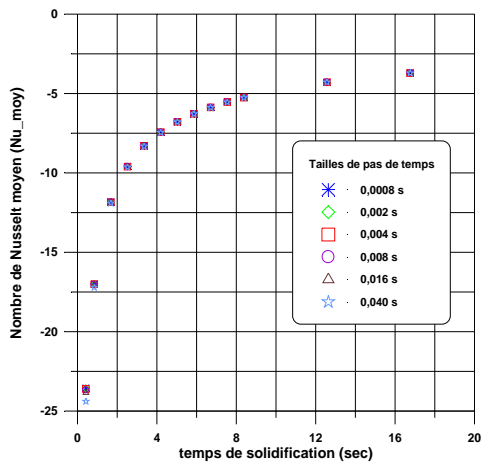


Fonction de courant « ψ »

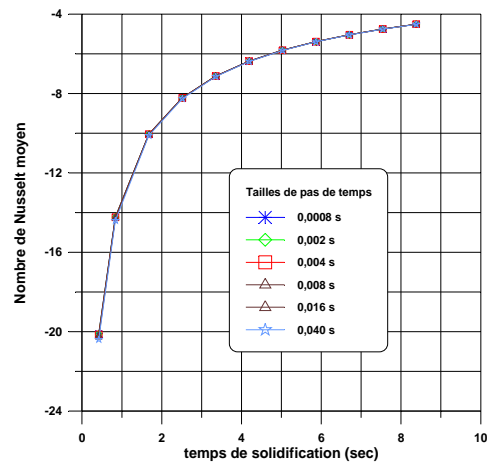


Ségrégation ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$)

Figure 4.5 : Distributions de fraction massique de liquide, fonction de courant, composantes de vitesse, température et déviation de la composition nominale au point ($x=15\text{ mm}$ et $y=94\text{ mm}$) situé au coin supérieur près de la paroi froide du lingot où les gradients sont importants en début de solidification (Maillage 100x100).



Maillage 50x50



Maillage 100x100

Figure 4.6 : Influence de la taille de maille : Variation du nombre de Nusselt moyen, calculé sur la paroi gauche de la cavité, en fonction du temps en utilisant différents pas de temps. (a) maillage grossier de (50x50) et (b) maillage fin de (100x100) (alors que le nombre d'itération est de 20 et l'erreur est de 10^{-5}).

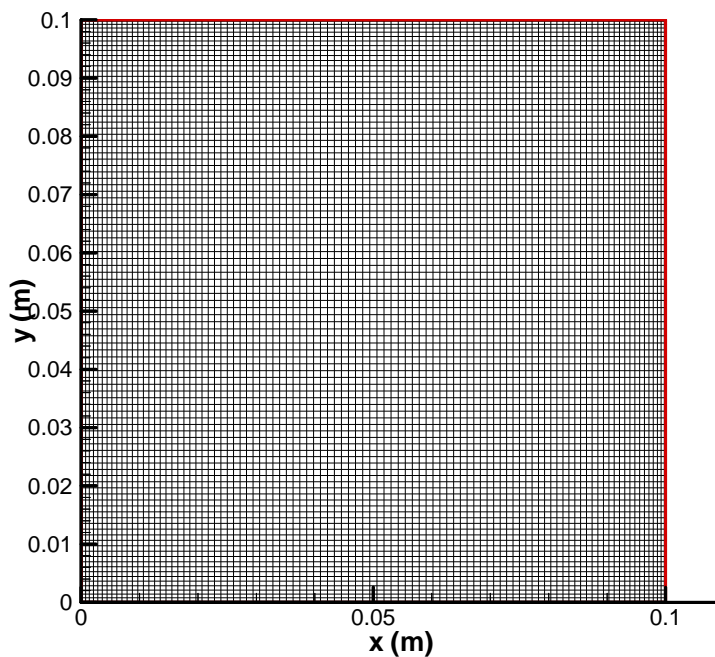


Figure 4.7 : Maillage numérique de taille (100x100) utilisé pour le calcul de solidification du système Pb- 10% Sn.

Tableau 4.3 : Propriétés thermophysiques de l'alliage *Sn- 5 pds% Pb* (dans ce cas le constituant $\alpha = \text{Sn}$) [Weitao (2005) et Kämpfer (2002)]

Propriétés	Liquide	Solide
Chaleur spécifique ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)	260	260
Conductivité thermique ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)	55	55
Masse volumique (kg m^{-3})	7000	7000
Coefficient de diffusion de masse ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	3×10^{-9}	-
Viscosité dynamique ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	1×10^{-3}	-
Chaleur latente de fusion, h_f (J kg^{-1})	61000	
Espacement de bras dendritique secondaire (m)	65×10^{-6}	
Coefficient de dilatation thermique, β_T (K^{-1})	6×10^{-5}	
Coefficient de dilatation solutale, β_s ($\text{pds}\%^{-1}$)	$-5,3 \times 10^{-3}$	
Température eutectique, T_e ($^{\circ}\text{C}$)	183	
Température externe, T_{ext} ($^{\circ}\text{C}$)	25	
Coefficient d'échange de chaleur par convection, h ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)	300	
Composition eutectique, $f_{l,e}^{\alpha}$ (pds%)	38,1	
Point de fusion de Sn pur, T_f ($^{\circ}\text{C}$)	232	
Rapport de partage d'équilibre, κ_p	0,0656	
Conductivité électrique (estimée) (S/m)	10^6	
Rapport de forme, A ($H = 0,06 \text{ m}$ et $L = 0,1 \text{ m}$)	1,66	

Tableau 4.4 : Nombres adimensionnels et autres paramètres (calculés) de l'alliage binaire *Sn- 5 pds% Pb*

Quantité adimensionnelle	Symbole	Valeur
Nombre de Darcy	Da	$3,61 \times 10^{-5}$
Nombre de Prandtl	Pr	0,0047
Nombre de Grashof	Gr	$1,24 \times 10^9$
Nombre de Schmidt	Sc	47,62
Nombre de Hartmann	Ha	les valeurs suivantes sont supposées pour Ha (200 et 300)
Nombre de Stefan	Ste_l	0,18
Rapport de chaleurs spécifiques	CS	1,00
Rapport de conductivités thermiques	Rk	1,00
Rapport de flottabilité	N_{boy}	-6,87

Tableau 4.5 : Propriétés thermophysiques de l'alliage *Pb- 48 pds% Sn* (dans ce cas le constituant $\alpha = \text{Sn}$) [Weitao (2005) et Kämpfer (2002)]

Propriétés	Liquide	Solide
Chaleur spécifique ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)	200	200
Conductivité thermique ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)	50	50
Masse volumique (kg m^{-3})	9000	9000
Coefficient de diffusion de masse ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	3×10^{-9}	-
Viscosité dynamique ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	1×10^{-3}	-
Chaleur latente de fusion, h_f (J kg^{-1})	53550	
Espacement de bras dendritique secondaire (m)	40×10^{-6}	
Coefficient de dilatation thermique, β_T (K^{-1})	1×10^{-4}	
Coefficient de dilatation solutale, β_s ($\text{pds}\%^{-1}$)	$4,5 \times 10^{-3}$	
Température eutectique, T_e ($^{\circ}\text{C}$)	183	
Température externe, T_{ext} ($^{\circ}\text{C}$)	25	
Coefficient d'échange de chaleur par convection, h ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)	400	
Composition eutectique, $f_{l,e}^{\alpha}$ (pds%)	61,9	
Point de fusion de Pb pur, T_f ($^{\circ}\text{C}$)	327,5	
Rapport de partage d'équilibre, κ_p	0,307	
Conductivité électrique (estimée) (S/m)	10^6	
Rapport de forme, A ($H = 0,06 \text{ m}$ et $L = 0,1 \text{ m}$)	1,66	

Tableau 4.6 : Nombres adimensionnels et autres paramètres (calculés) de l'alliage binaire *Pb- 48pds% Sn*

Quantité adimensionnelle	Symbole	Valeur
Nombre de Darcy	Da	$2,22 \times 10^{-5}$
Nombre de Prandtl	Pr	0,004
Nombre de Grashof	Gr	$2,62 \times 10^9$
Nombre de Schmidt	Sc	37,03
Nombre de Hartmann	Ha	les valeurs suivantes sont supposées pour Ha (200 et 300)
Nombre de Stefan	Ste_l	0,123
Rapport de chaleurs spécifiques	CS	1,00
Rapport de conductivités thermiques	Rk	1,00
Rapport de flottabilité	N_{boy}	17,87

4.4 Critères du choix des alliages **plomb-étain & étain-plomb** dans le cadre de cette étude

Généralités et caractéristiques des alliages **plomb-étain & étain-plomb**

Nous avons vu en chapitre 2 que la macroségrégation, (c.à.d. les variations de compositions moyennes à l'échelle macroscopique d'un moulage), joue un rôle important dans plusieurs processus de solidification. Elle peut être induite, essentiellement, par *l'écoulement de fluide* dans la zone pâteuse, qui redistribue les éléments de soluté ségrégués à l'intérieur du volume liquide (masse liquide) restant ; par *déformation du squelette solide* à l'état semi-solide [Ahmad et al. 1998] ; ou par *transport des grains équiaxes* (voir chapitre 1 et 2). Le mouvement de *l'écoulement de fluide* peut être provoqué par la flottabilité thermique et/ou solutal, rétrécissement, etc. (comme il est illustré en chapitre 2). Ce dernier phénomène usuellement conduit à la « *ségrégation inverse* », si le coefficient de partage est ($\kappa_p < 1$) (c.à.d. à un solide, qui est riche en soluté, à la surface du moulage). D'autre part, la convection *naturelle* (thermique et/ou solutale) donne une augmentation à des contours (distributions) de ségrégation très complexes. Les modèles des écoulements de convection thermique et solutale relatifs aux alliages binaires **plomb-étain** et **étain-plomb** (notamment *Sn – 5pds% Pb* et *Pb- 48pds% Sn*) sont assez illustrés par des investigations réputées existantes. Des résultats numériques validés expérimentalement sont disponibles dans la littérature. Dans ce contexte, il faut noter les travaux pertinents, qui considèrent des alliages **plomb-étain** et **étain-plomb**, entrepris soit par voie numérique [Ahmad et al (1998) ; Kämpfer (2002) et Weitao (2005) ; Gouttebroze et al 2007]) ou soit par voie expérimentale [Hebditch et Hunt, (1974)].

Dans les travaux par voie numérique des codes de calcul très performants fondus sur les méthodes des volumes finis ou éléments finis ont été utilisés dans les calculs de simulation des modèles de convection *thermosolutale* et la *ségrégation* associée. Ces modèles de convection sont schématiquement résumés en Fig. 4.8 pour une cavité rectangulaire et le cas des deux alliages : *Sn-5 pds % Pb* et *Pb-48 pds % Sn*. Pour plus de détails, concernant ces travaux, voir les références [Ahmad et al. (1998) ; Kämpfer (2002) ; Weitao (2005) et Gouttebroze et al 2007] illustrés en chapitre 2.

En outre, il est noté que les alliages *plomb-étain* & *étain-plomb* présentent deux avantages principaux par rapport aux observations de macroségrégation :

- Leurs températures de fusion sont assez faibles, environ 200 °C et 300 °C pour l'étain et plomb respectivement (voir Fig.4.2) ;
- Il y a une différence importante dans les masses volumiques des deux composants purs ($\rho_{\text{Sn}} = 7,35 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$, $\rho_{\text{Pb}} = 11,3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$), qui conduit à une très forte force de direction de convection solutale et peut résulter en une très sévère macroségrégation.

De plus, notons que l'alliage choisi, pour le premier cas de la présente étude, étant le **Pb-10 pds% Sn** (tableau 4.1) possède un modèle de convection comme présenté en Fig.4.1 et il est caractérisé par des écoulements de convection solutale extrêmement forts.

Par conséquent, le choix des alliages *plomb-étain* & *étain-plomb* dans le cadre de l'étude présentée est motivé par toutes ces raisons.

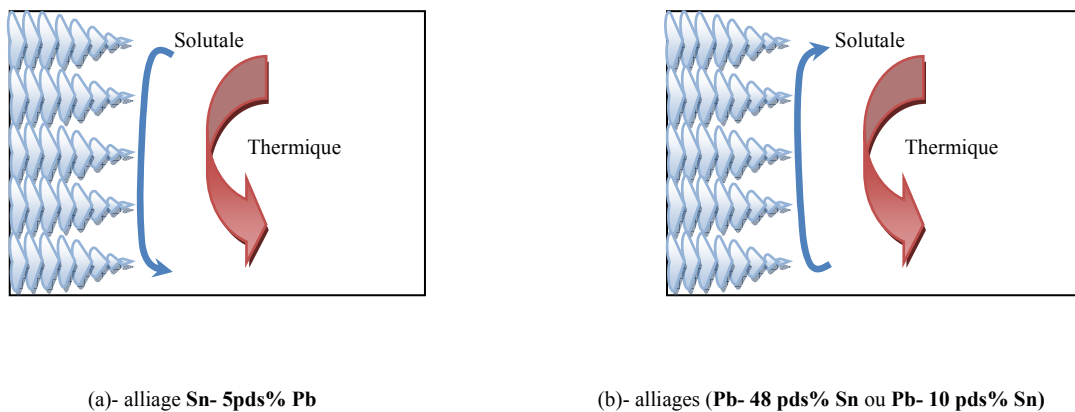


Figure 4.8. Modèles des écoulements de convections thermique et solutale [Ahmad et al 1998; et Weitao 2005]. Dans les alliages (Pb-48%Sn et Pb-10%Sn) les écoulements de convections thermique et solutale s'opposent et se compensent dans la région pâteuse. Alors que ces écoulements s'adhèrent et s'amplifient dans l'alliage (Sn -5%Pb).

4.5 Résultats et interprétations pour le système *Pb-10pds% Sn*

Au cours de la solidification dans un gradient de température positif, le liquide dans la zone pâteuse s'enrichit en soluté, ce qui donne lieu à des *instabilités*. Lorsque la vitesse de propagation du *front* (de liquidus) est plus faible que la *convection solutale* dans la même direction, des « *canaux ségrégés* » se forment. La *diffusion solutale* étant beaucoup plus faible que la *diffusion thermique*, le liquide *ségrégé* « *fluide interdendritique* » garde une composition élevée en s'écoulant à travers la zone pâteuse vers des régions à température plus élevée. Le liquide enrichi peut alors retarder la *croissance dendritique* ou provoquer une *refusion locale* « *remelting* », créant ainsi des *veines* « *poches* » liquides au travers de la zone pâteuse.

Ces phénomènes très *complexes* fortement couplés ont pu être mis en évidence par le *modèle présenté* en utilisant l'*approche continue* (illustrée en chapitre 3). Par la suite les résultats, obtenus pour le système *Pb-10%Sn*, sont présentés aux sections ci-après.

4.5.1 **Situation I** : Conditions de convection en absence de stabilisation par champ magnétique

La situation I (premier cas) de solidification binaire considérée, ici, est celui de solidification dominée par la diffusion-convection. Dans ce cas le modèle complet du **tableau 3.2** doit être résolu.

Les figures « 4.9 - 4.20 » illustrent le comportement de solidification en fonction du temps en particulier il est présenté les distributions de fonction de courant et champ de vecteurs vitesses (superposés), isothermes, fractions massiques de liquide (notons que $g_l = f_l = 1 - g_s = 1 - f_s$), lignes isocompositions de liquide (soluté) et champ de soluté (en particulier, nous présentons *la déviation de la concentration nominale* « *macroségrégation* » ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$)) (dite aussi « *la quantité de ségrégation* ») pour la situation **I** aux différents étapes de solidification. Dans ces figures, toutes les variables dépendantes sont mises en forme

dimensionnelle, c.-à-d. les composantes de la vitesse en (m/s), la température en (°C) et la concentration des éléments de soluté en (pds%).

Notons que les lignes (*fronts*) *solidus* et *liquidus* correspondent à $f_l = 0$ et 1 ($g_l = 0$ et 1), respectivement. Les *isothermes* représentent les lignes de température constante. Les lignes d'isocompositions de liquide représentent les lignes de concentration du liquide (f_l^α) constante, avec l'espèce α correspond, ici, à l'étain (*Sn*). Les vecteurs de vitesses montrés sur chaque figure, exprimés en (m/s), sont basés sur les composantes (u et v) de la vitesse continue, qui, pour $\mathbf{v}_s = \mathbf{0}$, se réduisent à $f_l u_l$ et $f_l v_l$, respectivement. Par conséquent, les vitesses qui apparaissent dans la région de la phase liquide pur (masse liquide) sont des vitesses *réelles*, alors que, celles qui apparaissent dans la région pâteuse sont *superficielles* (*de décharge*).

Notons, en outre, que les fonctions de courant sont définies comme les iso-valeurs de la fonction hydrodynamique de courant ψ , où ψ est définie telle que $u = \partial\psi/\partial y$ et $v = -\partial\psi/\partial x$.

En raison de l'existence ou non de mouvement de fluide de contre-rotation (cellules en contre-rotation « *vortex* ») (Fig.4.8), les fonctions de courant dans les régions de la masse liquide et pâteuse sont de signes opposés, dépendant sur la nature de l'alliage. Pour le système *Pb-10%Sn* elles sont de signe opposé (Fig.4.8). Les valeurs maximales et minimales de fonction de courant sont ainsi désignées par ψ_{\max} et ψ_{\min} dans les régions de masse liquide et/ou pâteuse, respectivement, et peuvent être utilisées pour conclure les intensités relatives d'écoulements de *recirculation* dans ces régions. Les valeurs positives (c.à.d. ψ_{\max}) indiquent que le sens de l'écoulement de convection (thermique) est en sens inverse des aiguilles d'une montre (*counterclockwise*), alors que les valeurs négatives de ψ (c.à.d. ψ_{\min}) indiquent que le sens de l'écoulement de convection (solutale) est dans le sens des aiguilles d'une montre (*clockwise*). En outre, puisque la fonction de courant ψ est définie avec une constante d'intégration près non-spécifiée, les fonctions de courant dans la région de masse liquide et/ou pâteuse sont tracées en *incrément* libre suggéré par défaut par le logiciel de présentation graphique (*Tech plot*).

Par la suite, nous présentons en premier lieu les résultats de calcul ensuite nous abordons les discussions de ces résultats.

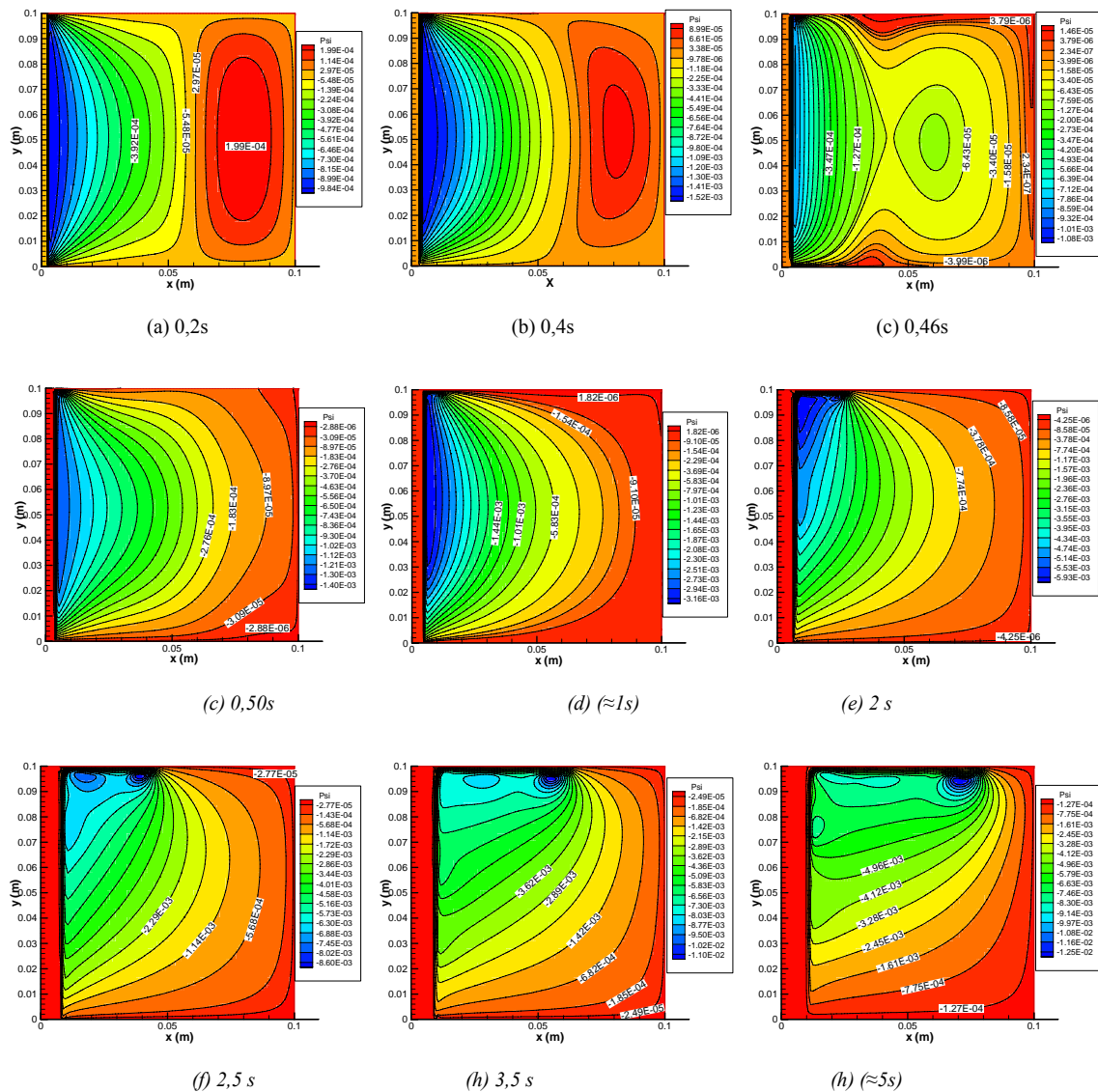


Figure 4.9 : Comportement de solidification durant les différentes premières étapes de solidification. Les cellules de recirculation « ou tourbillons » observées en fonction du temps. Durant les premiers temps ($t < 1s$) la cellule de convection thermique est observée, cependant, avec l'avancement de solidification elle sera dominée par la cellule de convection solutale.

4.5.2 Présentation des résultats

4.5.2.1 Premières étapes de solidification :

Comme le *refroidissement* est initié (à $t = 0+$) à la paroi de gauche, de cellules de *convection thermique* dans la direction contre les aiguilles d'une montre se sont établies dans le liquide, due aux gradients de température dans la direction horizontale. Comme le refroidissement continu (à $t > 0+$), les dendrites solides commencent à se précipiter à la paroi froide de gauche, par conséquent, formant une zone bi-phasique (pâteuse) et cette zone croisse avec les interfaces « fronts » de liquidus et solidus qui se déplacent horizontalement. Comme nous allons illustrer par la suite, cette précipitation est accompagnée par un enrichissement de liquide interdendritique, en éléments de soluté, par conséquent, de cellules de *convection solutale* dans la direction opposée s'établissent dans la région pâteuse. En fait, dans l'alliage (*Pb-10%Sn*) les écoulements de *convection thermique* et *solutale* s'opposent et se compensent dans la région pâteuse (en se référant à la discussion de la section 4.4 et au Fig.4.8). En outre, depuis que le rapport de flottabilité est assez large pour ce système binaire ($N_{\text{boy}} \approx 18$), les cellules de convection solutale vont dominer, par la suite, les régions : pâteuse et aussi de masse liquide. Les cellules de convection solutale dominent les zones pâteuse et liquide de telle sorte qu'elles vont complètement compenser (voire supprimer) la convection thermique opposée dans la zone pâteuse et dans la majeure partie de la région de masse liquide. La figure 4.9 illustre ces conditions de convection en fonction de quelques temps de solidification. Sur ces figures, représentant les fonctions de courant « ψ » pour différents temps de solidification, nous pouvons observer que de *cellules solutales* dominantes dans la direction des aiguilles d'une montre se sont établies, dès le début de solidification, dans la zone pâteuse et masse liquide, due au gradient de composition qui se produit dans la région du haut de la zone pâteuse (Fig.4.9). Ceci est une caractéristique spécifique aux alliages plomb-étain qui présentent de larges gradients compositionnelles (en se référant à la discussion de la section 4.4 et Fig.4.8).

D'autre part, nous avons présenté sur les figures 4.10 et 4.11, le comportement de solidification aux temps ($t \approx 1$ et 5 secondes), qui correspondent aux premières étapes de solidification. En particulier, les distributions de fractions massiques de liquide ; isothermes ; lignes d'isocompositions de liquide ; fonctions de courant et vecteurs vitesses (superposés

avec « ψ ») ; « ségrégation » et champ de soluté, sont présentées sur les Figs. 4.10 (a-f) et 4.11 (a-f) respectivement.

1- Fraction massique de liquide (*fronts liquidus et solidus*)

À partir des figures 4.10a et 4.11a, généralement, il est remarqué que la solidification est initialement caractérisée par une propagation rapide des *fronts* solidus et liquidus.

Dans la région du haut de la zone pâteuse, très proche de la paroi supérieure de la cavité, le solide n'est pas uniformément distribué et des *poches liquides* commencent à se former dans la région pâteuse (voir les zooms de cette région, aux temps 1 et 5 s, sur les Figs. 4.12 et 4.13, respectivement) en raison de la *croissance préférentielle* de quelques *dendrites* dues à des *agglomérations* de dendrites *équiaxées* de l'interface qui avance. Ces *poches de liquide* peuvent devenir une *semi-macroségrégation* ou une *tache de ségrégation* (une *ségrégation positive*), (discuté en chapitre 2). En outre, cette *distribution inhomogène* de phase solide est à l'origine de l'*écoulement de canal préférentiel* qui commence à se former dans cette région, (Figs. 4.12 et 4.13), car la résistance d'écoulement *du canal connectant* de telles poches de liquide est petite.

D'autre part, dans la région en bas de la zone pâteuse (adjacente à la paroi inférieure de la cavité), un *maigrement* mais *peu significatif* de la zone pâteuse est observé (voir les zooms de cette région sur les Figs. 4.12 et 4.13).

Excepter ces deux régions, durant les premières étapes de solidification, les deux *fronts solidus* et *liquidus* se propagent sans gradients horizontaux significatifs, de température et composition et, par conséquent, elles restent presque planaires (lisses) et sans irrégularités significatives (Figs. 4.10a et 4.11a). Il est noté que sur ces figures nous adoptons les valeurs maximales et minimales, pour la fraction massique de liquide, suggérées par le logiciel (*Tech plot*) et ainsi nous avons présenté les iso-lignes $f_l = 0,01$ et $0,94$.

2- Gradients thermique et solutal (G_T et G_C)

Les figures 4.10 (b et c) et 4.11 (b et c) montrent, respectivement, les *gradients* horizontaux de *température* et lignes isocompositions de liquide « *gradients compositionnels* » qui se développent près de la paroi froide, aux temps de solidification de (1 et 5 s).

Les isothermes des Figs. 4.10b et 4.11b indiquent que les *gradients de température* sont concentrés dans le solide (avec une petite *étendue* dans la région pâteuse) et que le transport d'énergie (*transfert de chaleur*) est approximativement unidirectionnel et la *conduction* est dominante (Figs. 4.14a et 4.15a). En effet, les Figs. 4.10b et 4.11b montrent clairement que les lignes isothermes sont presque verticales, indiquant la *conduction* horizontale unidimensionnelle dans le solide formé. Les petites déviations de la linéarité dans la partie *externe* de la région pâteuse (*en haut de la cavité*), et *un peu moins* dans le *cœur* du liquide (en particulier sur les Figs. 4.11b et 4.15a), résultent à partir des *écoulements convectifs* des fluides (interdendritique et de la région de masse liquide), respectivement. Le fait que ces gradients sont confinés aux régions solide et pâteuse, la masse liquide reste, ainsi, presque *isothermique*. Les nombres de *Nusselt* moyens, calculés sur la paroi froide aux temps ($t \approx 1$ et 5 s), sont de (-13) et (-5.81) respectivement, ce qui montre clairement le *transfert de chaleur*. Ce *transfert de chaleur* peut être également illustré par la figure 4.16, où nous avons présenté la distribution du nombre de *Nusselt* moyen (calculé sur la paroi de gauche) en fonction du temps de solidification.

D'autre part, les lignes isocompositions de liquide (Figs. 4.10c et 4.11c) montrent que les gradients de composition (*concentration*) sont principalement confinés à la *zone pâteuse* avec les plus larges (ayant des concentrations *croissantes* vers la valeur de la *composition eutectique* de l'étain (soit $f_E^{Sn} = 61,9\%$), apparaissent près du *front* de solidus. En outre, dans les régions *en haut* de la *zone pâteuse* et *près de la surface supérieure* (à l'*extérieure de la zone pâteuse*) de la cavité une large *étendue* de ces *gradients* est également observée. Ces derniers gradients conduits à des « *instabilités* », dans ces régions comme nous allons-les discutées ci-dessous.

Il faut souligner, en outre, bien que la diffusion des éléments de l'espèce (soluté) peut influencer la solidification proche du *front* solidus, où les gradients de composition sont larges, cependant, elle est d'intensité insuffisante ($D_l^{Sn} = 3 \times 10^{-9}$ m²/s) pour influencer le *transport solutal*. Par conséquent, excepter les régions *en haut* de la *zone pâteuse* et *près de la surface supérieure* de la cavité, pour ces premières étapes de solidification, le fluide de la masse liquide reste libre de tous gradients de composition significatifs et il est de composition très proche de la composition initiale (nominale) $f_0^{Sn} = 10\%$ (soit $\approx 0,20$ en valeur adimensionnelle) (Figs. 4.10c, 4.11c).

3- Champ d'écoulements (écoulements de fluides interdendritique et de masse liquide et écoulement canal)

Écoulements froids de fluide interdendritique dans la zone pâteuse :

Conditions dans la zone pâteuse : Comme le refroidissement continu et dans le but de satisfaire la nécessité de l'équilibre de phase, la précipitation de solide est accompagnée par l'enrichissement de solvant de liquide interdendritique (dans la zone pâteuse) et comme le *coefficient de partage* du soluté pour le système Pb-10%Sn est de 0,307 (< 1), le liquide interdendritique devient riche en éléments de soluté (atomes de Sn) lorsque la solidification se procède.

Dans ces conditions les *gradients* horizontaux de *température* et de *composition* (G_T et G_c) sont en interaction avec l'écoulement *flottable* du *fluide interdendritique*, libéré dans la zone pâteuse, principalement *vertical*. En outre, comme le liquide interdendritique dans la région pâteuse est *enrichi* par *Sn* (c.à.d. l'espèce la plus *légère*), pendant que le solide se précipite, une *inversion* de masse volumique est créée (celle-ci est due au fait que la masse volumique de l'étain (Sn) est significativement moins que celle du plomb (Pb)). Une telle inversion correspond au *dégagement* du fluide le *moins dense* qui tend à induire un mouvement *ascendant* du liquide (écoulement conduit par *flottabilité solutale*) (Figs.4.10(d) et 4.11(d)). Sur les zooms situés en dessus, (Figs.4.12 et 4.13), nous pouvons observer que les *écoulements-ascendants* induits, solutalement, *persistent* à l'intérieure de la zone pâteuse et peuvent *pénétrer* le front *perméable* du liquidus dans la partie supérieure de la cavité.

En réalité, à travers la zone pâteuse, supposée comme étant un solide poreux stationnaire ($V_s = 0$, en se référant à la remarque 4.3), les écoulements dirigés solutalement de *fluide interdendritique* léger, riche en étain, établissent un modèle de *recirculation* dans la direction des aiguilles d'une montre. Ce modèle est composé des écoulements *ascendants assez faibles* qui se produisent près du *front solidus* (en particulier la région entre environs $0 < f_l < 0,3$) et des écoulements *ascendants très forts* qui se produisent dans la région dite « *critique* » de la zone pâteuse délimitée (entre environs $0,3 < f_l < 0,9$) (voir Fig. 4.10(d), 4.11(d) et en zooms sur les Figs. 4.12 et 4.13 (en dessus)) pour ces premières étapes de solidification). En revanche, juste à l'intérieure de la zone pâteuse, près du *front liquidus*, des *écoulements descendants*,

faibles, peuvent être observés avec l'avancement de solidification (voir la Fig.4.13 (en dessus)) pour le temps de 5 s par exemple) et ainsi la zone pâteuse est le lieu d'un écoulement de *recirculation* dans la direction des aiguilles d'une montre. En outre, généralement, les écoulements-*ascendants* établis proche du solidus ($0 < f_l < 0,3$) (qui ont la concentration d'étain la plus large (Figs. 4.10(c) et 4.11(c)) et dans la *région critique* ($0,5 < f_l < 0,9$) sont capables de monter davantage, pour *pénétrer* le front *perméable* de liquidus.

Remarque 4.6 : Il est noté que dû aux faibles intensités des écoulements *ascendants*, établis près de solidus ($0 < f_l < 0,3$), ces écoulements ne peuvent pas être bien observés sur les (Figs.4.10d, 4.11d, 4.12 et 4.13), car ils sont assez faibles, en comparaison avec ceux qui se développent dans la *région critique* de la zone pâteuse. Ceci est dû au fait que, depuis que le gradient en fraction volume de solide « g_s » (par conséquent le gradient en fraction massique de liquide « f_s ») est très large dans la région de la zone pâteuse près de solidus ($0 < f_l < 0,3$), l'amortissement « *damping* » du terme de *Darcy* dans les équations ((3.57) et (3-58)) est très fort et de là, les écoulements *ascendants* (dirigés solutalement) sont très *faibles* dans cette région de zone pâteuse. Il faut rappeler, en outre, que sur ces figures les vecteurs de vitesse sont basés sur les composantes de vitesse (u et v). Les vecteurs de vitesse apparaissant dans la région de masse liquide ($f_l = 1$, c.à.d. $f_s = 0$) sont, par conséquent, des *vitesses réelles*, alors que ceux dans la région pâteuse ($0 < f_l < 1$) sont des *vitesses superficielles*.

Écoulements dans la masse liquide :

Conditions dans la phase liquide : D'autre part, le *refroidissement* à travers l'interface de « *liquidus* » conduit à un fluide, plus froid et plus dense, *en bas* (écoulements généralement conduits, par *flottabilité thermique*). Mais il faut souligner, qu'en fait, pour le cas de l'alliage *Pb-10%Sn*, les écoulements de *recirculation* « dans le sens contre des aiguilles d'une montre », conduits *thermiquement*, sont relativement *faibles* et sont confinés dans les régions les plus chaudes de la région de la masse liquide, (par exemple : près des surfaces de droite (Fig.4.9a et b) ou près de surfaces supérieure et inférieure (Fig4.9c et d) de la paroi de cavité, où le fluide est encore plus chaud dans ces régions). En fait, les écoulements *assez faibles* de *recirculation* de fluide de la région de masse liquide, *généralement* conduits *thermiquement*, ont été compensés (voire supprimés), avec l'*avancement* de solidification (Figs.4.9a-d), et ainsi ils sont totalement absents dans cette région. Ceci est une caractéristique de l'alliage présent *Pb-10%Sn* (en se référant à la discussion de la section 4.4 et Fig.4.8).

Conditions due à la décharge des fluides interdendritiques vers le cœur liquide (rejection de soluté sur le front de liquidus) :

En outre, comme nous l'avons déjà illustré et est montré sur la Fig.4.12 (et en particulier sur la Fig.4.13), bien que, la plus part de fluide de la zone pâteuse (*fluide interdendritique*) est confiné aux écoulements de *recirculation* dans la région bi-phasique, cependant, les écoulements proches du solidus (et en particulier, de la région *critique* ($0,5 < f_l < 0,9$)) possèdent une *quantité de mouvement* suffisante pour **pénétrer** le front *perméable* du *liquidus* dans une *petite région*, située en haut de la zone pâteuse, pour être *décharger* vers le *cœur* liquide (*rejection de soluté sur le front de liquidus*), (Fig. 4.12 et 4.13). Comme il est montré sur les figure 4.10e et 4.11e, cette *pénétration (des fluides interdendritiques le front liquidus)* établie une *couche de fluide riche en étain* qui se répand (s'étale) horizontalement le long de la paroi supérieure. L'extension au quelle de telle *pénétration* peut se produire est gouvernée principalement par l'intensité des écoulements opposants dans la masse liquide, dirigés *thermiquement*, et comme ils sont, comme nous l'avons souligné, *extrêmement faible et presque absents* dans le cas du système *Pb-10pds% Sn*, l'étalement de cette couche est très important (figures 4.10e et 4.11e) avec de l'avancement de solidification. En effet, sur les zooms situés en dessus, (Figs.4.12 et 4.13), nous pouvons observer que les écoulements *ascendants* dirigés solutalement de fluide interdendritique riche en *étain* dans la région pâteuse pénètrent le front *perméable* de *liquidus* créant ainsi une *région locale* de la masse liquide enrichie en *étain* située en haut de la cavité (Figs. 4.10e et 4.11e). Par conséquent, les écoulements froids *sortants*, de fluide interdendritique, établissent une *condition solutalement stratifiée* (une accumulation des éléments de soluté), mais *thermiquement instable*, relativement aux écoulements (*faibles conduits thermiquement*) de fluide chaud de la masse liquide à la surface du haut de la cavité.

Dans ces situations, des *conditions instables* et doublement *diffusifs*, sont ainsi obtenues, qui accompagnent la *décharge* des fluides interdendritiques vers le *cœur liquide* et qui résultent essentiellement des phénomènes tels que : « la *refusion* ; des *variations locales de vitesse de croissance* et le *comportement fluctuant du transport global* de fluide », discuté en chapitre 2, peuvent se produire.

Par conséquent, les écoulements *descendants*, observés (à l'extérieur de zone pâteuse dans le *cœur* liquide) (Figs.4.12 et 4.13), sont, en effet, des écoulements de *recirculation* « dans le sens des aiguilles d'une montre » composés de *fluide interdendritique*, froid, sortant

de la zone pâteuse, dirigés *solutalement*, (qui sont les dominants). En particulier, ces **écoulements descendants** établissent un modèle (pattern) caractérisé par un *tourbillon* « vortex » (formé de *cellules de recirculation de convection solutale*) dont lequel les fonctions de courant « ψ » augmentent à partir du *centre* au *préféré*. Ce *vortex* possède en outre un centre, où « ψ » atteignent leurs maximums, qui se déplace avec l'évolution du processus de changement de phase (Figs.4.10 et 4.11).

Écoulements de canal :

D'autre part, l'écoulement de canal préférentiel observé sur les zooms en dessus (Figs. 4.12 et 4.13) établi près de la paroi supérieure, dans la région en haut à *l'extérieure* de la zone pâteuse est, en fait, dû comme nous l'avons déjà souligné, (en observant les contours des fractions de liquide « f_l » (Figs.4.10a et 4.11a)), à une *distribution inhomogène* de phase solide et la formation de poches de liquide dans cette région (Figs. 4.12a et 4.13a).

En effet, les *chocs (montées brusques ou oscillations)* observées sur la ligne d'iso-fraction liquide « $f_l = 0,94$ » en (Fig.4.12 et 4.13), signifie qu'un *canal ségrégé (incliné)* s'est produit dans l'endroit où le choc s'intervient. Ceci est peut être montré en examinant la *condition de refusion*.

Condition de refusion : « Lorsque un liquide s'écoule et si la vitesse de l'écoulement est supérieure à la vitesse de l'isotherme et si $\partial f_s / \partial t$ devient négative (ce qui implique $\partial f_l / \partial t$ devient positive) dans l'équation (2.9) (en se référant au chapitre 2). Ceci signifie que la « *refusion* » se produit et que le *canal* devient large. Ceci peut être aisément constaté en observant les (Figs. 4.12 et 4.13). D'autre part nous pouvons observer (sur la Fig. 4. 13) que la vitesse du fluide dans le *canal* a augmentée, par rapport à la vitesse de fluide (Fig. 4.12), ceci signifie que des bulles sont formées dans le *canal*, qui accélèrent la vitesse du fluide (en se référant à la discussion en chapitre 2), il en résulte un ***élargissement du canal*** ce qui est le mécanisme de la *ségrégation type canal*. Si le *canal préférentiel* est formé, le liquide riche en soluté flotte il en résulte une sévère *ségrégation positive* dans la partie supérieure du moulage, (ceci est clairement identifié en observant les figures (4.10e et 4.11e).

En outre, ce transfert *convectif* des fluides interdendritiques à travers *l'interface perméable* du liquidus est identifié, comme nous verrons par la suite, comme étant le mécanisme primaire d'une *redistribution macroscopique* des espèces, il s'agit de la « *ségrégation de type canal* ».

En outre, la « *ségrégation de type canal* » dite aussi « *canal ségrégué* » (Figs.4.10f et 4.11f) due à ces *phénomènes* et aussi la *ségrégation positive* ou « *taches de ségrégation* » due essentiellement à la « *refusion* » elle-même due à la formation des *poches liquide* (qui elles aussi dues une *distribution non uniforme de solide*). Comme les **Figs 4.10f et 4.11f** ces ***poches de liquide*** sont devenues « une *ségrégation positive* » ou une *tache de ségrégation*. La section 4.5.3 illustre davantage ces phénomènes.

Conditions dues à la pénétration des fluides du cœur liquide le front liquidus en bas de la zone pâteuse : Près de la partie inférieure de la cavité, en revanche, une situation *inverse* s'est produite. Sur les zooms situés en dessous en (Figs.4.12 et 4.13), nous pouvons observer que les *écoulements (de recirculation) descendants*, conduits essentiellement, par flottabilité *solutale*, près du front *liquidus*, (à l'extérieur de la zone pâteuse), et au *cœur* de la masse liquide peuvent *pénétrer* en bas de la zone pâteuse, alimentant et donnant ainsi, une *quantité de mouvement* aux *écoulements ascendants, relativement forts*, dans la région pâteuse. Ceci est une explication aux *très fortes* intensités de vitesses observées dans la région *critique* de la région pâteuse.

Également, ce *mécanisme de transport convectif (solutal)* conduit à « *l'effet lavage* », discuté en chapitre 2, qui est une « *ségrégation négative* ». L'effet lavage « ou *ségrégation négative* ». Les (Figs.4.10e et 4.11e) illustrent, en effet, la « *ségrégation négative* » qui commence à se développer, dans la région en dessous de la zone pâteuse, due à la *pénétration* des écoulements de masse liquide dans la zone pâteuse.

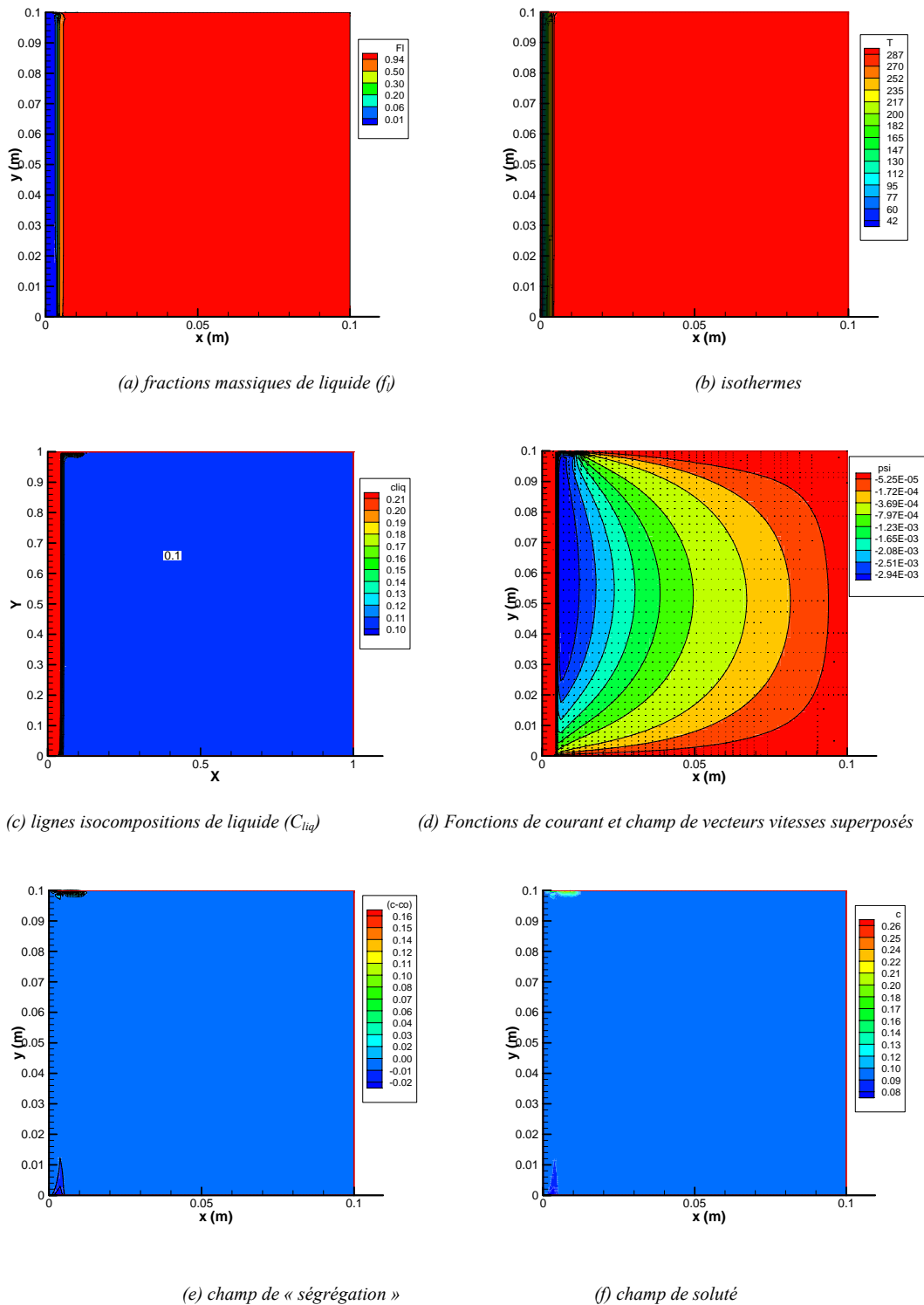


Figure 4.10 : Premières étapes de solidification à $t \approx 1$ s de solidification (200 pas de temps).

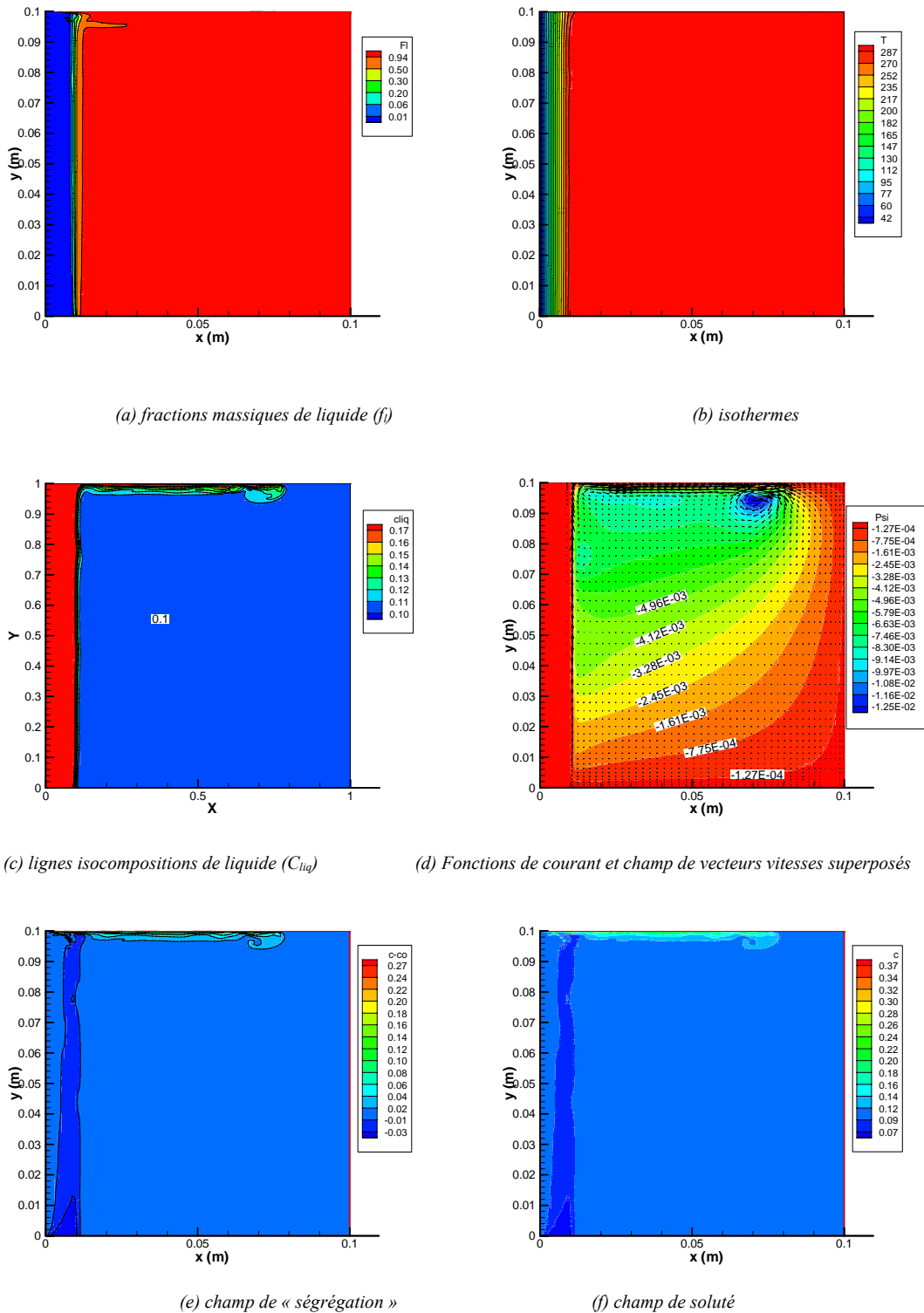


Figure 4.11 : Premières étapes de solidification à $t \approx 5$ s de solidification (1000 pas de temps).

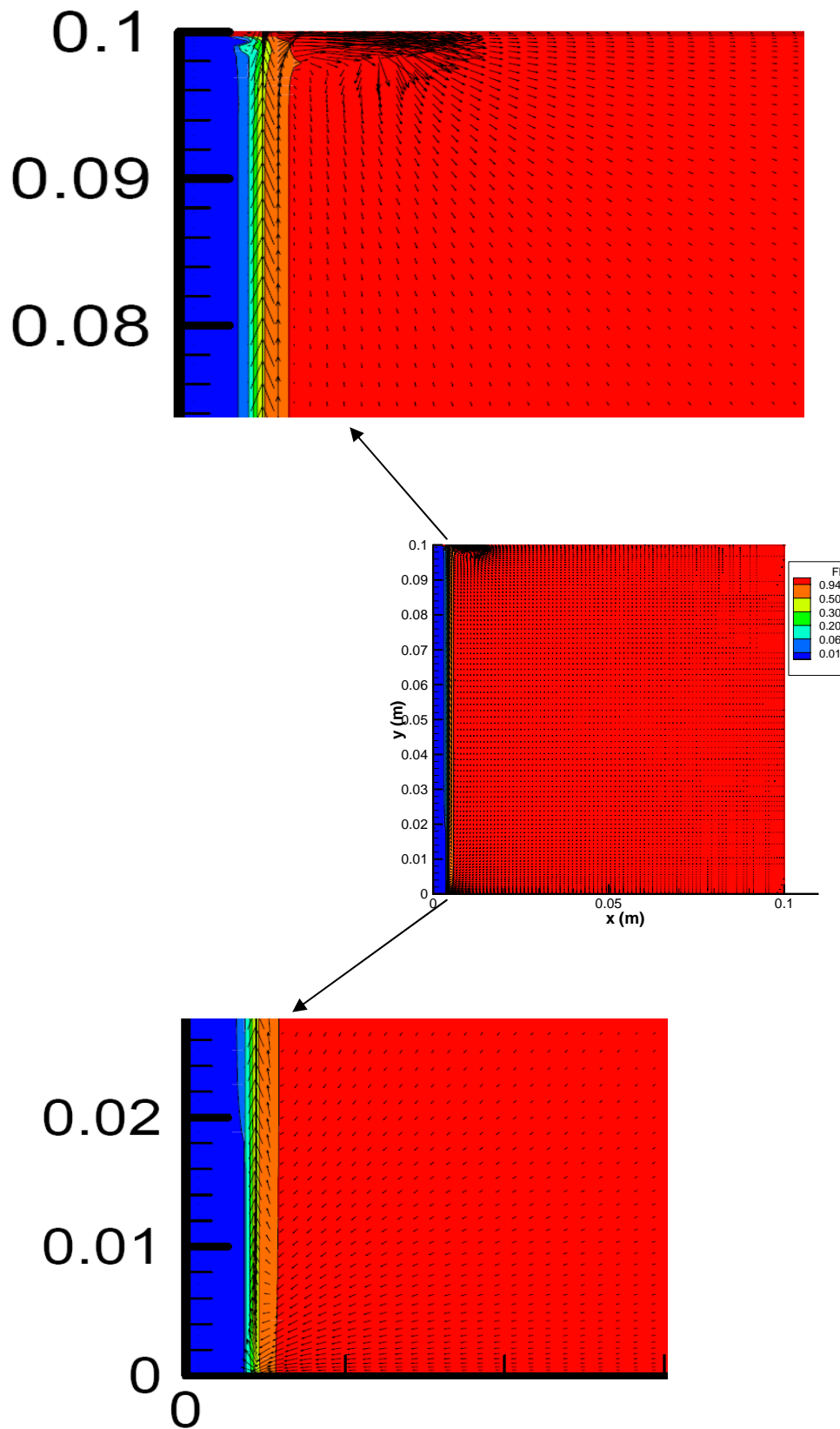


Figure 4.12 : Solidification à $t \approx 1$ s (200 pas de temps) : Illustration de la refusion, poches liquide et ségrégation négative pour ce temps de solidification (en début).

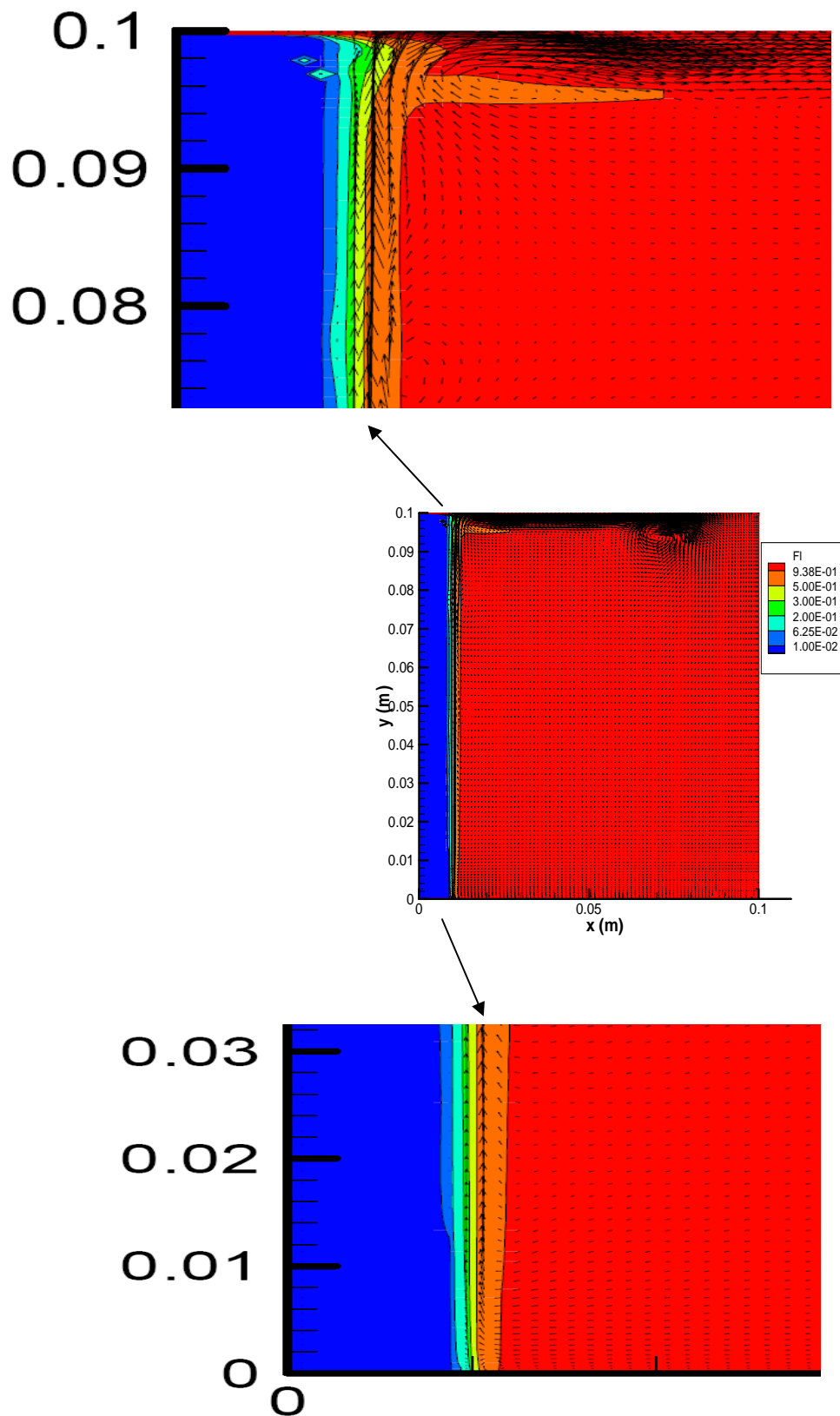


Figure 4.13 : Solidification à $t \approx 5$ s (1000 pas de temps) : Illustration de la refusion, poches liquide et ségrégation négative pour ce temps en début de solidification.

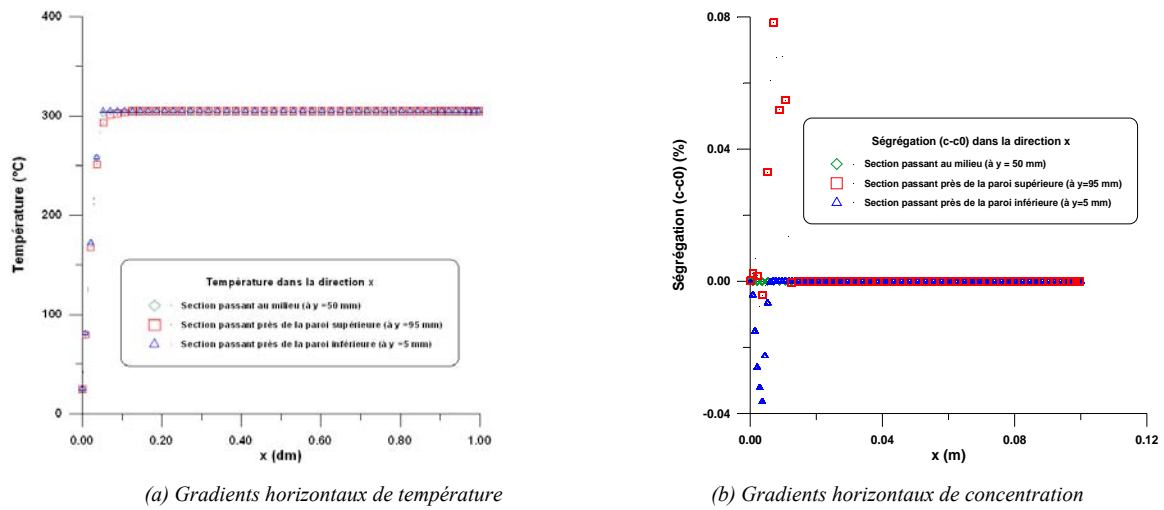


Figure 4.14 : Solidification à $t \approx 1$ s (200 pas de temps) : Illustration de gradients de température et concentration selon différents sections horizontaux de la cavité (à $t \approx 1$ s)

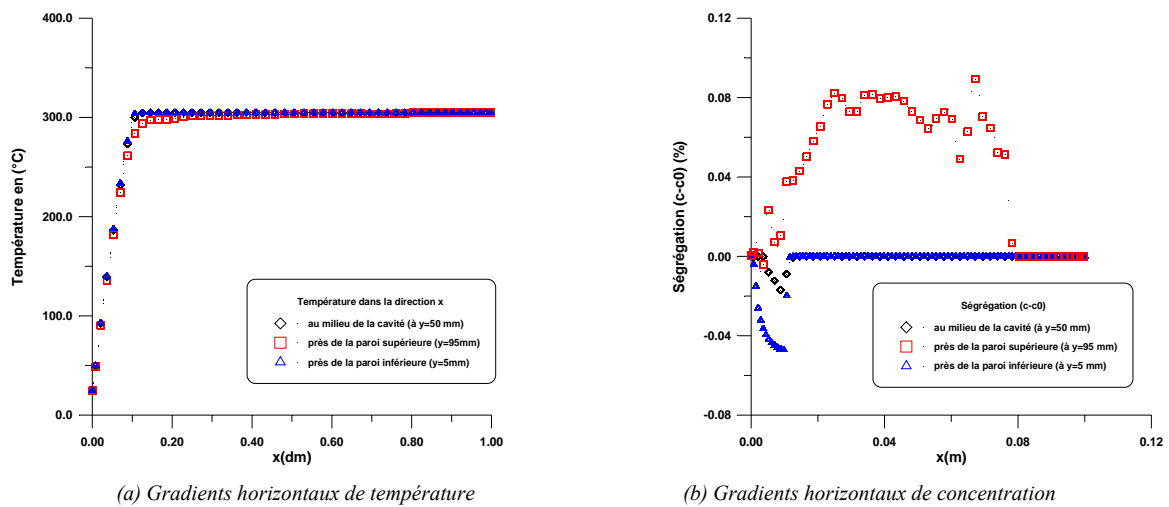


Figure 4.15 : Solidification à $t \approx 5$ s (1000 pas de temps) : Illustration de gradients de température et concentration selon différents sections horizontaux de la cavité (à $t \approx 5$ s)

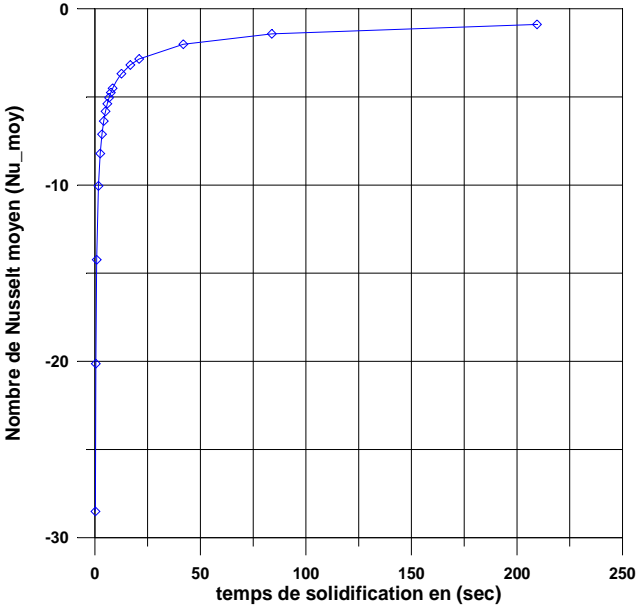


Figure 4.16 : Distribution du Nombre de *Nusselt* moyen, calculé sur la paroi de gauche de la cavité, en fonction du temps de solidification.

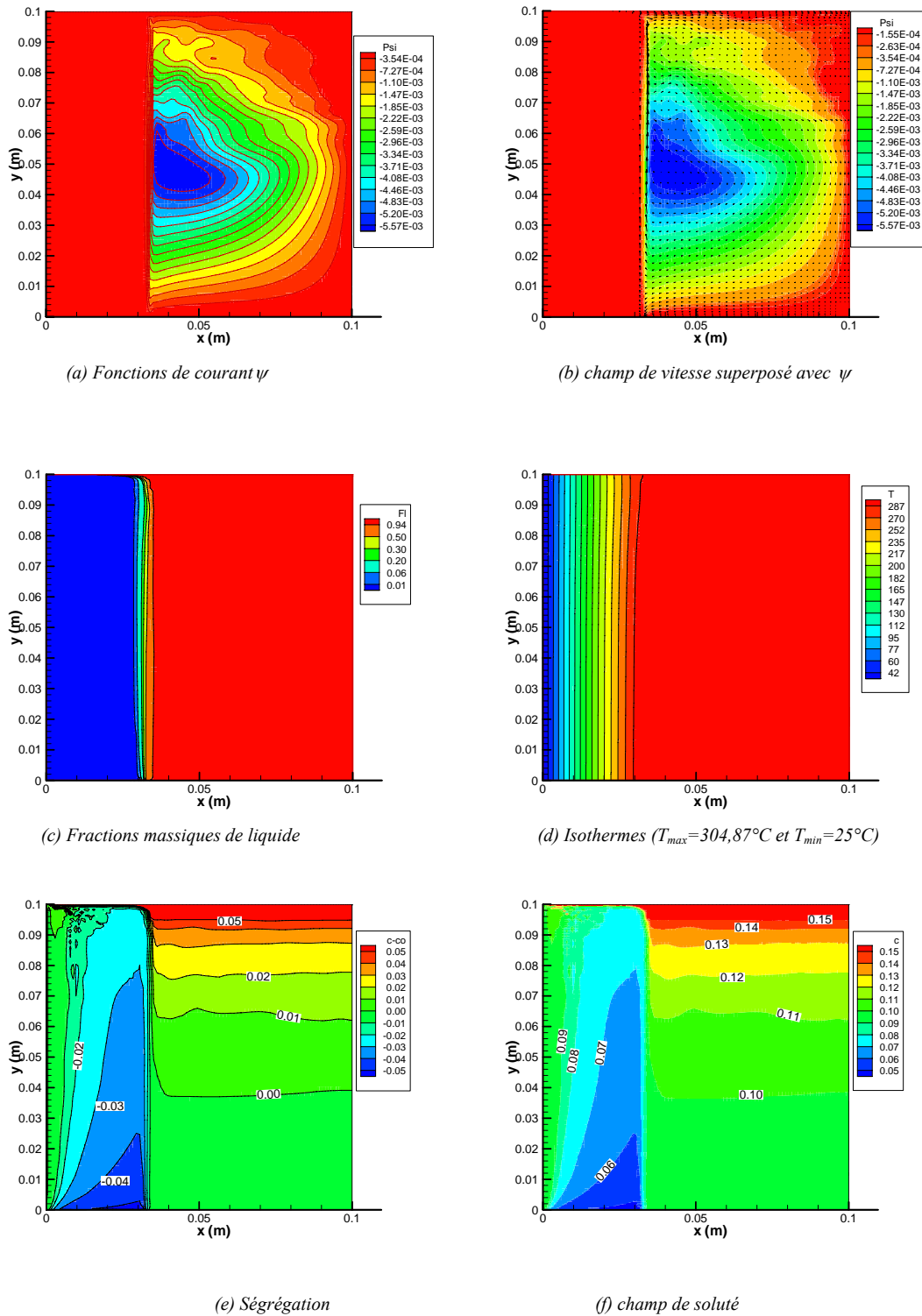


Figure 4.17 : Solidification à $t \approx 42\text{s}$ (10000 pas de temps). Les valeurs maximale et minimale de la fonction de courant ($\psi_{max}=1,91 \times 10^{-5}$ et $\psi_{min}=-0,00594$) et pour le champ de vitesse ($u_{max}=4,88\text{ mm/s}$; $u_{min}=-2,39\text{ mm/s}$) et ($v_{max}=28,48\text{ mm/s}$; $v_{min}=-2,31\text{ mm/s}$) ce qui donne une vitesse maximale

$$\text{de } \|\vec{V}_{max}\| = 28,48\text{ mm/s.}$$

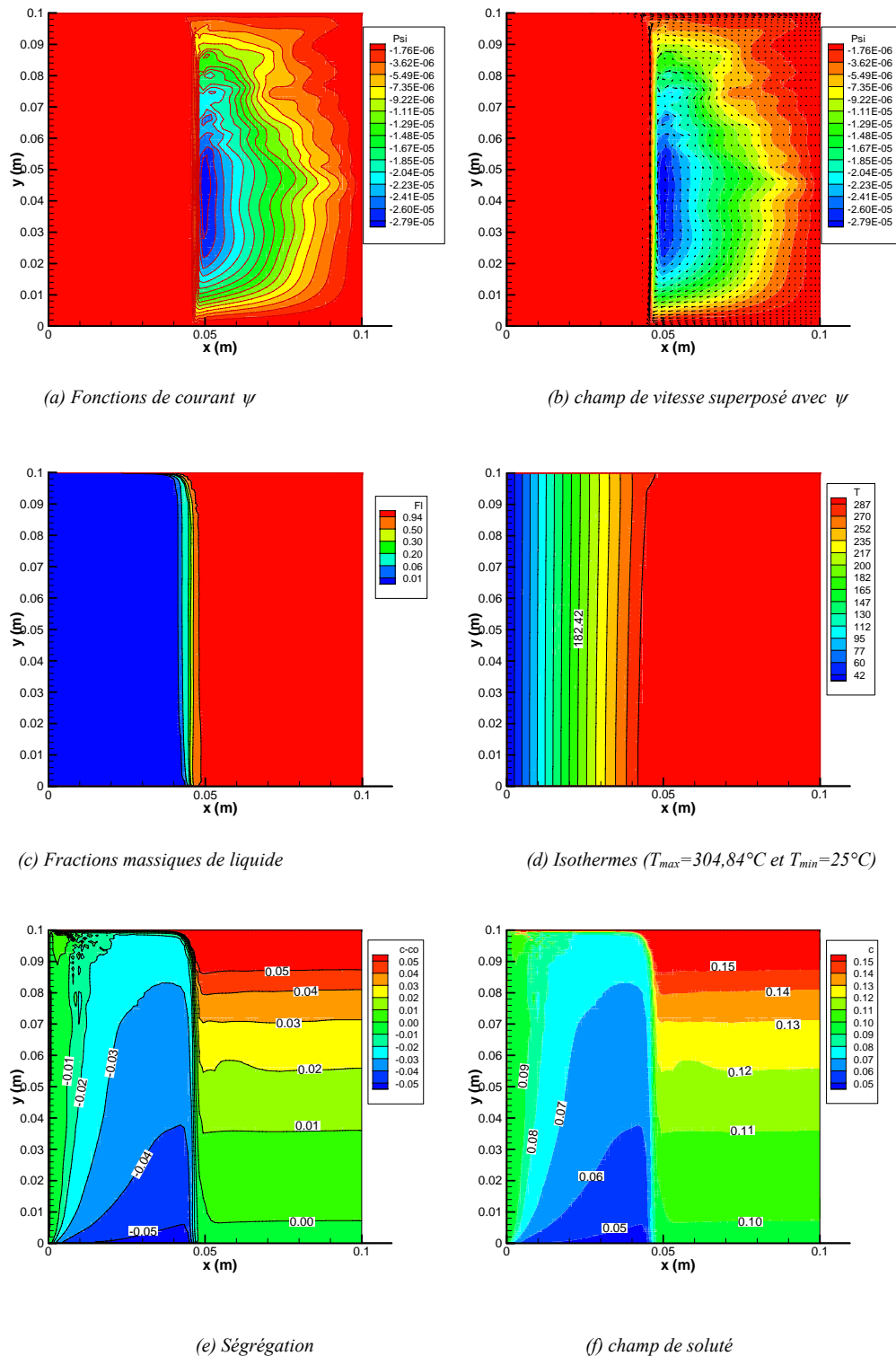
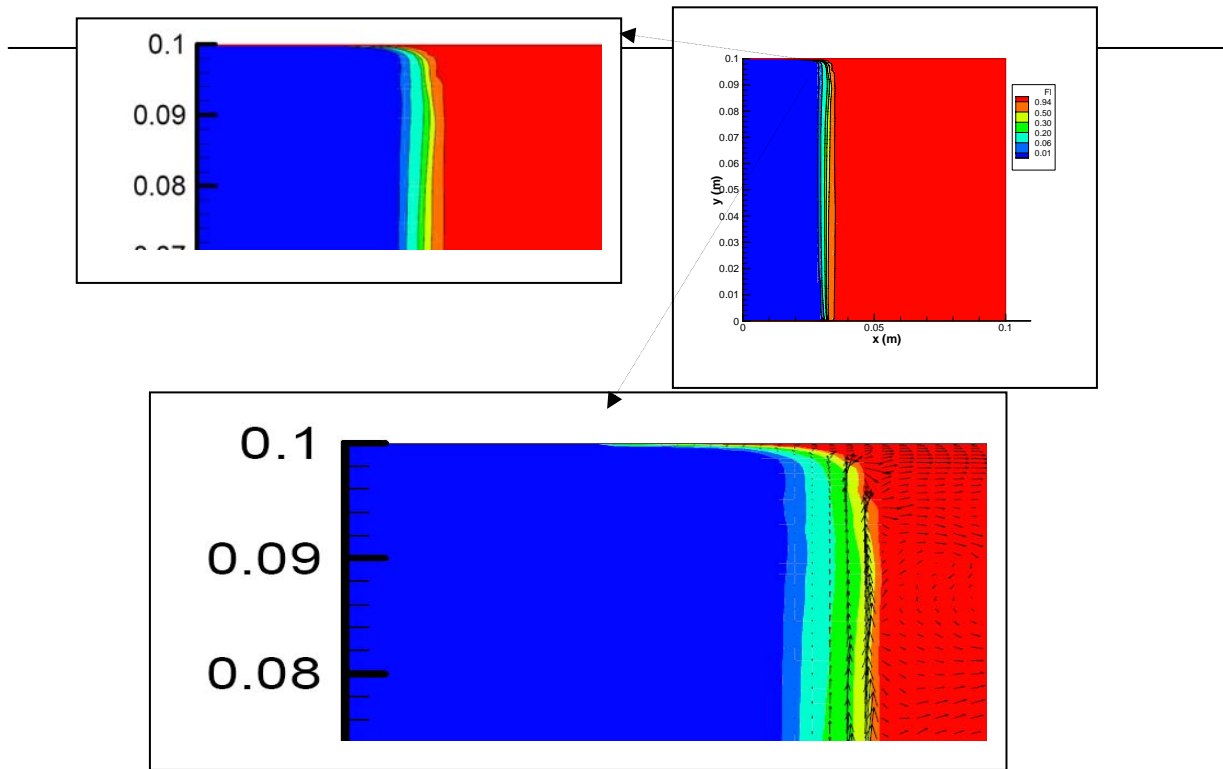
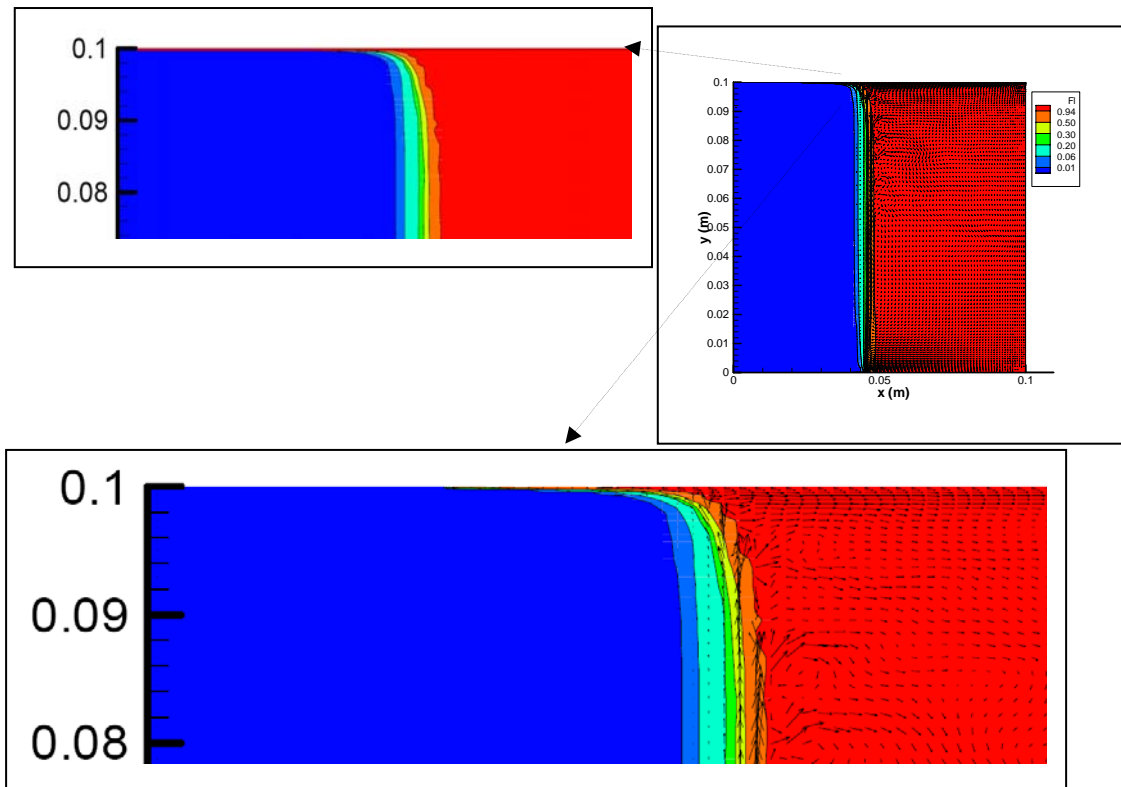


Figure 4.18 : Solidification à $t \approx 84$ s (20000 pas de temps). Les valeurs maximale pour la fonction de courant ($\square_{max} = 1,28 \times 10^{-7}$ et $\square_{min} = -3,48 \times 10^{-5}$) et pour le champ de vitesse ($u_{max} = 2,64 \text{ mm/s}$; $u_{min} = -2,22 \text{ mm/s}$) et ($v_{max} = 13,74 \text{ mm/s}$; $v_{min} = -1,67 \text{ mm/s}$) ce qui donne une vitesse maximale de $\|\vec{V}_{max}\| = 13,74 \text{ mm/s}$. Il est à noter ici que les fonctions \square sur la fig.4.18a sont données en valeurs adimensionnelles



(a) solution à $t = 42$ secondes



(b) solution à $t = 84$ secondes

Figure 4.19 : Zoom de la région en haut de zone pâteuse et illustration de l'écoulement de canal.

4.5.2.2 Étapes intermédiaires de solidification

Pour avoir un aperçu sur le comportement de convection aux étapes intermédiaires du processus de changement de phase, nous présentons par la suite, les étapes *intermédiaires* de solidification à (42 et 84 secondes).

Les figures 4.17 et 4.18 montrent les distributions de fractions massiques de liquide (f_l), fonctions de courants « ψ », champ de vecteurs vitesses superposé avec « ψ » dans les zones liquide et pâteuse et les isothermes, calculés pour l'alliage *Pb- 10pds% Sn*, après 42 et 84 secondes de *refroidissement*, respectivement, pour les conditions de la **situation I**.

Comme il peut être observé, que de façon *générale* dans la cavité, les *tendances* prédites précédemment (pour les premières étapes de solidification), sont presque les mêmes et peuvent être résumées de la façon suivante.

a- En termes d'évolution du champ d'écoulements en fonction du temps

L'écoulement s'effectue préférentiellement dans le sens des aiguilles d'une montre et « ψ » croît à partir du centre en *vortex pour* former des *cellules de recirculation de convection solutale*. Notons que les valeurs maximale ψ_{\max} (donnant un aperçu des intensités de convection *thermique*) et minimale ψ_{\min} (donnant un aperçu d'intensités de convection *solutale*), respectivement, ont été mentionné sur les Figs. 4.17 et 4.18 pour les deux étapes de solidification (42s et 84s), conjointement avec les vitesses maximales de composantes u et v . La valeur maximale, du vecteur de vitesse est $\|\vec{V}_{\max}\| = \sqrt{u^2 + v^2}$, calculées pour ces temps de solidification. Comme il se peut être observé, l'accord en termes de *tendance générale* de fonctions de courants, entre les deux prédictions (à 42s et 84 s) est semblable : bien que les centres de *tourbillon* « *vortex* » et la forme générale des fonctions de courant ne se *correspondent pas, cependant*, ils ont un *comportement semblable* lors du changement de phase (Figs.4.17a et 4.18a). Dans ce contexte il faut souligner que :

-les profils de vitesse observés (Figs.4.17a et 4.18a) dans la région centrale de la cavité suggèrent des échanges stabilisant de fluides *chauds* et *froids* de bas en haut de la cavité. En particulier, un écoulement de recirculation est établi, par lequel le fluide, descend à partir de

la région pâteuse, vers le bas de la cavité pour alimenter l'écoulement ascendant dans la région pâteuse.

- Clairement, la convection dans ce cas est, également, dominée par la *convection solutale* et les éléments (atomes) d'étain qui *continuent à être* rejetés, dans le temps, ont tendance à produire *davantage* de *fluide interdendritique* léger ; par conséquent, il s'écoule vers le haut (écoulement *ascendant*) (c'est-à-dire que c'est une cellule de *recirculation* dans le sens des aiguilles d'une montre) (Figs.4.17a et 4.18a).

- D'autre part, les prédictions obtenues pour les deux étapes de solidification à *42s et 84 s* sont très proches l'une de l'autre dans la zone pâteuse, où la force de guidage de l'écoulement fluide (*interdendritique*) est localisée (Figs.4.17a et 4.18a).

Néanmoins, des différences *morphologiques* (dans la forme des \square) sont beaucoup plus *prononcées* dans la région de masse liquide. Ce qui peut être clairement observé dans la partie droite de la cavité et proche de la région haute supérieure (Figs.4.17a et 4.18a) et bien sûr dans la forme générale des cellules convectives, constituant le *vortex*, qui est modifié et les cellules s'élargissent avec l'évolution de solidification. En outre, il faut noter *l'épuisement de l'intensité de la convection* par rapport aux premières étapes de solidification. Dans ce contexte, il est à remarquer que les vitesses diminuent. Par exemple : la vitesse maximale obtenue à 84 s est *13,74 mm/s*, elle est inférieure à celle obtenue à 42 s (soit *28,48 mm/s*) (Figs. 4.17, 4.18).

b- En termes de l'évolution du champ des fractions massiques de liquide (f_l) dans le du temps

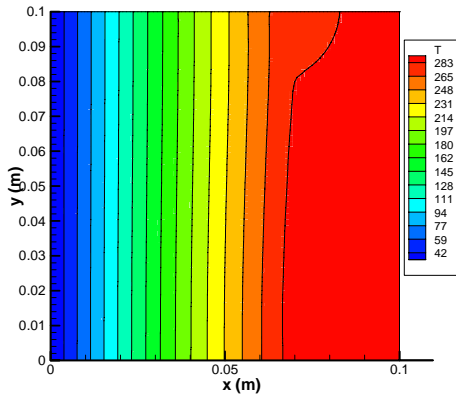
Les *contours de fractions massiques* de liquide (f_l) (Fig.4.17c et Fig.4.19a) (à $t = 42 s$) sont aussi en bon accord: leurs formes se correspondent assez bien, bien que l'iso-ligne $f_l = 0,94$ (c.-à-d. $f_s = 1 - f_l = 0,06$) qui *délimite*, approximativement, *la position de sommet de dendrite* soit légèrement *plus perturbée* que dans l'étape (à $t = 84 s$) (Fig.4.18c et Fig.4.19b)).

En outre, un examen, approfondi, de ces contours montre que :

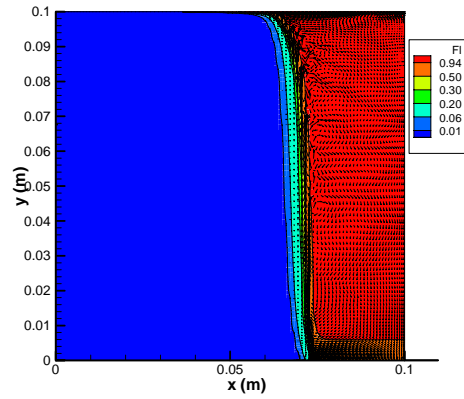
En haut de la cavité, la couche de liquide riche en soluté (Sn) s'accumule *davantage*, avec *l'évolution de solidification*, comme un résultat de la convection *solutale* et par conséquent, les lignes *iso-fractions* de liquide (f_l) sont presque *horizontales* (voir le zoom de

cette région en Figs.4.19 (a et b). En effet, avec la *pénétration* des écoulements de fluide le front de liquidus se poursuit, la *taille* de la couche de fluide riche en étain développée à 84 s, (Fig.4.18f), est plus importante que celle développée à $t = 42$ s (Fig.4.17f). Une *tendance* à former des **canaux ségrégés** est observée dans les résultats (à 84 s) près de cette paroi (du haut), cette *tendance* est illustrée par les *oscillations* des valeurs de (f_i) observées le long de la *ligne verticale* (par exemple la ligne iso-fraction $f_i = 0,94$) (voir les zooms Fig. 4.19b). Celle-ci est due au fait que près de la paroi supérieure (en haut) de la cavité, le *liquide interdendritique* avait une vitesse presque *parallèle* aux *isothermes* (Fig. 4.19b) (voir la condition de refusion ci-dessus). De telle *tendance* à former des **canaux ségrégés** est moins *apparente* dans les résultats (à 42 s) (Fig. 4.19a). En outre, l'*écoulement canal* (Figs.4.19a et 4.19b) est plus *prononcé*, avec l'*évolution de solidification*, indiquant qu'un *élargissement* de ce dernier a eu lieu (en se référant à l'explication donnée ci-dessus) et comme nous l'avons bien souligné pour les premières étapes de solidification, ces écoulements sont responsables de la *ségrégation de type canal* (figures 4.17(e) et 4.18(e)).

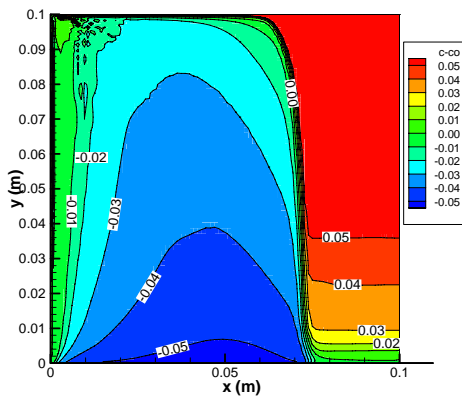
Par contre, la réduction du front de liquidus **en bas de la cavité**, se poursuit aussi, (en raison des écoulements *entrants*, des fluides chauds de la région de masse liquide) et elle s'augmente avec l'évolution de la solidification (Fig.4.17a et 4.18a). En réalité, une **diminution** de température liquidus *accompagne* l'enrichissement en étain des fluides de masse liquide en haut de la cavité (mais elle est peu significative ici, Figs.4.17a et 4.18b). Cette *diminution* et l'*impact* des masses fluides chaudes sur le front de *liquidus* ; dirigé par la *recirculation* « *tourbillon* » induite solutalement, créent une réduction des **taux de croissance locaux** et une *réduction* des fronts *solidus* et *liquidus* en bas de la cavité (Fig.4.17a et 4.18a). Le front de *solidus*, est cependant peu influencé par le *mouvement convectif* dans sa majeure partie. Le déplacement continu du fluide de la masse liquide riche en Sn, près le bas de cavité, conduit à une *diminution graduelle* dans la teneur en Sn et, en fin de compte, à la formation d'une *zone pauvre* en Sn au fond de la cavité, par exemple (figures 4.17(e) et 4.18(e)).



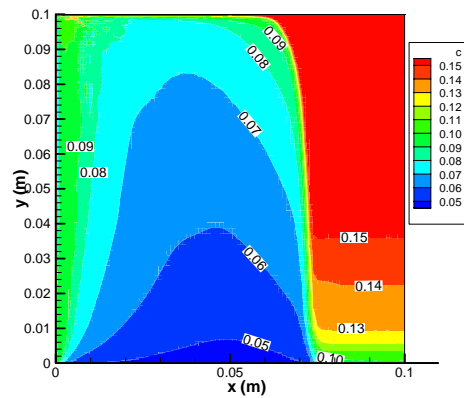
(a) Isothermes ($T_{max}=299,68^{\circ}\text{C}$ et $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)



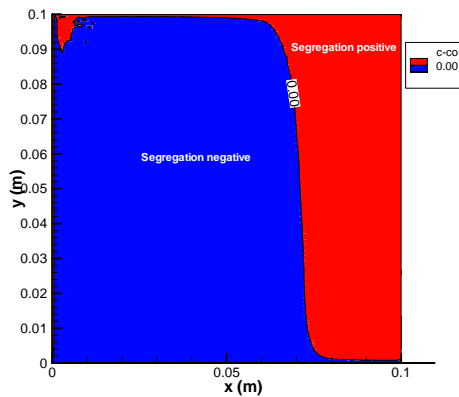
(b) champ des vitesses superposé avec f_i



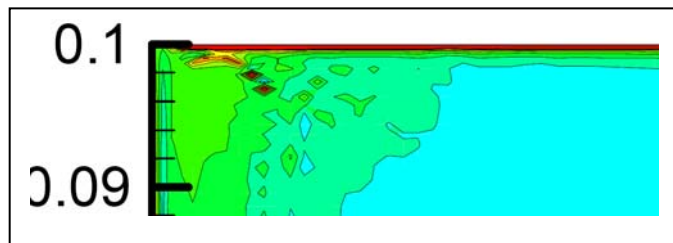
(c) champ de ségrégation ($f^{sn}-f^{sn_0}$)



(d) champ de soluté (f^{sn})



(e) Ligne neutre et zones de ségrégation négative et positive



(f) Zoom dans le canal ségrégué formé

Figure 4.20 : Solidification à $t \approx 210$ secondes (soit 50 000 pas de temps).

4.5.2.3 Étapes finales de solidification et *ségrégation* associée

La figure 4.20 présente, pour le même alliage, les *isothermes* et les *contours* de *ségrégation* après (210 secondes) de *refroidissement*. Un bon accord, en termes de *tendances*, entre les résultats est à noter, spécialement pour les *isothermes* obtenues, pour les deux temps à ($t = 42$ et 84 s en Figs.4.17c et 4.18c) et temps $t = 210$ secondes. Les *isothermes* (Fig.4.20a) sont plus *penchants* dans la direction des aiguilles d'une montre comme un résultat de l'écoulement fluide (Fig.4.20b). Les contours en figure (4.20c) montrent la *déviaton de la composition nominale* « *ségrégation* » ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$). La ligne neutre (0 pds%) (ce qui correspond à la *composition nominale* $f_0^{Sn} = 10$ pds%) s'étend à partir du *coin* supérieur de gauche au *coin* inférieur de droite de la cavité (lingot) et a presque la même *forme* dans les deux temps 42 et 84 secondes (Figs.4.17e et 4.18e). La région en dessous de cette ligne est caractérisée par une « *ségrégation négative* » (Fig.4.20e), légèrement *accentuée* dans les résultats de l'actuelle étape de solidification ($t = 210$ s) (Fig.4.20e), alors que la zone *supérieure* de droite a une « *ségrégation positive* », encore plus *accentuée* à cette étape de solidification (Fig.4.20e) (ceci est évident en raison de l'évolution de la phase solide avec le temps).

La région *supérieure* de gauche du moulage (lingot) est caractérisée par un gradient élevé de fraction massique de liquide (f_l) pour cette étape de solidification (à $t = 210$ s) (Fig.4.20b). D'autre part, les iso- compositions (Fig.4.20d) calculées (à $t = 210$ s) dans cette même aire (de gauche) montrent un *ensemble* de *canaux horizontaux* (entre 0 et 15 pds%) (Fig.4.20f).

D'autre part, le résultat présenté en zoom sur la Fig. 4.20f (à $t = 210$ s) montre des *canaux ségrégés* inclinés de faibles intensités (entre ≈ 2 et 3 pds%) leurs positions correspondent au choc déjà observé sur les iso-fractions de solide (voir Figs. 4.12a). en outre, le résultat présenté en zoom sur la Fig. 4.20f (à $t = 210$ s) montre, aussi des tâches de ségrégation (positive) leurs positions correspondent également aux positions des poches liquides observées (voir Fig.4.12a). Les canaux observés sont *inclinés* par rapport aux limite de lingot et vus comme ceux calculés numériquement ou observés expérimentalement dans la littérature par exemple [Ahmad et al. (1998) ; Kämpfer (2002) et Weitao (2005)] dans l'alliage Pb-48Sn.

4.5.3 Régimes d'écoulements obtenus lors de solidification

Pour avoir une idée sur les intensités des écoulements de convection (solutale et thermique), sur le tableau 4.7 nous avons présenté les valeurs maximale et minimale pour les fonctions de courant (ψ_{\min} et ψ_{\max}) et composantes de vitesse (horizontale « u » et verticale « v ») lors de solidification. D'autre part, nous avons calculé le nombre de *Reynolds* (*Re*) pour chaque temps de solidification en se référant à la *vitesse maximale* atteinte dans la cavité. Il est à remarquer que la *transition* au régime *turbulent* peut être obtenue en particulier durant les premières étapes de solidification (tableau 4.7).

Remarque 4.7 : Comme la valeur maximale de la vitesse s'intervient, approximativement, au centre de la zone pâteuse (*région critique*), alors le vecteur de vitesse est entièrement dans la direction verticale, par conséquent, la vitesse ne possède qu'une composante verticale, la vitesse maximale (utilisée dans le calcul de Reynolds).

Comme nous avons illustré auparavant, dès le début de solidification, la convection induite *solutalement* domine l'écoulement de fluide dans les régions : pâteuse et de masse liquide. La vitesse maximale *ascendante* (strictement verticale), observée dans la zone pâteuse, est obtenue entre 4 et 5 *secondes*, étant 60,98 mm/s, alors, le nombre de Reynolds de référence (chapitre 2) pour un tel écoulement de fluide est donné par :

$$Re = \frac{\|\vec{v}\| L}{\nu} = \frac{0,06098 \times 0,1}{(2,49 \times 10^{-3} / 10100)} \approx 2,4 \times 10^4$$

Tableau 4.7 : Conditions de convection lors de solidification.

temps	ψ_{\min}	ψ_{\max}	u_{\min} (mm/s)	u_{\max} (mm/s)	v_{\min} (mm/s)	v_{\max} (mm/s)	Re
0,5 s	-0,0016266	$9,8 \times 10^{-5}$	-2,18	15,53	-4,44	15,63	$6,34 \times 10^3$
42 s	-0,0059447	$1,91 \times 10^{-5}$	-2,39	4,89	-2,31	28,48	$11,44 \times 10^3$
125 s	-0,0023688	$5,99 \times 10^{-6}$	-2,32	2,02	-2,52	12,38	$5,02 \times 10^3$
210 s	$-1,74 \times 10^{-5}$	$4,09 \times 10^{-7}$	-1,64	1,75	-2,88	7,52	$3,05 \times 10^3$

Il est remarqué, que le nombre de Rayleigh (solutal) de référence Ra_C est de l'ordre de (10^9) . Tandis que le nombre de Rayleigh thermique ($Ra_T \approx 5,35 \times 10^7$). Ce qui indique que la *transition* vers un *écoulement turbulent* (instable) peut apparaître.

Pour supprimer ces turbulences et stabiliser ainsi le champ d'écoulements, il est recommandé d'appliquer un champ magnétique. Dans la littérature cet outil de stabilisation a prouvé son efficacité dans la réduction et l'affaiblissement des écoulements convectifs (en se référant aux chapitres 1 et 2). Par la suite nous allons examiner l'effet d'un champ magnétique statique et uniforme, appliqué horizontalement, et un champ magnétique statique et uniforme, appliqué verticalement.

Remarque 4.8 : Nous rappelons que dans tous les calculs effectués sur l'alliage Pb-10%Sn, un maillage de taille 100x100 (dans le domaine de lingot) alors qu'un pas de temps de 0,004 s (en outre, le nombre des itérations de couplage étant de 20 itérations) ont été utilisés. Le calcul pour simuler la solidification après 20000 pas de temps (soit *42 secondes*), par exemple, prend environ *48 heures* en temps « CPU » sur un micro ordinateur « **Pentium 5**, de processeur **3 GHz** et **2048MB** de RAM ».

4.5.4 Effet de l'intensité et direction du champ magnétique externe *statique et uniforme* (**situations II et III**)

Dans le but de contribuer à la *compréhension* de l'*effet* d'amortissement d'un champ magnétique « *statique et uniforme* » appliqué à l'écoulement *convectif* thermosolutal. Nous avons réalisé, en particulier, des tests de calcul dans lesquels un champ magnétique externe est appliqué, en premier lieu dans la direction horizontale (**Situation II**) et en suite dans la direction verticale (**Situation III**). Alors que les grandeurs (intensités) des champs appliquées sont résumées en tableau 4.1.

Avec l'application d'un champ magnétique externe, l'étude consiste ainsi à l'examen d'un procédé *directionnel* de solidification d'alliage binaire « *conducteur électrique* » dans lequel la convection dans le liquide est induite par l'action combinée des forces de *flottabilité thermique* et *solutale* (*convection thermosolutale*) aussi bien que des *forces de Lorentz* dues à au champ magnétique appliqué (*convection électromagnétique*).

Le premier cas étudié (**situation I**) étant la solidification, d'alliage binaire, dominée par la *conduction-convection*. Dans le cas où un champ magnétique, *statique* et *uniforme* d'intensité B_0 , est appliqué, le modèle complet du **tableau 3.2** doit être résolu et le terme de force de *Lorentz* doit être ajouté dans le terme source \mathbf{B} dans la forme générale de l'équation continue de conservation de quantité de mouvement, présentée en chapitre 3 (par l'équation 3-29) et résumée en **tableau 3.2**.

D'autre part, il faut noter, en se référant à l'*hypothèse* imposée par la remarque 4.1 : (dans le cas 2D, l'équation de conservation de charge électrique (potentiel) se réduit à $\nabla^2 \Phi = 0$). En outre avec cette approximation, la *force de Lorentz* (comme nous l'avons illustré en chapitre 2 (équation 2.41)) se réduit à : ($\mathbf{F}_{Lorentz} = \sigma_e (\mathbf{V} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}$), avec σ_e est la conductivité électrique du fluide, \mathbf{V} le vecteur de vitesse du fluide et \mathbf{B} détermine la magnitude (grandeur) et l'orientation du champ magnétique.

Par conséquent, nous devons rajouter seulement les termes de forces de *Lorentz* dans le terme source \mathbf{B} dans les équations de quantité de mouvement (3.27 et 3.28), sans avoir besoin de résoudre de l'équation de conservation de charge électrique (potentiel).

Dans ces conditions la version adimensionnelle du système des équations continues de conservation (de masse, quantité de mouvement, chaleur et soluté dans les systèmes binaires à changement de phase solide-liquide), dans la présence d'un *champ magnétique*, appliqué dans une direction arbitraire, formant un angle β avec la direction horizontale (Fig.4.1), s'écrit :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}U) = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Gr^{0.5}} \nabla^2 U - \frac{1}{DaGr^{0.5}} \frac{(1-\varepsilon_l)^2}{\varepsilon_l^3} U + \frac{Ha^2}{Gr^{0.5}} [V \sin \beta \cos \beta - U \sin^2 \beta] \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}V) = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{Gr^{0.5}} \nabla^2 V - \frac{1}{DaGr^{0.5}} \frac{(1-\varepsilon_l)^2}{\varepsilon_l^3} V + (\Theta + NX_l) + \frac{Ha^2}{Gr^{0.5}} [U \sin \beta \cos \beta - V \cos^2 \beta] \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V} H) = \frac{1}{Pr Gr^{0.5}} \nabla \cdot \left(\frac{1 + \varepsilon_s (Rk - 1)}{CP} \nabla H \right) + \frac{1}{Pr Gr^{0.5}} \nabla \cdot \left(\frac{1 + \varepsilon_s (Rk - 1)}{CP} \nabla (H_l - H) \right) - \nabla \cdot (f_s \mathbf{V} (H_l - H_s)) \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\underline{\rho} C^\alpha) + \nabla \cdot (\underline{\rho} \mathbf{V} C^\alpha) = \frac{1}{Sc Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} (1 - f_s) \nabla C^\alpha) + \frac{1}{Sc Gr_T^{1/2}} \nabla \cdot (\underline{\rho} (1 - f_s) \nabla (C_l^\alpha - C^\alpha)) - \nabla \cdot (f_s \underline{\rho} (C_l^\alpha - C_s^\alpha) (\mathbf{V} - \mathbf{V}_s)) \quad (4.8)$$

$$\nabla^2 \Phi = 0 \quad (4.9)$$

où: U , V , Θ , H , C^α , sont les variables dépendantes adimensionnelles définies précédemment (chapitre 3) et Φ étant le potentiel électrique (adimensionnel), respectivement.

4.5.4.1 Situation II : Effet d'un champ magnétique « statique et uniforme » appliqué dans la direction horizontale :

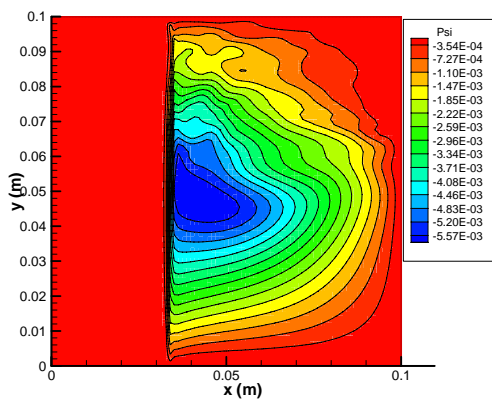
Sous un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale ($\beta = 0^\circ$), de grandeurs : $B_0 = 0 ; 0,025 ; 0,05 ; 0,075 ; 0,1$ et $0,2$ Tesla, ce qui correspond aux nombres de Hartmann ($Ha = 0 ; 57 ; 115 ; 172 ; 230$ et 460 , respectivement) (tableau 4.2), les distributions de fonctions de courant « ψ » et vecteurs vitesses superposés avec « ψ », (à $t = 42$ s de refroidissement) sont présentées sur les figures 4.21 et 4.22) respectivement.

1- Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur l'écoulement

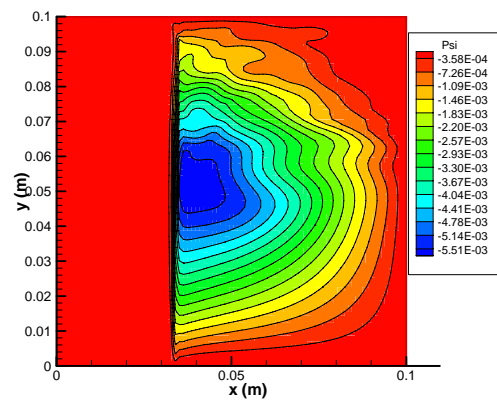
La figure 4.21 montre que les *cellules* de *recirculation* conduits solutale (convection *solutale*), en particulier dans la partie droite en haut de la cavité, s'*uniformisent* avec l'*augmentation* du champ appliqué (c'est-à-dire de Ha). En outre, les intensités de vecteurs de vitesse deviennent plus faibles que dans le cas précédent (cas de l'absence de champ magnétique $Ha = 0$), les vitesses maximales atteintes, par exemple pour : $Ha = 172$ et 115 , sont de $24,64$ mm/s et $26,76$ mm/s (ce qui implique un nombre de Reynolds : $Re = 9,99 \times 10^3$ et $1,08 \times 10^4$) respectivement, alors que dans le cas d'absence de champ ($Ha = 0$) la vitesse maximale atteinte est de $28,48$ mm/s (ce qui implique $Re = 1,15 \times 10^4$) (Fig. 4.22).

Si le champ magnétique, appliqué, augmente à $B_0 = 0,1$ Tesla ($Ha \approx 230$), les *cellules convectives solutales*, observées (Fig. 4.21e), ont tendance à être plus *uniformes* et la vitesse maximale atteinte est de $22,27$ mm/s (ce qui implique $Re=9 \times 10^3$), ce qui indique une réduction (*stabilisation*) supplémentaire dans l'écoulement. Une augmentation *supplémentaire* de l'intensité de champ magnétique, appliqué, conduit à un écoulement de plus en plus stable (Fig. 4.21f). En effet, les effets couplés de *brassage électromagnétique* et de *flottabilité* dirigent dans la cavité, l'écoulement *convectif* dans la direction des aiguilles d'une montre observé (Fig. 4.21f).

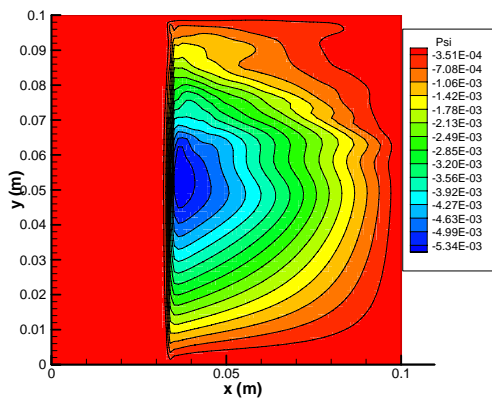
Par conséquent, l'application d'un champ magnétique dans la direction horizontale peut réduire les vecteurs de vitesses et conduire à un *amortissement* de turbulence (voir la courbe de la variation du nombre de Reynolds en fonction du nombre de Hartmann pour quelques temps de solidification (Figure 4.23)) et intensité de l'écoulement de la zone pâteuse et de la masse liquide (Fig.4.22 et Fig.4.24), ce qui conduit, peut être, à une amélioration de l'homogénéité de la microstructure de solide formé (c.à.d. une réduction de la ségrégation).



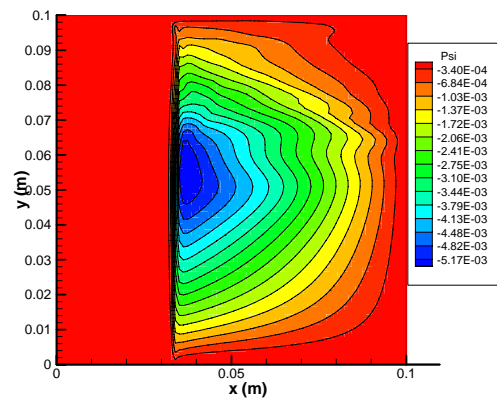
(a) $Ha=0$ ($\square_{max}=1,91 \times 10^{-5}$; $\square_{min}=-0,0059478$)



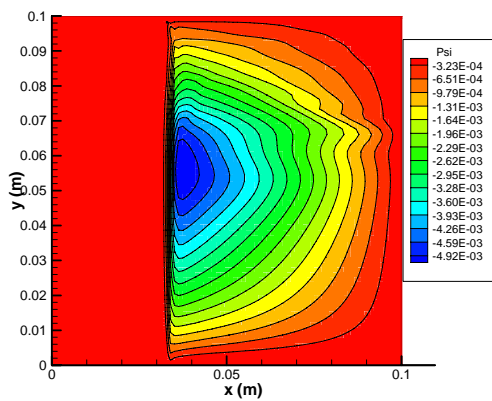
(b) $Ha=57$ ($\square_{max}=1,05 \times 10^{-5}$; $\square_{min}=-0,005880$)



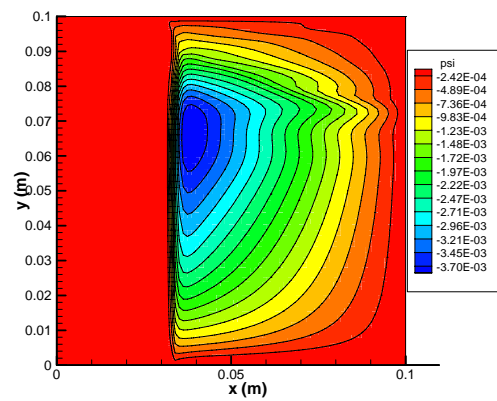
(c) $Ha=115$ ($\square_{max}=5,11 \times 10^{-6}$; $\square_{min}=-0,0056985$)



(d) $Ha=172$ ($\square_{max}=5,09 \times 10^{-6}$; $\square_{min}=-0,005510$)



(e) $Ha=230$ ($\square_{max}=5,13 \times 10^{-6}$; $\square_{min}=-0,005243$)



(f) $Ha=460$ ($\square_{max}=5,15 \times 10^{-6}$; $\square_{min}=-0,003948$)

Figure 4.21: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur le champ de l'écoulement (à $t=42$ s de refroidissement). Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées :

(a)- $Ha=0$; (b)- $Ha=57$; (c)- $Ha=115$; (d)- $Ha=172$; (e)- $Ha=230$ et (f)- $Ha=460$.

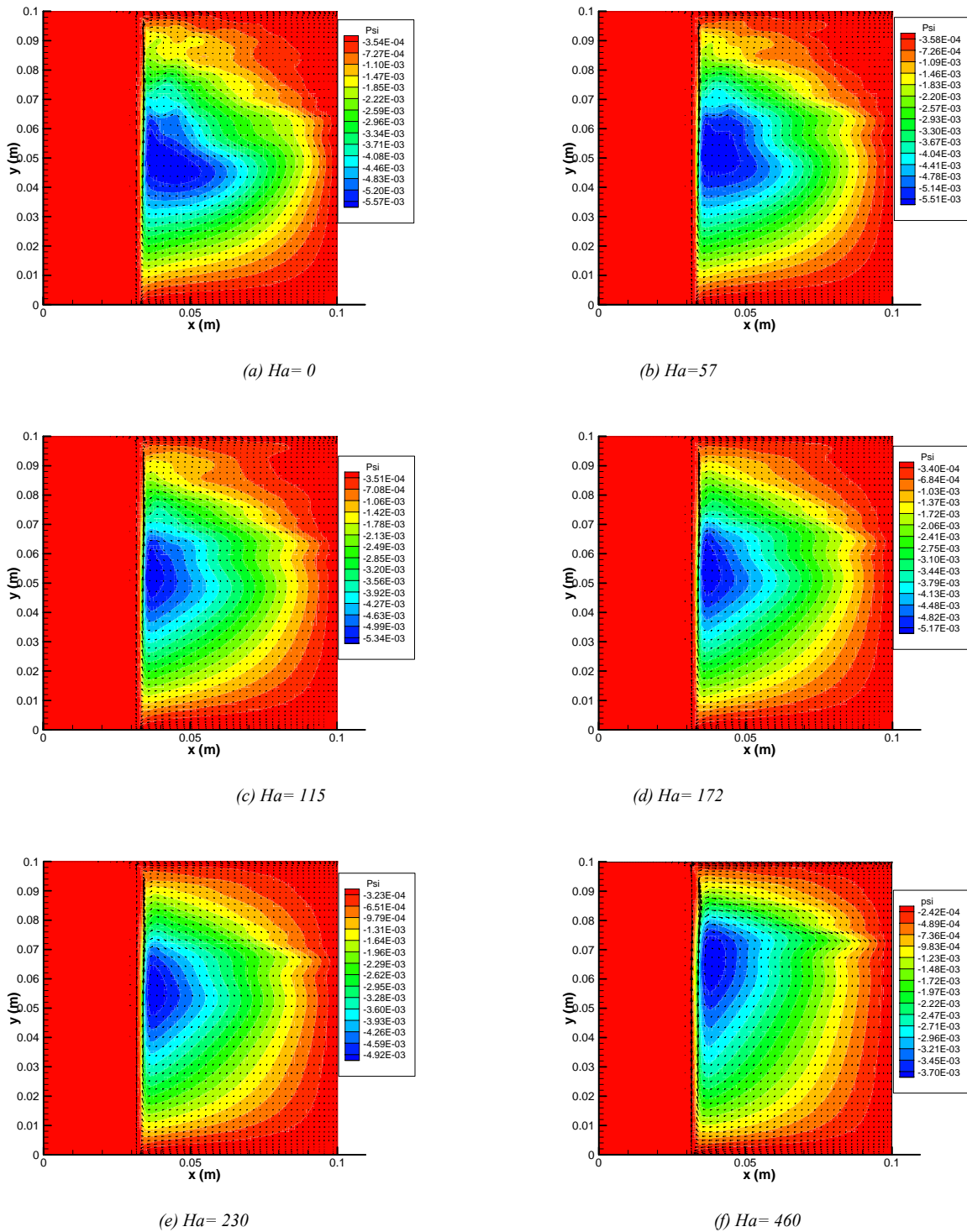


Figure 4.22: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur les vitesses (à $t=42$ s de refroidissement). Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées :

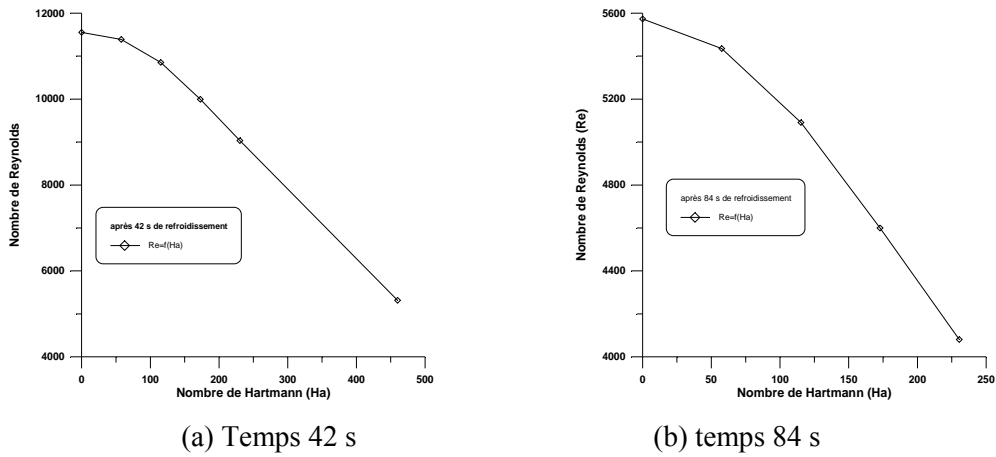


Figure 4.23 : effet d'un champ horizontal sur le nombre de Reynolds Re

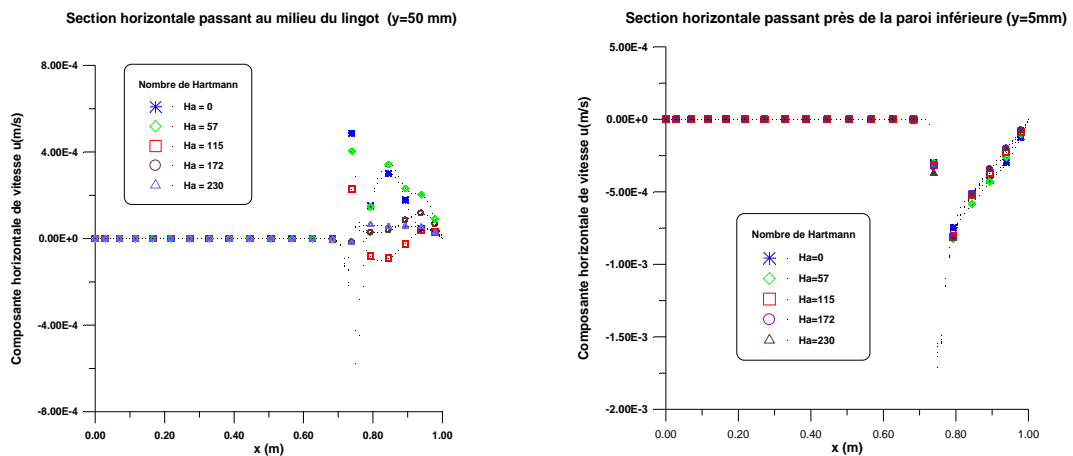
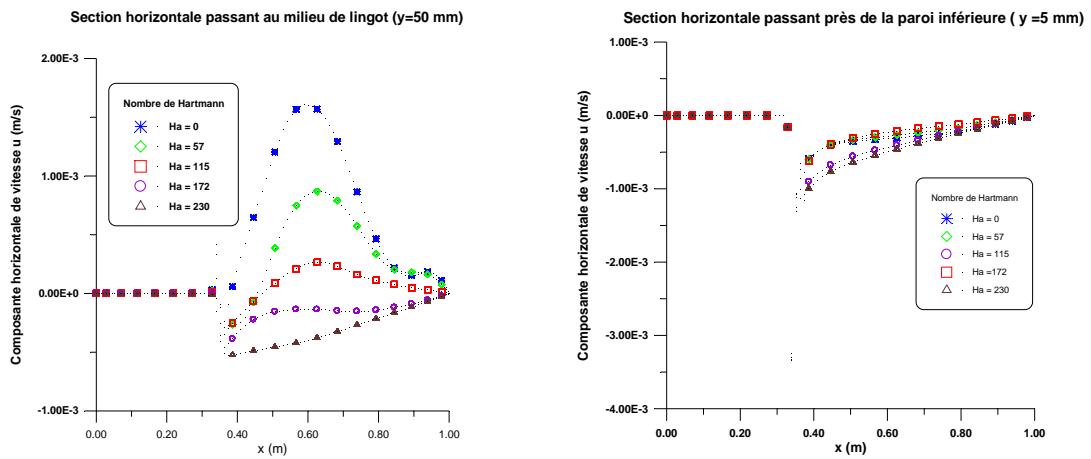
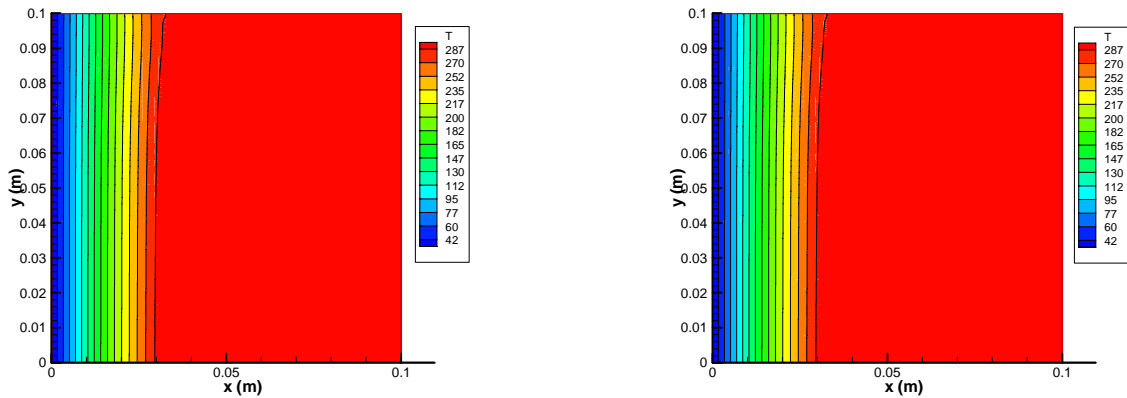
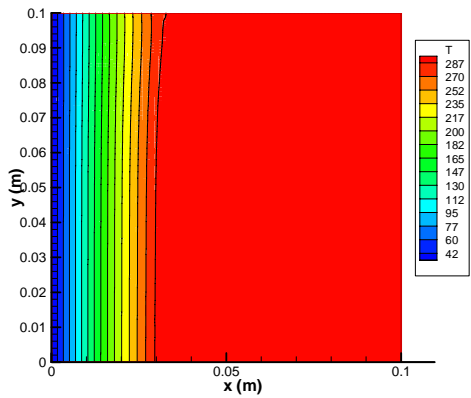


Figure 4.24 : Effet d'un champ magnétique dans la direction horizontale sur la composante horizontale de vitesse lors de solidification.

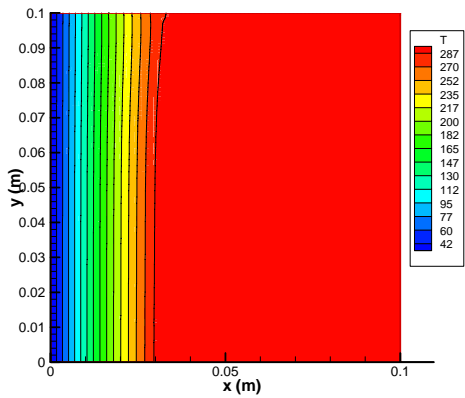


(a) $Ha=0$ ($T_{max}=304,87^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)

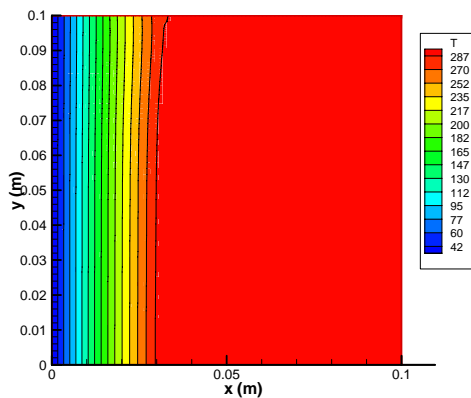
(b) $Ha=57$ ($T_{max}=304,86^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)



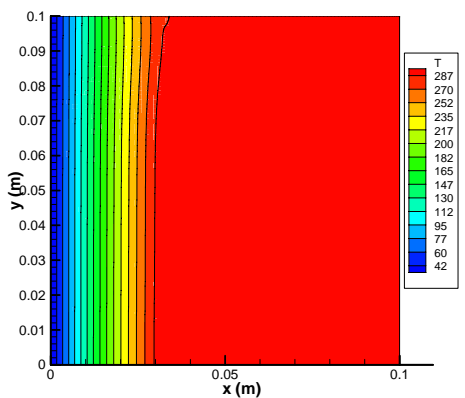
(c) $Ha=115$ ($T_{max}=304,86^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)



(d) $Ha=172$ ($T_{max}=304,86^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)



(e) $Ha=230$ ($T_{max}=304,86^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)



(f) $Ha=460$ ($T_{max}=304,87^{\circ}\text{C}$; $T_{min}=25^{\circ}\text{C}$)

Figure 4.25: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur le champ thermique (à $t = 42$ s de refroidissement). Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées : (a) $Ha=0$; (b) $Ha=57$; (c) $Ha=115$; (d) $Ha=172$; (e) $Ha=230$ et (e) $Ha=460$.

2- Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur le champ thermique (transfert de chaleur convectif)

Sous un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale, de grandeurs ($Ha = 0 ; 57 ; 115 ; 172 ; 230$ et 460 , respectivement), les isothermes (à $t = 42$ secondes de refroidissement) sont présentées sur les figures 4.25 (a-f) respectivement.

Les figures 4.25 (a-f) montrent que les lignes isothermes sont presque verticales, indiquant une conduction horizontale unidimensionnelle dans le solide formé. D'autre part, l'examen de la liste de figures présentées (Figs. 4.25 (a– f)) montre que le champ magnétique appliqué dans la direction horizontale n'a pas d'effet *signifiant* sur le transport de chaleur *convectif*. Ceci est dû à la dominance de la *convection solutale (transport solutal)* dans le système Pb-10%Sn. Ceci est également montré sur la courbe, donnée en Fig.4.26, représentant la distribution de nombre de Nusselt, calculé sur la paroi de gauche de la cavité, en fonction du temps de solidification.

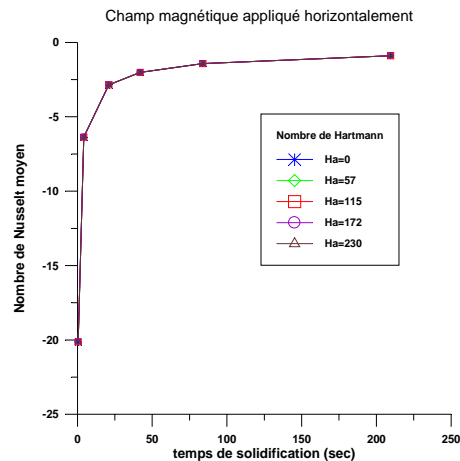


Figure 4.26: Effet d'un champ magnétique, appliqué horizontalement, sur le transfert de chaleur lors de l'évolution de solidification. . Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées : $Ha=0$; $Ha=57$; $Ha=115$; $Ha=172$ et $Ha=230$.

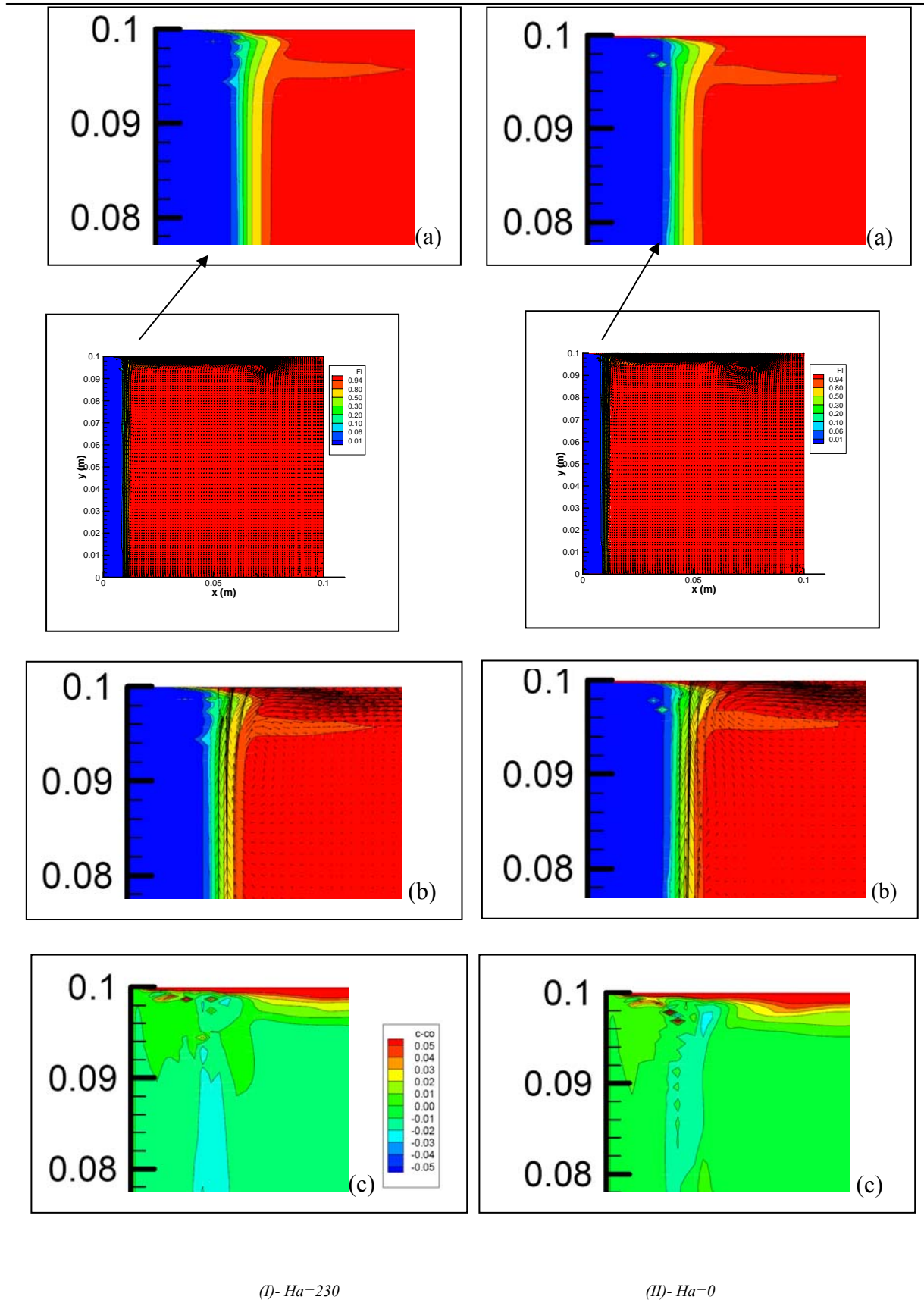


Figure 4.27 : Effet d'un champ magnétique, appliqué horizontalement, ($Ha=230$) sur les contours de fractions massiques, champ de vitesse et sur la ségrégation, obtenus après $t \approx 5$ s de refroidissement.

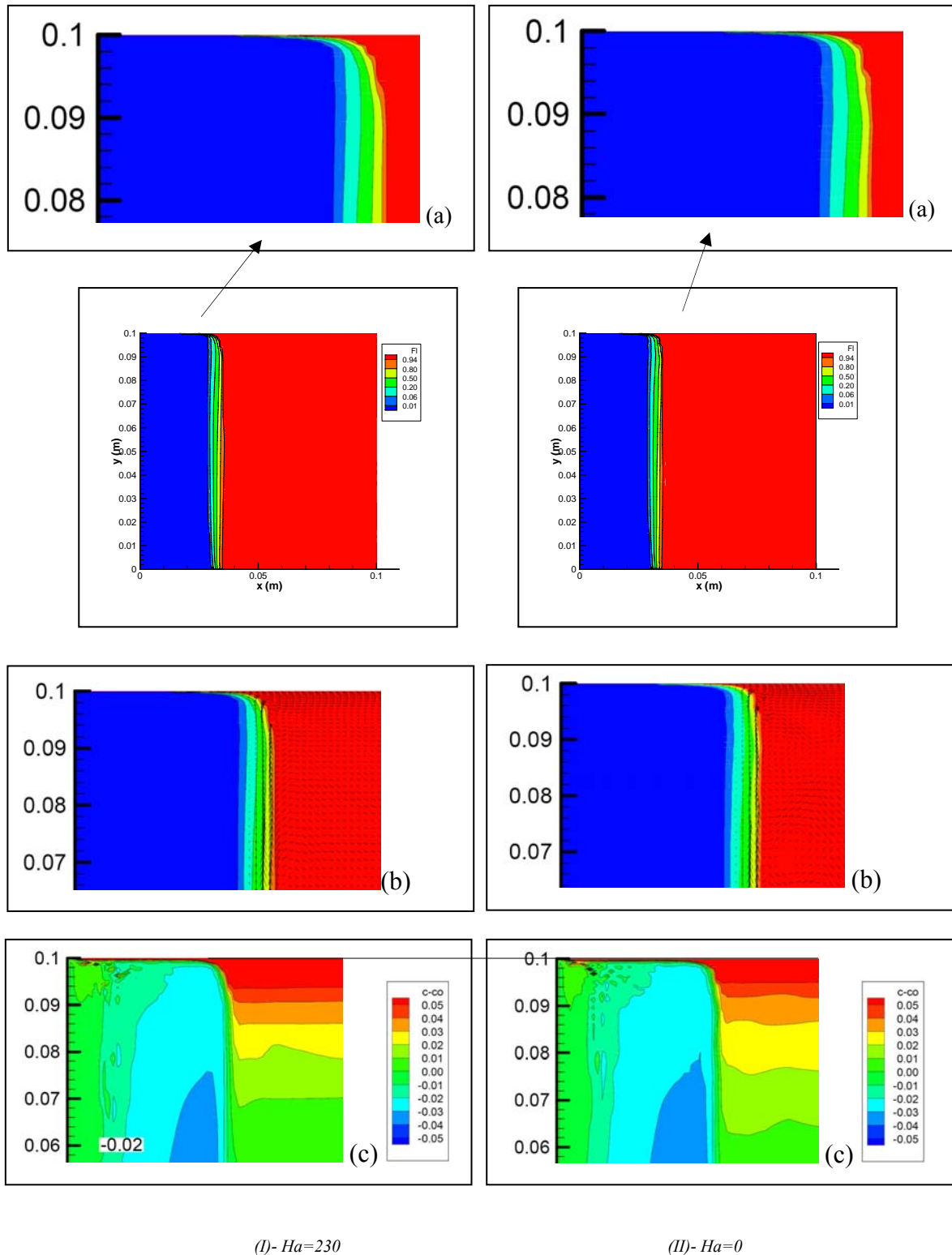


Figure 4.28: Effet d'un champ magnétique, appliqué horizontalement, ($Ha=230$) sur les contours de fractions massiques de liquide, champ de vitesse et sur la ségrégation, obtenus après $t = 42 s$ de refroidissement.

3- Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur le champ des fractions massiques de liquide et ségrégation :

Nous avons illustré que l'application d'un champ magnétique dans la direction horizontale peut réduire les vecteurs de vitesse et peut conduire, ainsi, à un amortissement de turbulence et intensité de l'écoulement dans la zone pâteuse et aussi de la masse liquide, ce qui conduit à une amélioration de l'homogénéité de la microstructure du solide formé.

Pour examiner cet effet, nous allons considérer les contours des fractions massiques de liquide aux temps ($t = 5$ et 42 s de refroidissement, respectivement) obtenus avec un champ appliqué dans la direction horizontale d'intensité ($Ha = 230$) et nous comparons les résultats avec ceux obtenus (aux mêmes temps) pour le cas d'absence de champ ($Ha = 0$). Les résultats sont présentés sur les figures 4.27 et 4.28.

L'observation des contours des lignes iso-fractions de liquide, obtenus à $t = 5$ et 42 secondes, pour les deux cas $Ha = 230$ (Fig.4.27(I) et Fig.4.28(I)) et $Ha = 0$ (Fig.4.27(II) et 4.28(II)) respectivement, indique que :

-le solide est mieux redistribué, dans la région en haut de la cavité et les *poches liquides* (observées à $y \approx 98$ mm dans le cas d'absence de champ (en Fig. 4.27 (II-a)), et qui sont responsables de tâches de ségrégation (*ségrégation positive*), ont *tendances* à se disparaître sous un champ magnétique horizontal (Fig. 4.27 (I-a)). Ceci indique que le phénomène de *refusion* peut être minimisé sous un champ magnétique horizontal.

-D'autre part, les *lignes iso-fractions* de liquide $f_l = 0,20$ et $0,30$ présentent des formes plus *étroites* (dans la région en haut de zone pâteuse), ces formes sont plus *zigzagées* dans le cas où $Ha=0$), indiquant peut être que les *dendrites* s'ouvrent et attirent les fluides interdendritiques, cette *tendance* est peut être observée en zoomant sur les (Figs. 4.27(I-a) et 4.27 (II-a)) et aussi (Figs. 4.28(I-a) et 4.28 (II-a)) pour les deux temps de *refroidissement*, $t = 5$ et 42 s respectivement. Cette tendance conduit peut être à l'effet *guérison* « *healing* » discuté en chapitre 2. En effet, si une *force électromagnétique externe* (de Lorentz) agit sur la région pâteuse où la fraction massique de solide est élevée (par exemple, $f_s = 0,7$ ce qui implique $f_l=0,3$), alors les grains ou les dendrites s'ouvrent souvent et attirent le liquide interdendritique. Ceci est clairement observé en zoomant *davantage* sur les (Fig. 4.27 (I-b) et Fig. 4.27 (II-b)) et aussi (Fig.4.28 (I-b) et Fig.4.28 (II-b)) pour les deux temps (5 et 42 s)

respectivement, représentant les champs des vecteurs vitesses superposés avec les contours des fractions massiques de liquide (f_l).

Généralement les contours de ségrégation observées sur les (Fig. 4.27 (I-c) et Fig.4.27 (II-c)) et aussi (Fig.4.28 (I-c) et Fig.4.28 (II-c)) avec et sans l'application d'un champ magnétique horizontal, pour les deux temps de solidification à $t = 5 s$ et $42 s$, respectivement, montrent que la ségrégation est *moins prononcée* sous un champ magnétique. Cette *tendance* est mieux observée sur la figure 4.29, représentant les distributions de ségrégation sur des sections horizontales passant près de la paroi supérieure de la cavité (à environ $y \approx 95 mm$) et au milieu (à $y = 50 mm$).

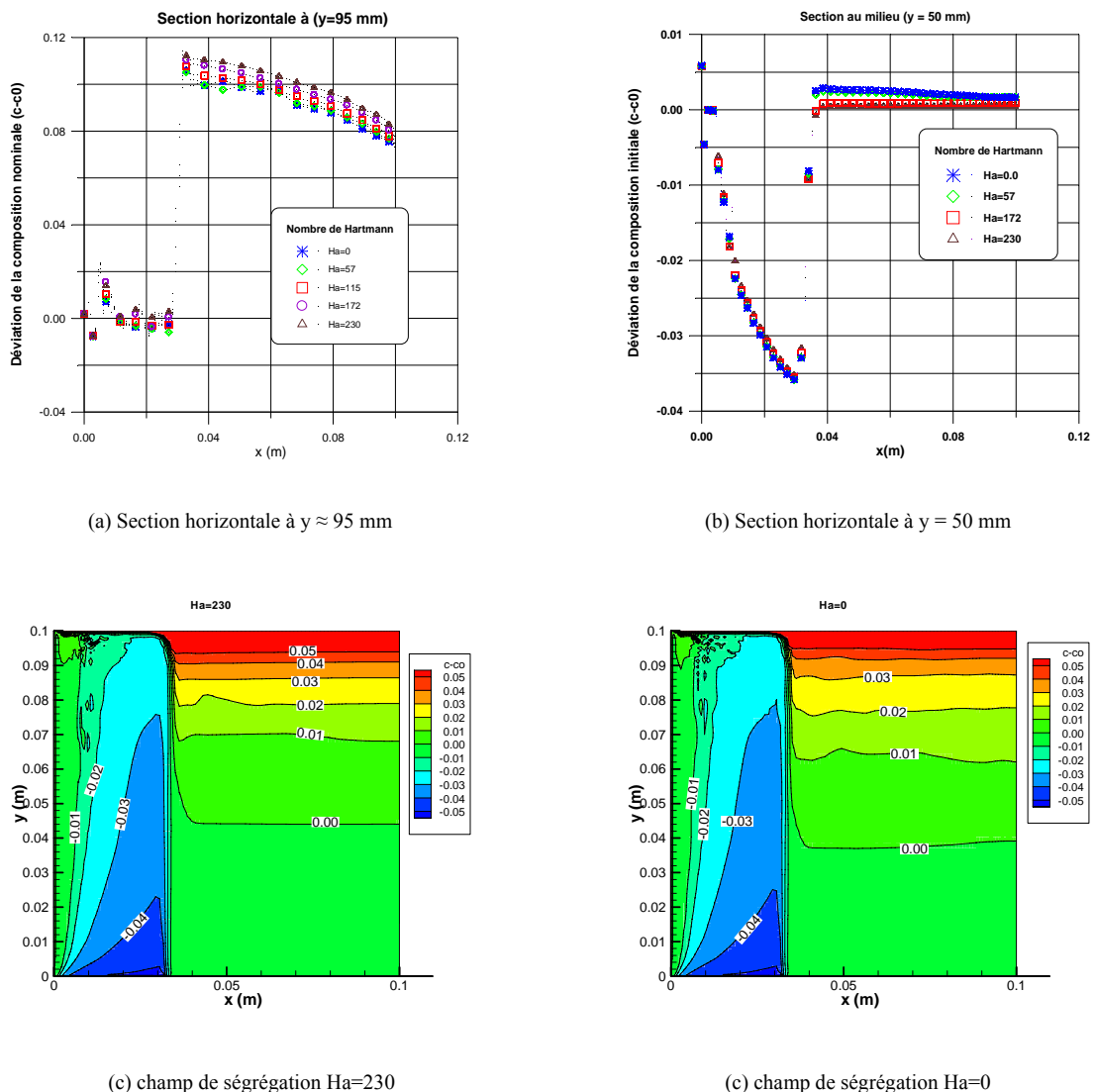
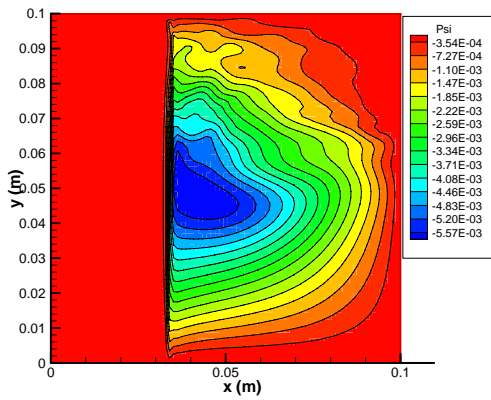
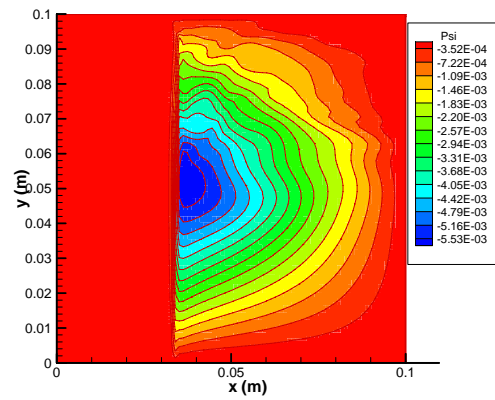


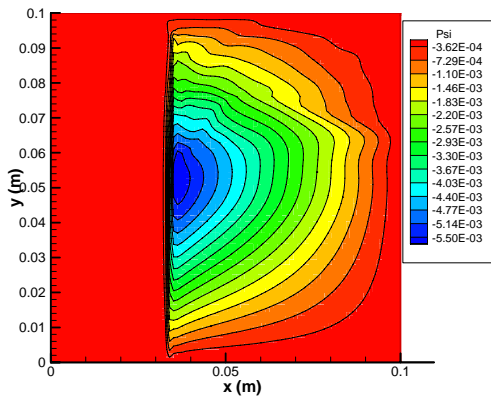
Figure 4.29 : Effet d'un champ magnétique, appliqué dans la direction horizontale ($Ha=0$; $Ha=57$; $Ha=115$; $Ha=172$ et $Ha=230$), sur la distribution de ségrégation sur deux sections horizontales (à $t=42 s$ de refroidissement).



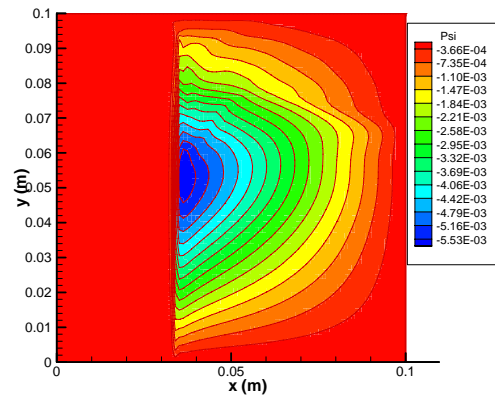
(a) $Ha=0$ ($\psi_{\max} = 1,91 \times 10^{-5}$; $\psi_{\min} = -0,0059478$)



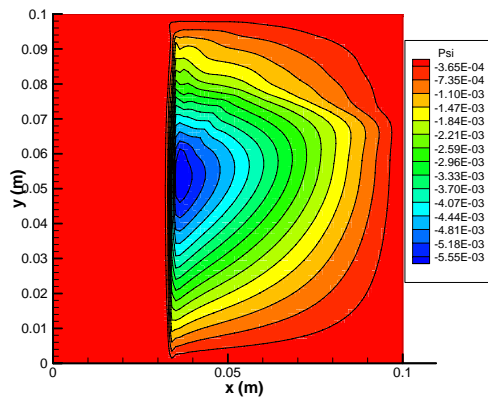
(b) $Ha=57$ ($\psi_{\max} = 1,83 \times 10^{-5}$; $\psi_{\min} = -0,005904$)



(c) $Ha=115$ ($\psi_{\max} = 5,16 \times 10^{-6}$; $\psi_{\min} = -0,0058712$)



(d) $Ha=172$ ($\psi_{\max} = 2,51 \times 10^{-6}$; $\psi_{\min} = -0,005901$)



(e) $Ha=230$ ($\psi_{\max} = 5,13 \times 10^{-6}$; $\psi_{\min} = -0,005915$)

Figure 4.30: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction verticale sur le champ de l'écoulement (à $t=42$ s de refroidissement). Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées :

(a)- $Ha=0$; (b)- $Ha= 57$; (c)- $Ha=115$; (d)- $Ha= 172$ et (e)- $Ha=230$).

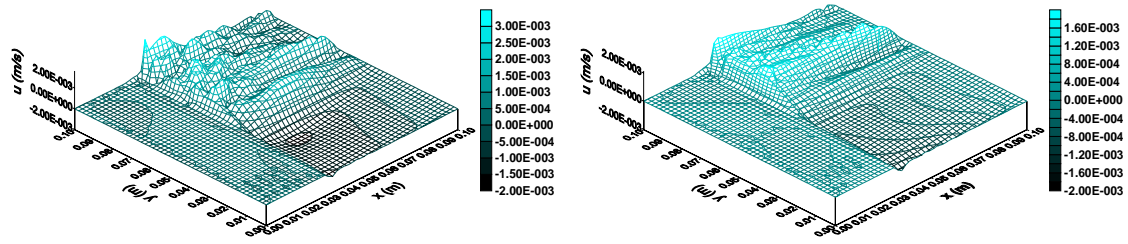
4.5.5.2 **Situation III** : Effet d'un champ magnétique « statique et uniforme » appliqué dans la direction verticale :

Similairement sous un champ magnétique appliqué dans la direction verticale ($\beta = 90^\circ$), de grandeurs $B_0 = 0 ; 0,025 ; 0,05 ; 0,075$ et $0,1$ Tesla, (ce qui implique : $Ha = 0 ; 57 ; 115 ; 172$ et 230 , respectivement), les distributions de fonctions de courant « ψ » (à $t = 42$ secondes de *refroidissement*) sont présentées sur la figure 4.30.

1- Effet du champ magnétique vertical sur le champ de l'écoulement

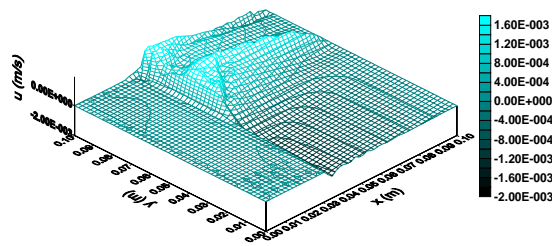
Encore, un écoulement de *recirculation* plus uniforme et plus stable, dirigé par les effets couplés des forces de *Lorentz* et *flottabilité (solutale)*, est observé dans la cavité, (Fig. 4.30 (a-e)). Également, les intensités de vecteurs de vitesses s'affaiblissent *surtout* dans la région de droite en haut de la cavité (phase liquide pur). La valeur maximale, atteinte dans la zone pâteuse, par exemple à $Ha = 115$ est de $28,88 \text{ mm/s}$ ce qui implique un nombre de Reynolds $Re = 1,17 \times 10^4$. Étonnement la valeur du nombre de Reynolds se trouve légèrement supérieure qu'au cas d'absence de champ ($Re = 1,15 \times 10^4$). Une explication possible est peut être observée en examinant les figures 4.31 (I et II). Bien que, pour tous les cas (*sans* ou avec un champ *horizontal* ou *vertical*) la vitesse maximale (strictement verticale) est atteinte dans la zone pâteuse comme montré en Figs. 4.31 (II (a-c)). Cependant, contrairement au champ magnétique *horizontal* (agissant sur la *composante verticale* de la vitesse) le champ magnétique *vertical* agit sur la *composante horizontale* de la vitesse (comme il est montré sur les Figs. 4.31 (I et II)).

Par conséquent, à partir de ces observations, il est clairement indiqué qu'un champ magnétique statique et uniforme appliqué dans la direction *verticale* conduit à la *suppression* de l'écoulement par la réduction des vitesses dans la *région de la masse liquide* (en particulier la composante horizontale (Fig.4.32)), lors du processus d'un changement de phase. Ceci conduit à une meilleure stabilisation de l'écoulement dans la région en haut de la cavité et particulièrement, des champs magnétiques forts conduisent à un écoulement plus stable et plus amorti observé en (Figs. 4.30e).



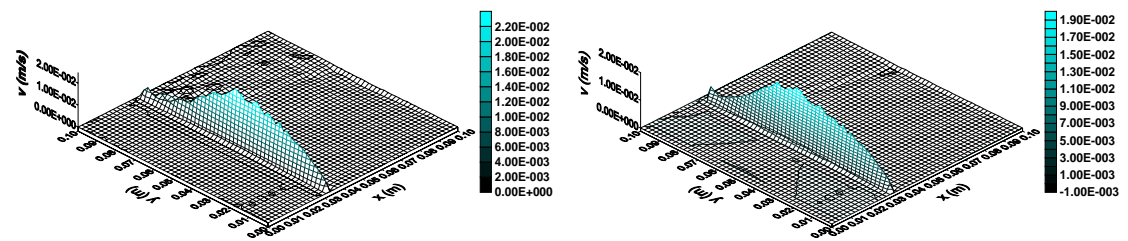
(a) $Ha=0$

(b) champ horizontal $Ha=230$



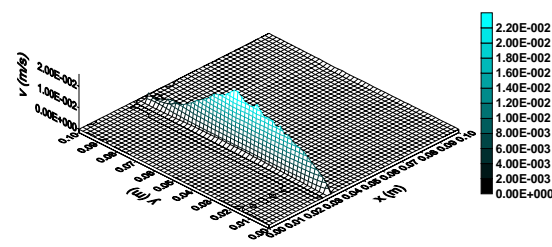
(c) champ vertical $Ha=230$

(I) distribution de la composante horizontale de la vitesse u (m/s)



(a) $Ha=0$

(b) champ horizontal $Ha=230$



(c) champ vertical $Ha=230$

(II) distribution de la composante verticale de la vitesse v (m/s)

Figure 4.31: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction verticale ou horizontale sur la distribution des composantes de la vitesse (à $t = 42$ s de refroidissement).

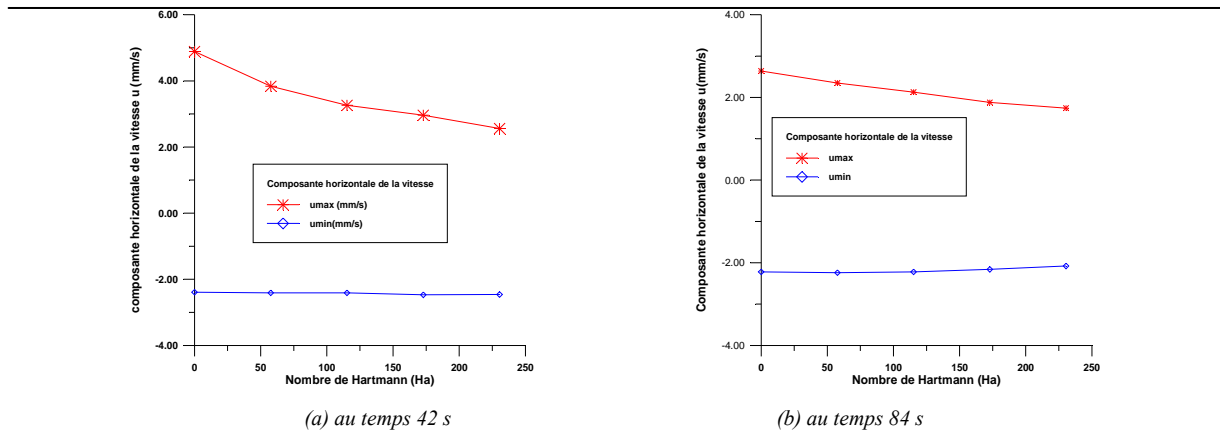


Figure 4.-32 : Effet de la grandeur d'un champ vertical sur les valeurs (maximale et minimale) atteintes de la composante horizontale de vitesse.

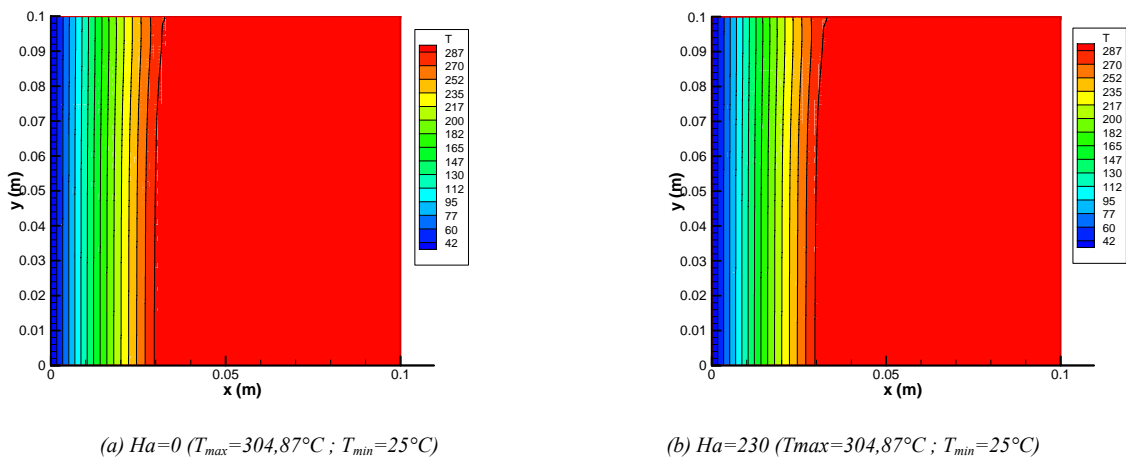


Figure 4.33 : Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction horizontale sur le champ thermique (à $t = 42$ s de refroidissement). (a) $Ha = 0$ et (b) $Ha = 230$.

2- Effet d'un champ magnétique vertical sur le champ thermique (transfert de chaleur convectif)

Également sous un champ magnétique appliqué dans la direction verticale, de grandeur ($Ha = 0 ; 230$ respectivement), les isothermes (à $t = 42$ secondes de refroidissement) sont présentées sur les figures 4.33 (a et b) respectivement. Il est remarqué que les lignes isothermes sont aussi verticales indiquant que la conduction domine le *transfert de chaleur* dans la phase solide et dans ce cas aussi le champ magnétique appliqué dans la direction verticale n'a pas d'effet *significatif* sur le *transport convectif* en raison de la dominance du *transport solutal* dans le système considéré Pb-10%Sn. Également la figure 4.34, représentant

la distribution de nombre de Nusselt, calculé sur la paroi de gauche de la cavité, lors du processus de changement de phase, montre cette *tendance*.

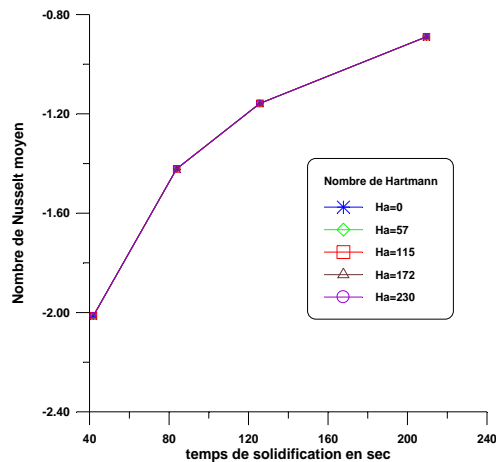


Figure 4.34 : Effet d'un champ magnétique vertical sur le *transfert de chaleur* lors de l'évolution de solidification. Les grandeurs suivantes pour le champ : ($Ha=0$; $Ha=57$; $Ha=115$; $Ha=172$ et $Ha=230$) sont considérées.

3- Effet d'un champ magnétique vertical sur le champ des fractions massiques de liquide et ségrégation :

Dans le but d'examiner la manière dans laquelle un *champ magnétique vertical* agit sur la *région pâteuse*, nous allons présenter les contours des *fractions massiques* de liquide aux temps ($t = 5$ et 42 s de refroidissement, respectivement) obtenus avec un champ vertical appliqué d'intensité ($Ha = 230$) et en suite nous comparons les résultats avec ceux obtenus (aux mêmes temps) pour le cas d'absence de champ ($Ha = 0$). Les résultats sont présentés sur les figures 4.35 et 4.36.

L'examen des lignes *iso-fractions* de liquide, obtenus à $t = 5$ seconde, pour les deux cas $Ha = 230$ (Fig.4.35 (I- a)) et $Ha = 0$ (Fig.4.35 (II- a)) respectivement, indique que :

-il semble que le champ magnétique vertical conduit à l'apparition des *grains solides* dans la *phase liquide* comme ceux observés sur la figure 4.35 (II- a). En effet, comme nous avons illustré par la remarque 2.5 (chapitre 2) « le *brassage électromagnétique* est parmi les méthodes utilisées pour former des *grains équiaxes* et pour obtenir une distribution solide uniforme et dense ». Par conséquent, le *champ magnétique vertical* peut être effective dans la *diminution* de la *ségrégation de type canal*. Cette tendance est peut être constatée en

observant les distributions de couches stratifiées de soluté, formées en haut de la cavité, (en particulier les iso-lignes $(f^{Sn} - f_0^{Sn})=0,05 ; 0,04 ; 0,03$ et $0,02$ pds%) qui sont plus lisses et uniformes dans le cas d'un champ vertical (Fig. 4.35 (I- c)) que dans le cas ($Ha=0$) (Fig. 4.35 (II- c)). Cependant, cette tendance est *moins prononcée* dans le cas d'un champ *horizontal* (Fig. 4.27 (I- c)). Ce qui indique clairement l'effet d'amortissement (*stabilisant*) du champ sur la *composante horizontale* de vitesse dans cette région.

Généralement les contours de ségrégation observées sur les (Fig. 4.35 (I-c) et Fig.4.35 (II- c)) et aussi (Fig.4.36 (I-c) et Fig.4.36 (II-c)) avec et sans l'application d'un champ magnétique vertical, pour les deux temps de solidification à $t = 5$ s et 42 s, respectivement, montrent que la ségrégation est *moins prononcée* sous un champ magnétique vertical.

En outre, il est remarqué, contrairement au champ horizontal, le champ vertical conduit à une *ségrégation négative* plus *prononcée* (en comparant les Fig.4.36 (I-c) et Fig. 4.28 (I-c)). Ceci est une évidence puisque nous avons illustré qu'un champ magnétique vertical agit sur la composante horizontale de vitesse et moins sur la *composante verticale* qui domine la zone pâteuse (lieu de formation de ségrégation négative (Fig.4.37 et Fig. 4.29)).

4.5.5.3 Comparaison entre un champ magnétique horizontal et vertical

L'effet d'un champ horizontal ou vertical de grandeur ($Ha = 230$) à 125 secondes de refroidissement est montré :

-sur le champ de l'écoulement en figure 4.38. Le champ d'écoulement est plus stable avec un champ vertical (voir aussi Fig.4.38b).

-sur la ségrégation en figure 4.39, et, il se peut être observé que, comme la direction du champ magnétique statique change d'une direction l'horizontal à verticale, le taux de ségrégation négative.

4.5.5.4 Discussions de champs magnétiques

En réalité, le processus d'interaction entre un *champ magnétique* et le semi-conducteur fondu Pb-10%Sn (qui est *conducteur électrique*) implique que « *des courants électriques* »

sont générés par le mouvement *convectif* de la charge électrique produite en présence d'un champ magnétique. Cet écoulement (*courant électrique*) crée une *force de Lorentz* opposée diminuant, ainsi, la *vitesse de l'écoulement des fluides interdendritiques (cas d'un champ horizontal) et de masse liquide (cas d'un champ vertical)*. En effet, l'amortissement de la convection par les champs magnétiques est similaire à une augmentation de la viscosité du liquide. Celle-ci a donnée une hausse au terme de « *viscosité magnétique* » qui est analogue à la viscosité cinématique et est usuellement désigné par : (l'équation 2.42) : $\nu_{magnétique} = \sigma_e \mu_0$ où μ_0 est la perméabilité (*magnétique*) du fluide.

Résultat : Par conséquent, à partir de ces observations, il est confirmé que

-l'effet de la direction du champ magnétique statique sur l'écoulement, température et la distribution de soluté sont montrées. Le champ magnétique statique et uniforme conduit à la *suppression* de l'écoulement par la réduction des vecteurs de vitesses ceci est en bon agrément avec la discussion en (chapitre 1).

- L'intensité du champ magnétique a un effet significatif sur les champs de l'écoulement, température et soluté (ségrégation). Particulièrement, des champs magnétiques forts conduisent à un écoulement plus stable.

Par conséquent, l'utilité des champs magnétiques appliqués dans la croissance *cristalline* à partir d'une *fonte* est identifiée et démontrée, par le modèle présenté.

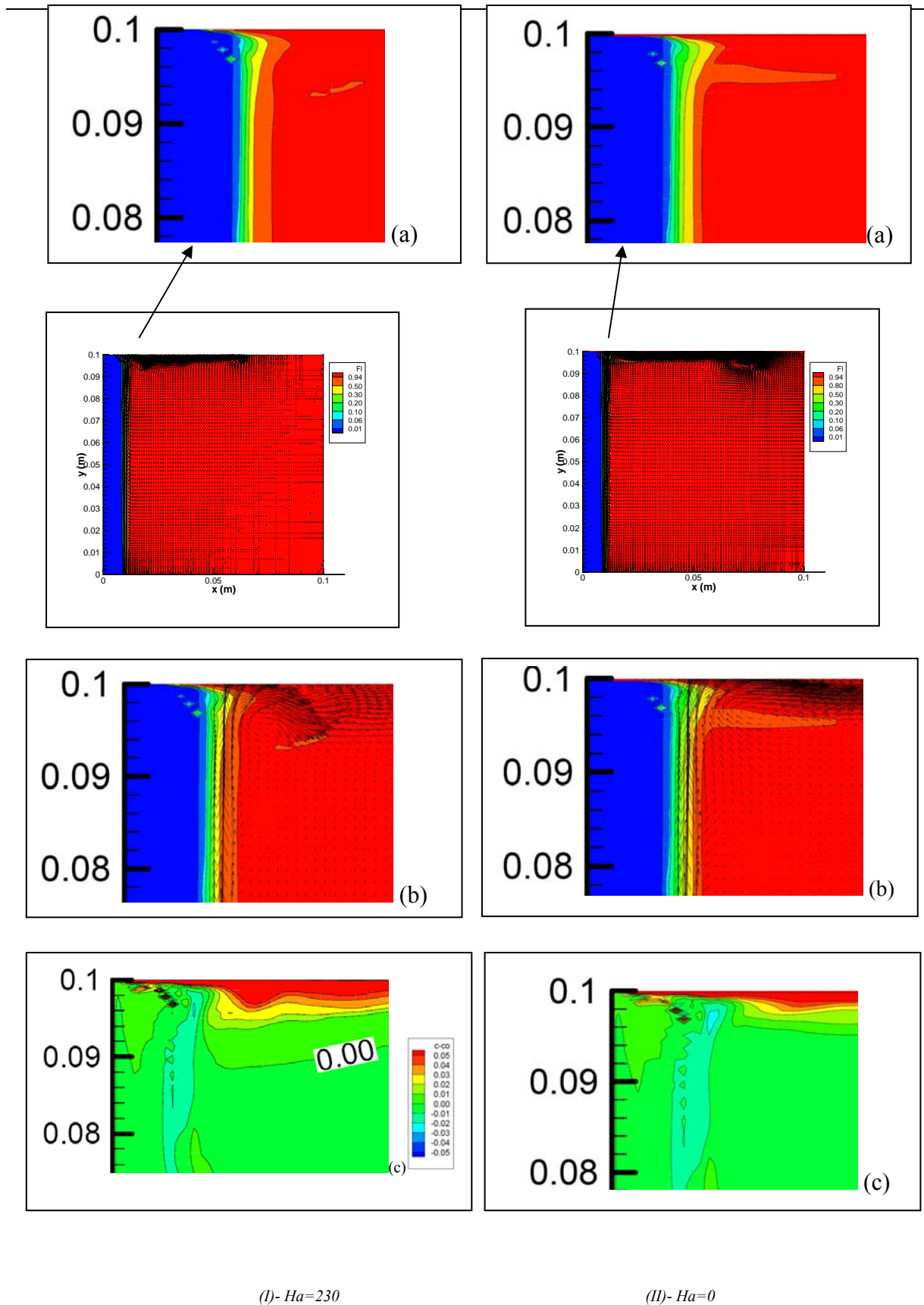
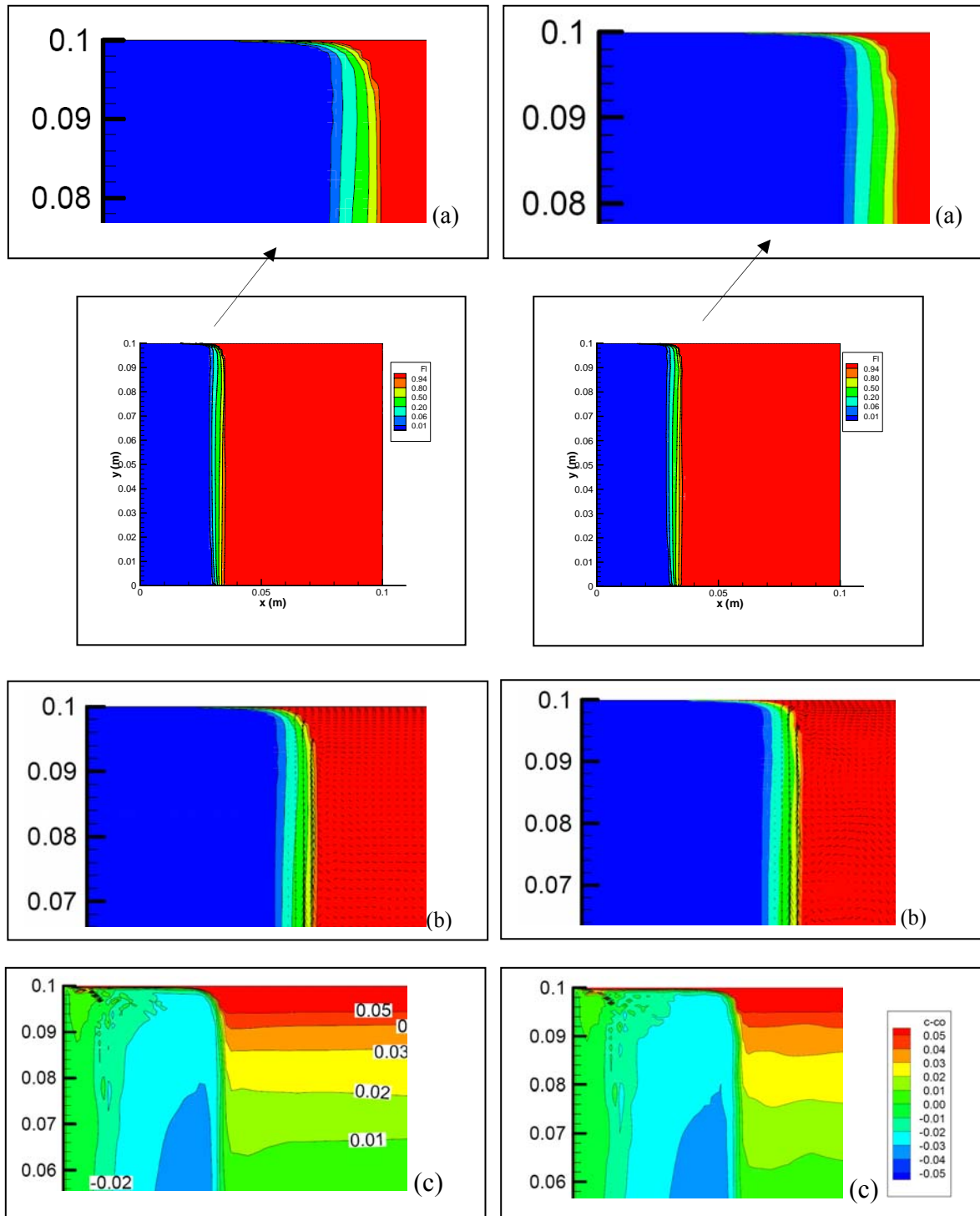


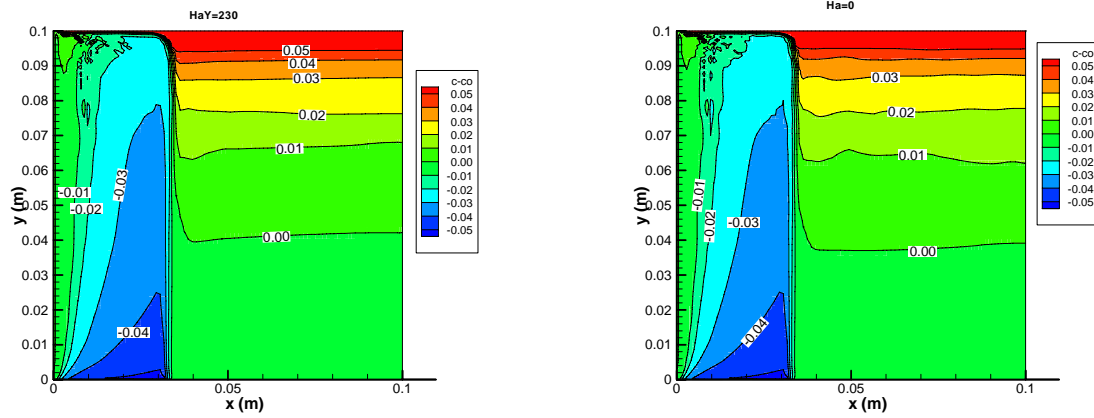
Figure 4.35 : Effet d'un champ magnétique vertical ($Ha=230$) sur les contours de fractions massiques de liquide, obtenus après $t \approx 5$ s de refroidissement.



(a)- $Ha=230$

(b)- $Ha=0$

Figure 4.36 : Effet d'un champ magnétique vertical ($Ha=230$) sur les contours de fractions massiques de liquide et champs de vitesse, obtenus après $t = 42 s$ de refroidissement.

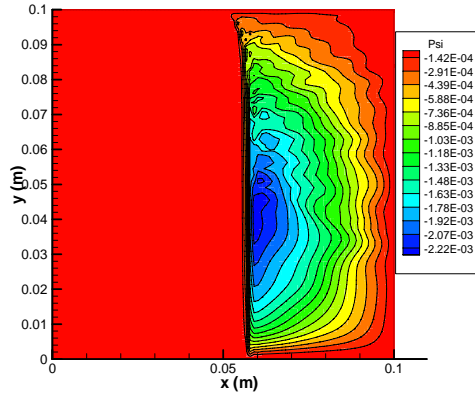


(c) champ de ségrégation $Ha=230$

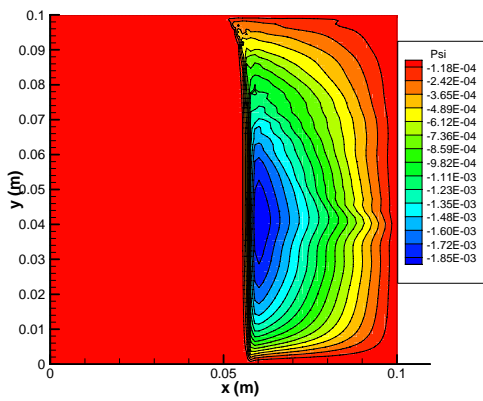
(c) champ de ségrégation $Ha=0$

Figure 4.37: Effet d'un champ magnétique appliqué dans la direction verticale sur le champ de ségrégation (à $t= 42 s$ de refroidissement). Les grandeurs suivantes pour le champ sont appliquées :

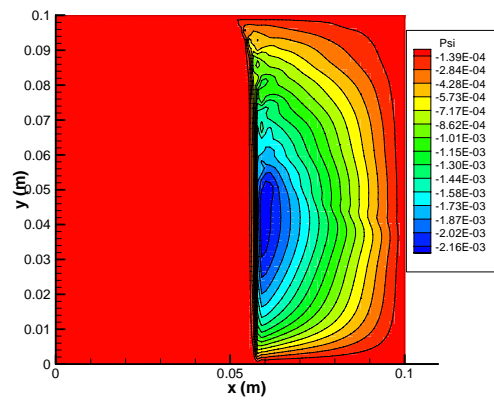
$Ha=230$).



(a) $Ha=0$

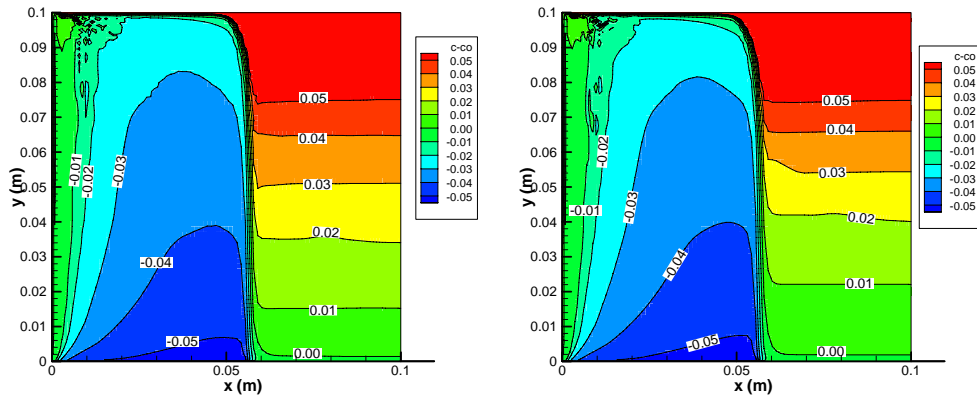


(a) $Ha=230$ (dans la direction horizontale)



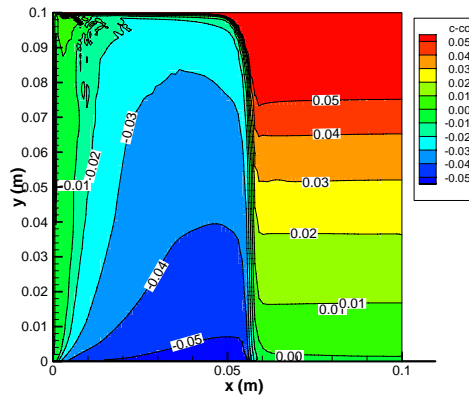
(b) $Ha=230$ (dans la direction verticale)

Figure 4.38: Effet d'un champ magnétique de grandeur ($Ha=230$) appliqué dans la direction (b) horizontale ou (c) verticale sur le champ de l'écoulement après $t=125$ s de refroidissement.



Ha=0

Ha=230 dans la direction horizontale



Ha=230 dans la direction verticale

Figure 4.39 : Effet d'un champ magnétique de grandeur ($Ha=230$) appliqué dans la direction (b) horizontale ou (c) verticale sur la distribution de ségrégation (à $t=125$ s de refroidissement).

4.6 Résultats numériques de macroségrégation et validation du modèle présenté

La macroségrégation résultante à partir de la solidification d'un lingot parallélépipède des alliages *Sn-5%Pb* et *Pb-48%Sn* a été examinée expérimentalement par [Hebditch & Hunt \[1974\]](#). Ce test a servi déjà comme un cas test pour évaluer des codes de calcul [[Ahmad et al. \(1998\)](#) ; [Kämpfer \(2002\)](#) et [Weitao \(2005\)](#)]. Nous avons aussi adopté ce test pour valider le modèle présenté. Une *confrontation* avec des résultats *expérimentaux* et *numériques* (obtenus par ces codes en volumes et éléments finis) a été effectuée. Nous devons présenter ces résultats dans les sections ci-dessous. En outre, la capacité du code développé pour modéliser les phénomènes de *canaux ségrévés*, en utilisant des tailles fines de maillage doit être démontrée.

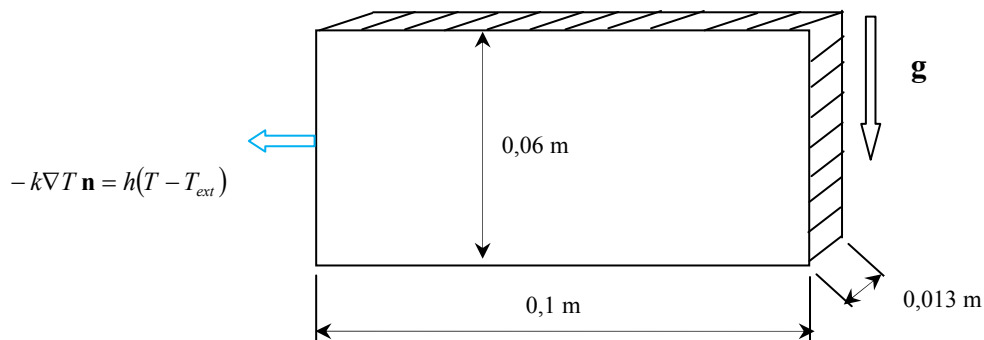


Figure 4.40 : Géométrie du cas test [Hebditch & Hunt \(1974\)](#) : le dispositif est pseudo -2D et peut être représenté par une cavité rectangulaire de taille (0,1 x 0,06 m²), qui est remplie avec un alliage liquide. Le long de la paroi de gauche, la chaleur est extraite (*refroidissement*), alors que les autres frontières sont isolées [[Ahmad et al 1998](#) ; [Kämpfer \(2002\)](#) et [Weitao \(2005\)](#)].

4.6.1 Le cas test de Hebditch & Hunt, (les alliages Sn-5%Pb et Pb-48%Sn)

[Hebditch and Hunt \[1974\]](#) ont solidifié un alliage *Sn-5%Pb* et un alliage *Pb-48%Sn* dans une cavité parallélépipédique de hauteur 0,06 m, longueur 0,1 m et épaisseur 0,013 m. La cavité étant insolée sur toutes les surfaces excepter la surface latérale mince (celle de gauche). La chaleur est extraite seulement à partir de cette surface comme il est montré sur la figure

4.40. Après la solidification, ils ont mesuré les macroségrégations par une *spectrophotométrie*. Si nous assumons que l'écoulement de fluide dans la section du *mi-plan* le plus large n'est pas influencé par les deux parois parallèles de la cavité, la situation peut être considérée à être un problème 2-D.

La macroségrégation, dans *le mi-plan* le plus large, a été simulée par : [Ahmad et al. \[1998\]](#) en utilisant le code en éléments finis « *CALCOSOFT* » développé à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne et le code en volumes finis « *SOLID* » développé à l'Ecole des Mines de Nancy ; [Kämpfer \(2002\)](#) en utilisant une version améliorée du code « *CALCOSOFT* » et [Weitao \(2005\)](#) en utilisant le code en éléments finis « *R2SOL* » développé à l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne et le code *SOLID*. Les données thermophysiques et paramètres utilisés dans le calcul présenté sont ceux utilisés par ces chercheurs et sont données en tableaux (4.3 et 4.5).

Les conditions aux limites (illustrées en figure 4.40) sont données telles que :

Pour l'analyse thermique (*transport thermique*) : une condition de Fourier (un *flux imposé*) est appliquée à la paroi de gauche, les conditions *adiabatiques* sont imposées sur les autres parois. Le champ initial de température est assumé à être uniforme, soit $T_{init} \approx T_{liq}$. Pour l'analyse de *transport de soluté*, il n'y a pas d'échange de soluté à travers les parois et le champ initial de concentration est supposé homogène, ($f^{\alpha} = f_0^{\alpha}$). La vitesse initiale est zéro et une condition de *non-glissement* sont appliquées pour l'analyse de *transport de quantité de mouvement*.

Remarque 4.9. Il faut noter que :

1- Les temps de solidification et champs thermiques ne sont pas précisément rapportés dans l'article de [Hebditch & Hunt, \(1974\)](#), excepter la température initiale (étant très proche de la température liquidus $T_{init} \approx T_{liq}$). Le mauvais choix de telle condition peut influencer largement les résultats numériques calculés. Quelques figures montrant l'avancement du *front* de solidification ont été présentées et qui ont été obtenues par *refroidissement* des lingots à différents temps. Basé sur l'avancement du front de solidification, les conditions de *refroidissement* (le coefficient d'échange de chaleur h et la température externe T_{ext} donnés en tableaux 4.3 et 4.5) ont été estimées par [Ahmad et al. \[1998\]](#) et utilisées dans les travaux de

[Ahmad et al 1998; Kämpfer (2002) et Weitao (2005)]. Nous adoptons ces conditions dans la présente étude.

2- Dans les travaux par [Ahmad et al. 1998; Kämpfer (2002) et Weitao (2005)], la relation de Kozeny-Carman (4.1) a été utilisée pour calculer la *perméabilité* de la zone pâteuse. Une valeur constante de λ_2 (en tableaux 4.3 et 4.5) a été utilisée pour s'adapter aux résultats expérimentaux de *ségrégation*, cette valeur, estimée (Ahmad et al. 1998), est utilisée dans le travail présenté. En outre, la *microségrégation* est calculée, ici, par le même modèle utilisé par Ahmad et al. 1998; Kämpfer (2002) et Weitao (2005) celui de *bras de levier* (voir chapitre 2).

3- En revanche, il faut souligner que la solidification est modélisée par des approches mathématiques complètement différentes (c'est-à-dire des équations différentielles). Dans les travaux par [Ahmad et al 1998; Kämpfer (2002) et Weitao (2005)], l'approche due à Ni & Beckermann (1991) pour modéliser la solidification et ségrégation associée, a été utilisée. Alors que, dans le travail présenté le modèle mathématique de solidification étant basé sur l'approche continue (illustré en chapitre 3).

Résultats de convection thermosolutale pour les deux alliages

Nous présentons ici un résumé sur le comportement *convectif (thermosolutal)* dans les deux cas d'alliage :

Dans les tests numériques entrepris ici, il est identifié que les gradients horizontaux de température et concentration de soluté dans le liquide s'accumulent près de la paroi froide aux premières étapes de solidification pour les deux alliages (Sn-5 pds % Pb et Pb-48 pds % Sn). Ces deux gradients conduisent à un gradient horizontal de la masse volumique du liquide et comme la gravité est perpendiculaire à ces gradients, l'écoulement fluide, dirigé par la convection naturelle (les deux thermique et solutale), apparaisse dès le début de *refroidissement*. Par conséquent, la convection naturelle *thermosolutale*, dirigée *thermiquement* et *solutalement*, se produit dans la cavité. Il faut noter que les convections naturelles qui se produisent dans l'alliage *Sn-5%Pb* et l'alliage *Pb-48%Sn* sont différentes comme il est montré en Fig. 4.8.

Depuis que le coefficient de partage du soluté des deux alliages est < 1 , le liquide interdendritique devient riche en soluté dans les deux cas comme la solidification se procède, c'est à dire comme la température s'affaiblie :

-Pour l'**alliage riche en étain** (Sn-5%Pb), Fig.4.8a, le liquide interdendritique s'enrichi en plomb (Pb) devient lourd. La combinaison avec l'effet de température, l'écoulement de fluide est dans la direction contraire des aiguilles d'une montre.

-Pour l'alliage riche en plomb (Pb-48%Sn Fig.4.8b), cependant, le liquide interdendritique est enrichi en Sn, les effets de soluté et température sur la masse volumique de liquide sont opposés, mais la convection induite *solutalement* est largement dominante et dans ce cas un *vortex* dans la direction des aiguilles d'une montre s'est formé. Notons que l'alliage Pb-48 pds% Sn (tableau 4.5) possède un comportement proche, en termes de la *dominance* de la *convection solutale*, de celui de l'alliage Pb- 10%Sn étudié précédemment.

Remarque 4.10. Notons que, les nombres de Grashof ($Gr_c = g \beta_c \Delta C L^3 / \nu^2 \approx 4,96 \times 10^8$ et $Gr_c = g \beta_c \Delta C L^3 / \nu^2 \approx -1,3 \times 10^9$ pour l'alliage Pb-48%Sn et Sn-5%Pb, respectivement) sont de l'ordre de $\approx 10^9$, ce qui résulte en un écoulement de *convection solutale* assez fort.

4.6.2 Résultats pour l'alliage Sn-5%Pb

4.6.2.1 Investigations numériques précédentes

[Ahmad et al. \(1998\)](#) ont calculé la solidification de l'alliage *Sn- 5%Pb* en utilisant les codes « *CALCOSOFT* » et « *SOLID* ». Les équations, gouvernant la solidification, utilisées ont été exactement les mêmes que celles utilisées par [Weitoa \(2005\)](#) et [Kämpfer \(2002\)](#). La règle de *bras de levier* a été considérée, en outre, comme étant le modèle de *microségrégation*. Les contours de macroségrégation à 400 s sont montrés en figure 4.41 (I) ([Ahmad et al. \(1998\)](#)). Le résultat de calcul de « *SOLID (volumes finis)* », comme il est montré en Fig. 4.41 (I-a), prédit l'*oscillation* de concentration moyenne dans la région de milieu du lingot, indiquant la *tendance* à former les *canaux ségrégés* dans cette région. Alors que « *CALCOSOFT (éléments finis)* » prédit l'*oscillation* seulement à la paroi inférieure du lingot comme il est montré en Fig. 4.41 (I-b) [[Ahmad et al. \(1998\)](#)].

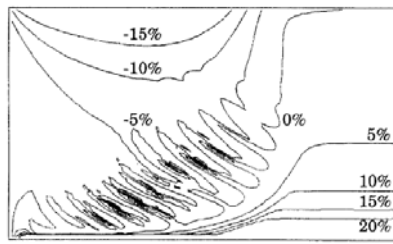
Kämpfer [2002] a répété le calcul en utilisant une version améliorée de CALCOSOFT avec raffinement de maillage. Le contour de ségrégation obtenu est similaire au contour montré en Fig. 4.41 (a), les *canaux ségrégés* ont été prédits le long de la paroi du bas. Bien qu'un agreement global à la prédiction de macroségrégation ait été achevé par les deux codes, CALCOSOFT et SOLID, cependant, il y a des différences dans les résultats. Ces différences peuvent être attribuées essentiellement au type et à la résolution de maillages utilisés. Car il faut souligner que les modèles mathématique et de perméabilité étant les mêmes (remarque 4.9). Les principaux résultats de cette étude sont résumés sur la figure 4.41 (II).

Weitao (2005) a réalisé des simulations numériques de macroségrégation pour cet alliage avec les codes « R2SOL » et « SOLID », en utilisant les mêmes paramètres thermophysiques comme celles présentées en tableaux 4.3-4.6. Les principaux résultats de cette étude sont résumés sur la figure 4.41 (III).

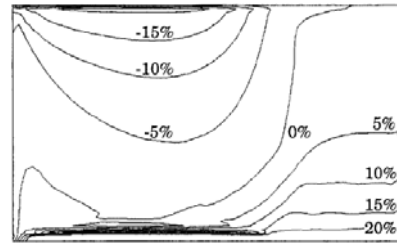
Travail présenté : En suivant les travaux et démarches de [Ahmad el al. (1998) ; Kämpfer (2002) et Weitao (2005)], nous avons réalisé des simulations numériques de *macroségrégation* pour cet alliage avec notre code (*en volumes finis*), en utilisant les mêmes paramètres thermophysiques comme présentés en tableaux (4.3–4.6). Néanmoins, il faut rappeler que le modèle mathématique de solidification, utilisé ici, n'est pas le même que celui utilisé par ces investigations (remarque 4.9).

Les objectifs des tests numériques, entrepris ici, sont les suivants :

1- Pour étudier l'influence de la taille de maillage : Dans ce test, des maillages *non-uniformes* sont utilisés, les tailles de maillage sont données en tableau 4.8. Leurs choix est basé sur les l'analyse précédente *de stabilité* pour le cas du système *Pb -10% Sn*. Le *pas de temps* choisi est de *0,01 s*. Les calculs ont été réalisés en *couplage-complet* avec itérations. Les critères pour terminer les itérations, dans le cas de cet alliage *Sn - 5%Pb*, sont donnés aussi comme suit : $\left| \frac{(U^{(n+1)} - U^{(n)})}{U^{(n)}} \right| \leq 10^{-4}$; $\left| \frac{(V^{(n+1)} - V^{(n)})}{V^{(n)}} \right| \leq 10^{-4}$; $\left| \frac{(T^{(n+1)} - T^{(n)})}{T^{(n)}} \right| \leq 10^{-4}$ et $\left| \frac{(C^{(n+1)} - C^{(n)})}{C^{(n)}} \right| \leq 10^{-4}$ pour la résolution des équations de conservation de quantité de mouvement (dans les directions x et y), énergie et soluté (avec n désigne le nombre d'itération). Le nombre des itérations adopté est de 20.

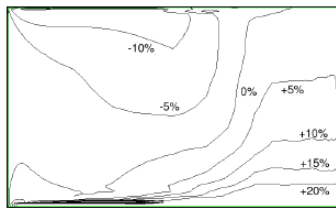


(a) SOLID (en volumes finis)

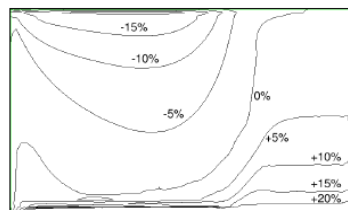


(a) CALCOSOFT (en éléments finis)

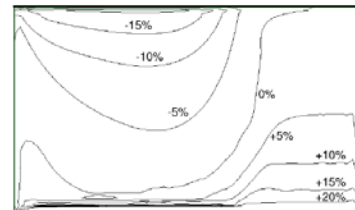
(I) : Résultats par les codes (a) SOLID et (b) CALCOSOFT (Figures tirées de la réf. Ahmad et al. (1998)).



Maillage 40x24

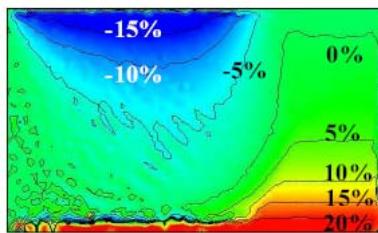


Maillage 60x60

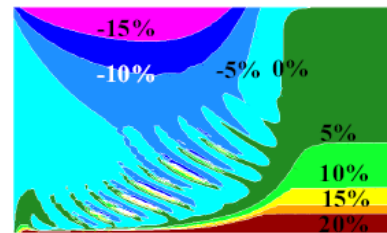


Maillage 80x48

(II) : Résultats par le code « CALCOSOFT » en utilisant différents maillages (figures tirées de la référence Kämpfer (2002)).



(a) R2SOL (en éléments finis)



(b) SOLID (en volumes finis)

(III) : Résultats par les codes (a)-« R2SOL » et (b)-« SOLID » (figures tirées de la référence Weitaö (2005)).

Figure 4.41: Résultats numériques de calculs de macroségrégation (en terme de la variation relative de la concentration moyenne « $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ » obtenus pour l'alliage Sn-5%Pb à $t = 400$ s par différentes investigations.

Les tailles de maillage suivantes sont définies :

- **Maillage uniforme** : La taille de maillage uniforme est de (100 x 100).
- **Maillage Grossier (A)** : La taille de maillage grossier est de (60x60).
- **Maillage standard (B)** : La taille de maillage standard est de (100x100).
- **Maillage fin (C)** : La taille de maillage fin est de (120x120).

- **Maillage fin (D) :** La taille de maillage le **plus** fin est de (140x140).

Il faut noter qu'à l'exception du maillage uniforme, tous les maillages adoptés (tableau 4.9) sont utilisés avec un *raffinement local*, près des parois supérieure et inférieure (aussi celles de droite et gauche) du domaine (un facteur de *raffinement* de 1,2 dans les directions x et y respectivement est appliqué). Par conséquent des mailles fines sont utilisées dans ces régions.

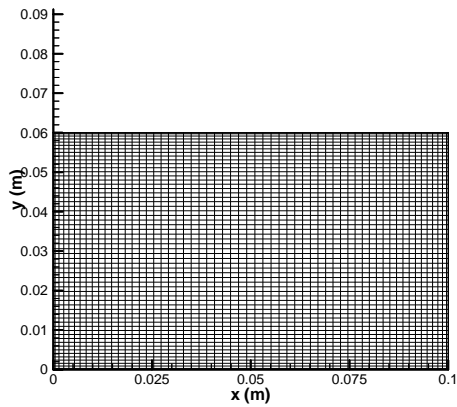
2. Pour étudier l'influence du pas de temps : À côté du pas de temps standard (0,01 s), un large et un petit pas de temps, soient (0,014 s) et (0,005 s), sont utilisés et leur choix est basé, sur la précision de la solution numérique et le coût en temps de calcul (le choix de petit pas de temps induit un temps de calcul *extrêmement* important). Dans ce test numérique, le maillage standard fixé (maillage - B) est adopté.

Tableau 4.8. Tailles de maillage et pas de temps utilisés dans les calculs de l'alliage Sn- 5% Pb (la taille de pas de temps est de $\Delta t = 0,01$ s)

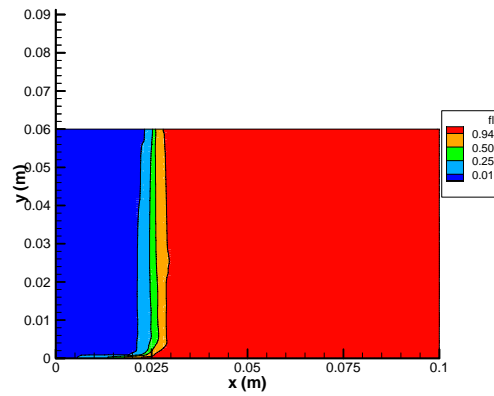
Type de maillage	Taille de maillage
Maillage uniforme	100x100 (maillage uniforme)
Maillage A (grossier)	60x60 (maillage raffiné avec un facteur de 1,2 dans les directions x et y)
Maillage B (standard)	100x100 (maillage raffiné avec un facteur de 1,2 dans les directions x et y)
Maillage C (fin)	120x120 (maillage raffiné avec un facteur de 1,2 dans les directions x et y)
Maillage D (plus fin)	140x140 (maillage raffiné avec un facteur de 1,2 dans les directions x et y)

3- Pour étudier l'influence des itérations de couplage dans chaque pas de temps. Dans ce test, le maillage fixé standard (maillage - B) et le pas de temps standard de 0,01 s sont utilisés. Ici, nous comparons les résultats obtenus avec 20 itérations et une seule itération.

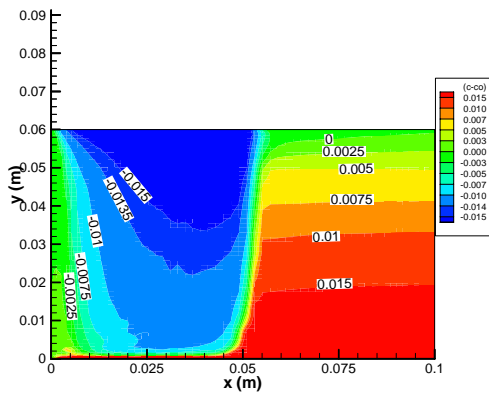
Dans un premier pas, nous allons présenter les résultats obtenus par les différents tests numériques (sections 4.6.2.2 à 4.6.2.7) ci-après. Dans un second pas, nous devons discuter ces résultats en section 4.6.2.8.



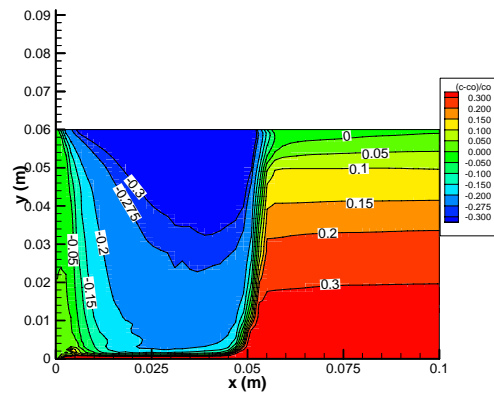
Maillage



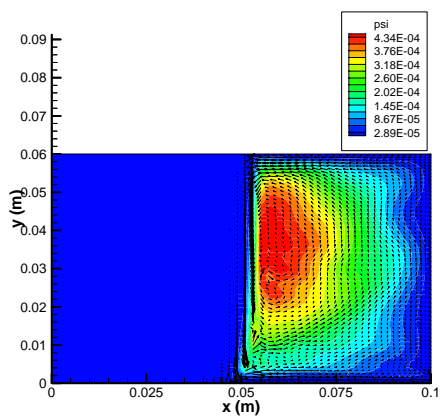
fraction massique de liquide à 100s



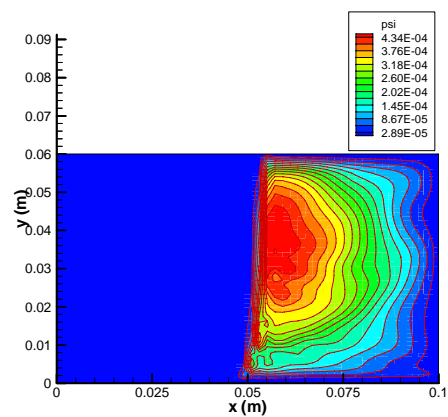
Déviation de la composition nominale ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$) à 400s



Indice de ségrégation $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ à 400s

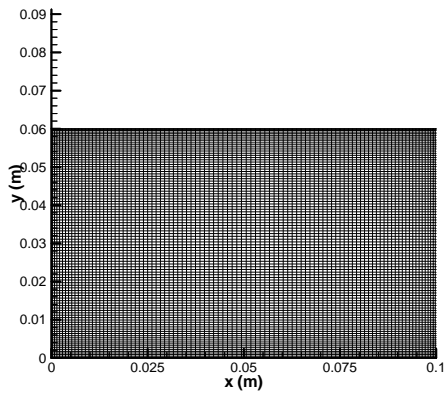


Champ des vecteurs de vitesse à 400s

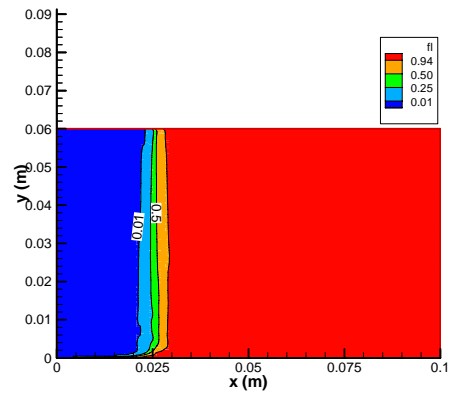


Fonctions de courant à 400s

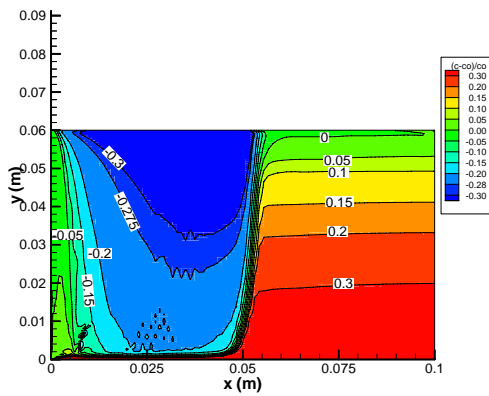
Liste de Figures 4.42 (I) : Maillage grossier A de taille (60 x 60) et pas de temps $\Delta t = 0,01$ s.



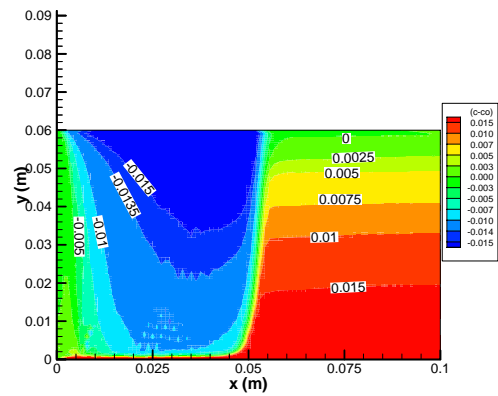
Maillage



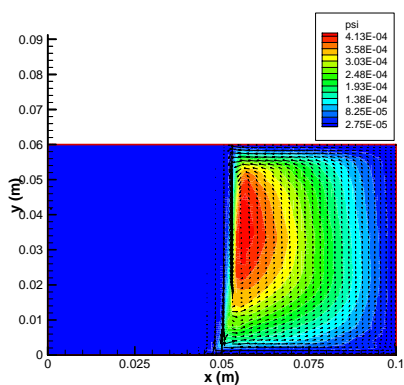
fraction massique de liquide à 100s



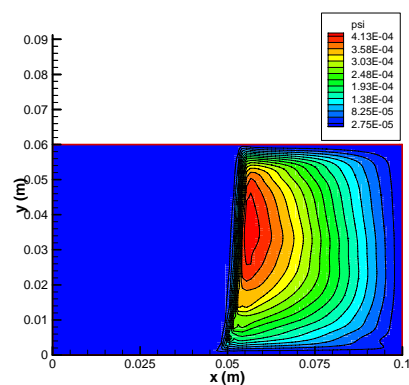
Déviation de la composition nominale ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$) à 400s



Indice de ségrégation $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ à 400s

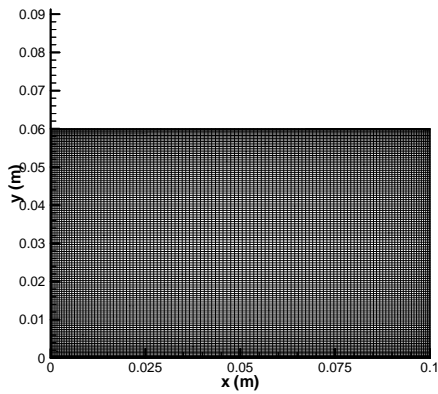


Champ des vecteurs de vitesse à 400s

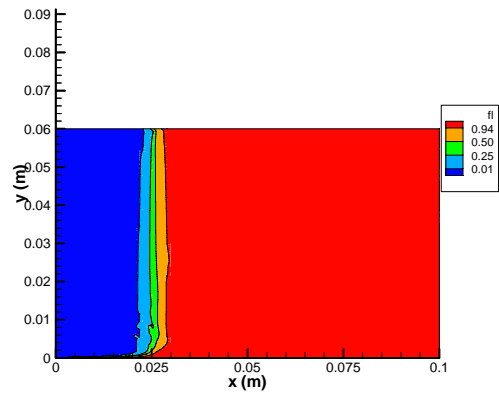


Fonctions de courant à 400s

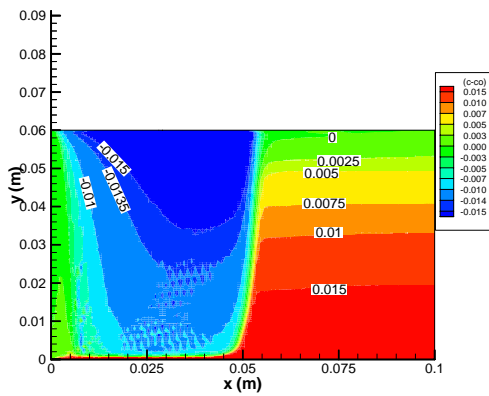
Liste de Figures 4.42 (II) : Maillage standard B de taille (100x100) et pas de temps $\Delta t = 0,01s$.



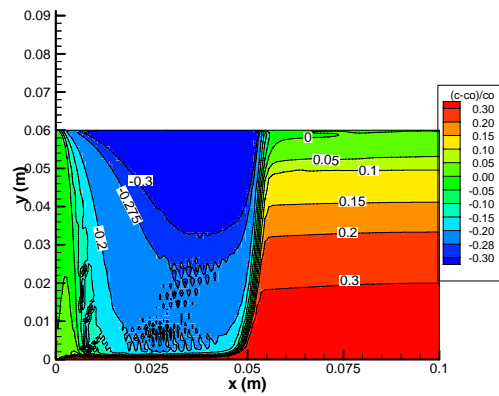
Maillage



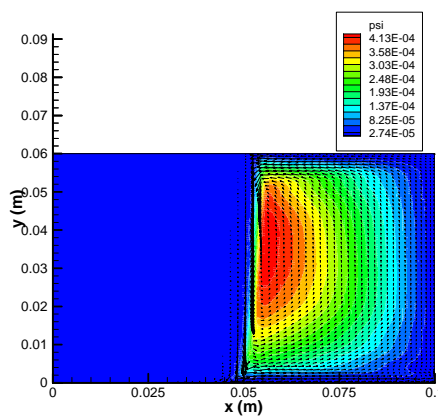
fraction massique de liquide à 100s



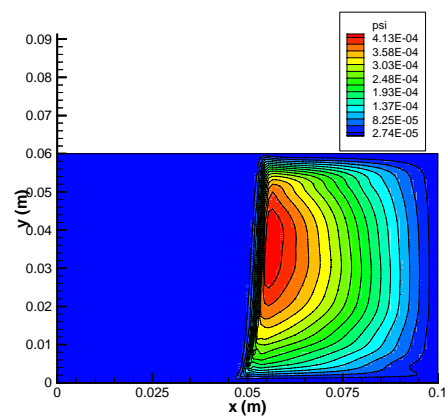
Déviation de la composition nominale ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$) à 400s



Indice de ségrégation $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ à 400s

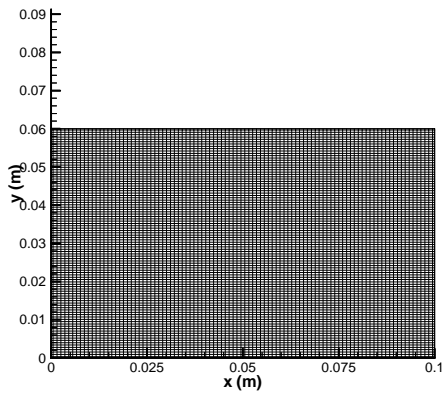


Champ des vecteurs de vitesse à 400s

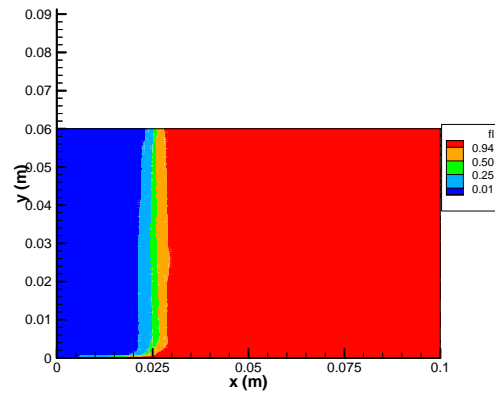


Fonctions de courant à 400s

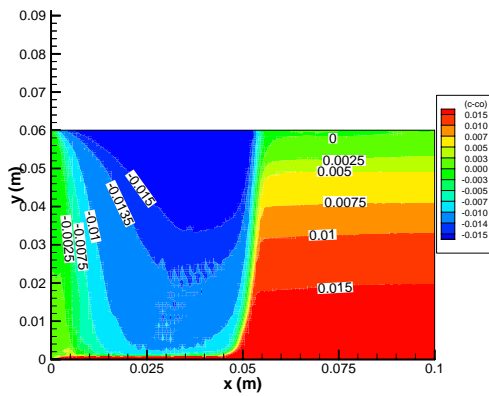
Liste de Figures 4.42 (III) : Maillage fin C de taille (120 x 120) et pas de temps $\Delta t = 0,01$ s.



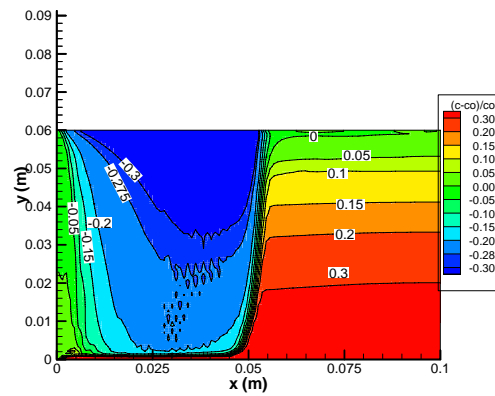
Maillage



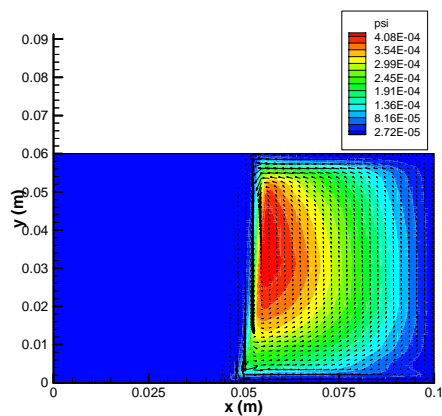
fraction massique de liquide à 100s



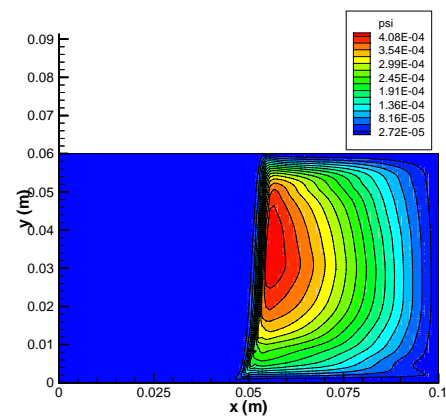
Déviation de la composition nominale ($f^{Sn} - f_0^{Sn}$) à 400s



Indice de ségrégation ($(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$) à 400s



Fonctions de courant à 400s



Fonctions de courant à 400s

Liste de Figures 4.42 (IV) : Maillage uniforme de taille (100 x 100) et $\Delta t = 0,01$ s.

Figure 4.42 : Résultats pour l'alliage Sn-5%Pb illustrant l'influence de maillage.

4.6.2.2 Étude de l'influence de la taille de maillage

Le test numérique de l'influence de la taille de maillage a été réalisé sur l'alliage *Sn-5%Pb*. La figure 4.42 montre les résultats calculés en utilisant les différents maillages décrits auparavant. En particulier sur la figure 4.42 sont présentés :

- la taille de maillage et la distribution de fractions massiques de liquide obtenues au temps $t = 100 \text{ s}$; ainsi que

- la *variation relative de la concentration moyenne* « indice de ségrégation » $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$; la *déviaton de la composition nominale* « ségrégation », $(f^{Sn} - f_0^{Sn})$, et la distribution de champ de fonctions de courant « ψ » calculés à $t = 400 \text{ s}$ de refroidissement.

La première liste de figures (Fig.4.42 (I)) montre les résultats calculés en utilisant le maillage grossier (A). La seconde liste de figures (Fig.4.42 (II)) montre les résultats calculés en utilisant le maillage standard (B). La 3^{ème} liste de figures (Fig.4.42 (III)) montre les résultats calculés en utilisant le maillage fin (C). La 4^{ème} liste de figures (Fig.4.42 (IV)) montre les résultats calculés par le maillage uniforme.

En comparant les figures (I), (II) et (III) dans la figure 4.42 (montrant les résultats obtenus en utilisant différents maillages), nous pouvons trouver que la position et la forme de l'iso-ligne ($f_l = 0,5$) sont très proches. En revanche, quelques différences apparaissent pour les lignes iso-fractions ($f_l = 0,25$ et $f_l = 0,01$) : ces iso-lignes dans la région en dessous du milieu du lingot, devient zigzagüées avec l'augmentation de la taille de maillage. En observant les contours de *ségrégation*, un *canal ségrégé* près de la paroi du bas s'apparaisse dans les résultats obtenus. Ceci a été déjà calculé par « CALCOSOFT » et « SOLID » (Ahmad et al. 1998) et « R2SOL » (Weitao (2005)) (Figs. 4.41 (I) et 4.41 (III)). En outre, il est intéressant de noter que la tendance à former les *canaux ségrégés inclinés* dans la région du milieu du lingot a été capturée par notre code et aussi par R2SOL (Weitao (2005)) (Fig. 4.41 (III)), en particulier en utilisant un maillage plus fin. Ces canaux *inclinés* ont été prédits, aussi, par « SOLID » (Ahmad et al. 1998) (Fig.4.41 (I-a)). En comparant les figures 4.42 (III et IV) nous pouvons constater que le *maillage uniforme* ne capture pas mieux les *canaux ségrégés inclinés*.

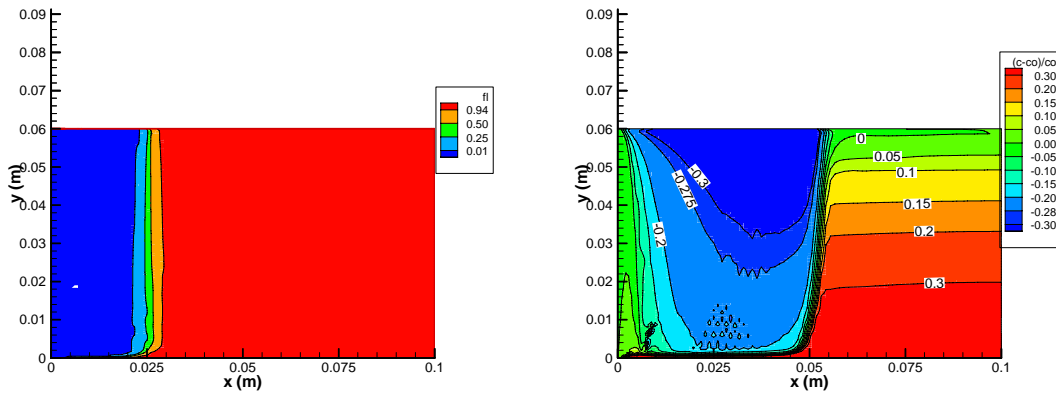
4.5.2.3 Étude de l'influence du pas de temps

Sur les figures 4-43 (a), (b) et (c) nous présentons les résultats calculés en utilisant les différents pas de temps, Δt , (soient de 0,005 s ; 0,01 s et 0,014 s) respectivement. La première colonne, en figure 4-43, montre la distribution des fractions massiques de liquide calculée au temps ($t = 100$ s). La seconde colonne montre la *variation relative de la concentration moyenne* « *indice de ségrégation* » $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ au temps $t = 400$ s.

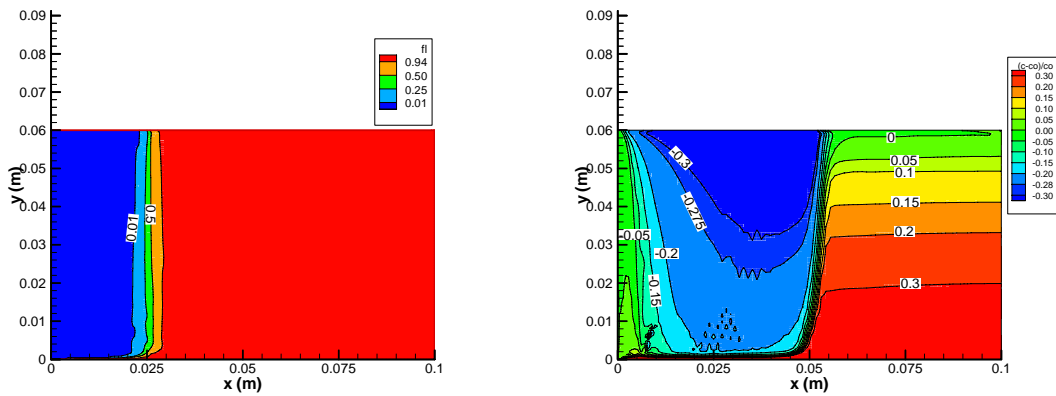
En comparant la distribution de fractions liquides au temps $t = 100$ s, les lignes d'iso-fractions de liquide ($f_l = 0,01$ et $0,25$ par exemple) deviennent *plus instables* dans la figure 4.43 (a) que dans la figure 4.43 (c). Pour les contours de *ségrégation* dans la région du milieu au temps $t = 400$ s, nous notons aussi que les *variations de concentration* en figure 4.43 (a) sont plus larges que celles présentées en figure 4.43 (c). Il semble que les *instabilités* « *canaux ségrégés inclinés* » dans la région du milieu peuvent être capturées comme il le faut en utilisant des petits pas de temps, (en comparant la figure 4.43 (a), (b) et (c)). Par conséquent, l'usage de larges pas de temps, comme il est montré en Fig. 4.43 (c), peut *lisser* les champs de fractions liquides et *concentration moyenne* (*ségrégation*).

4.5.2.4 Étude de l'influence des itérations de couplage à travers chaque pas de temps

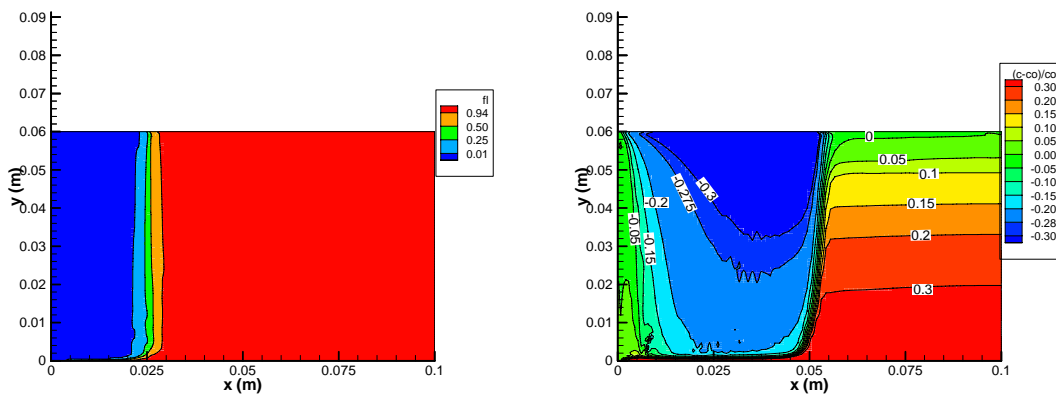
Dans le but de tester la sensibilité au *couplage itératif*, nous allons comparer les résolutions avec (20) itérations ; 2 et *une seule itération* en figure 4.44. Les contours des lignes d'iso-fractions massiques ($f_l = 0,25$ et $f_l = 0,01$) montrés en figure 4-44 (c) sont plus *lisses* que ceux en figure 4.44 (b), plus lisse que ceux en figure 4.44 (a). Ceci peut être aussi observé dans les contours de *ségrégation* en figure 4.44. Il s'apparaît que la résolution est *peu sensible* aux itérations de couplage à travers chaque pas de temps. Ce test nous a motivé de conduire, vu le coût en temps de calcul *extrêmement* élevé avec l'usage de 20 itérations, la simulation de la solidification *complète* en utilisant l'approche à *une seule* itération. En réalité, pour cet alliage nous avons entrepris la simulation de la solidification après $1,2 \times 10^6$ pas de temps ce qui correspond à environ 12000 sec (soit 3h 20 min). Il est noté qu'après 3h et 20 min de *refroidissement* la solidification n'a pas complètement achevée.



(a)- Maillage standard B (100x100) et pas de temps utilisé $\Delta t = (0,005 \text{ s})$; (la valeur la plus petite)



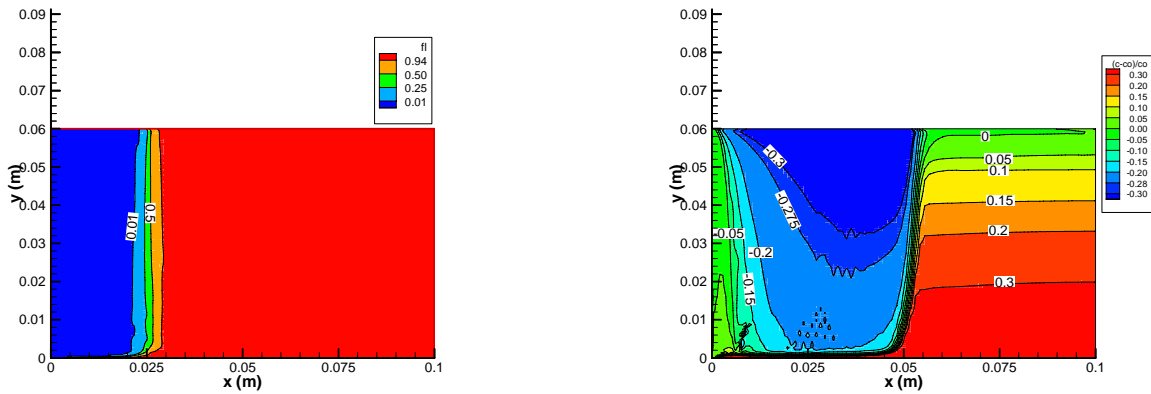
(b)- Maillage standard B (100 x 100) et pas de temps utilisé $\Delta t = 0,01 \text{ s}$ (la valeur standard).



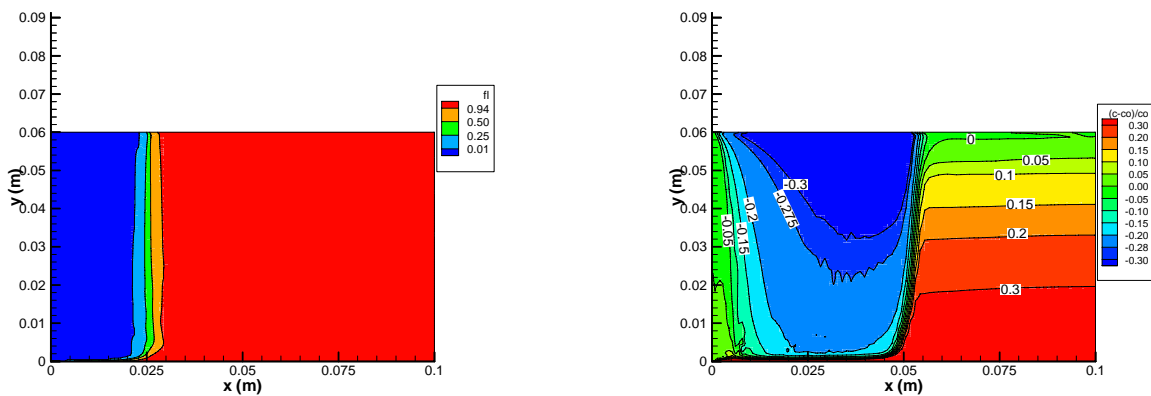
(c)- Maillage standard B (100 x 100) et pas de temps utilisé $\Delta t = 0,014 \text{ s}$ (la valeur la plus grande).

Figure 4.43 : Résultats pour l'alliage *Sn-5%Pb* illustrant l'influence de la taille de pas de temps : (les résolutions avec 20 itérations et le maillage standard B. La 1^{ère} colonne présente les fractions massiques « f_i » à 100s et la 2^{ème} colonne présente l'Indice de ségrégation

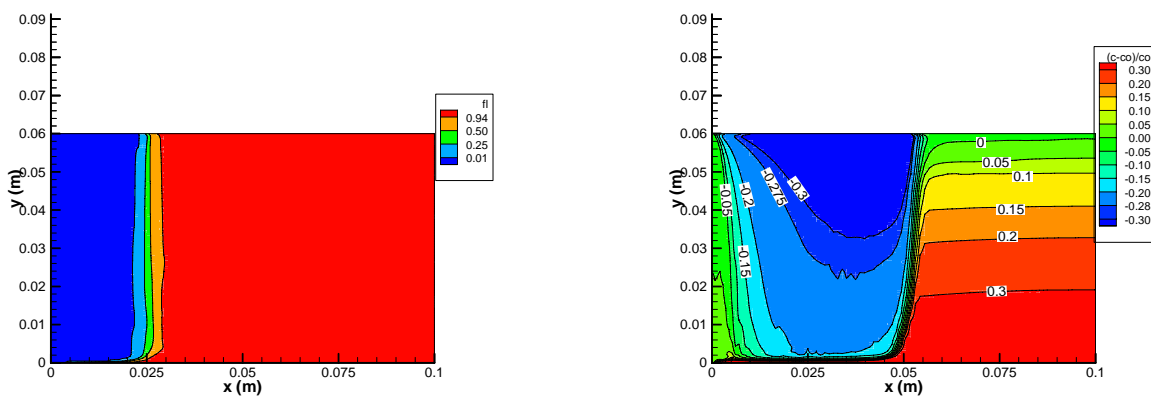
$$\left(f^{Sn} - f_0^{Sn} \right) / f_0^{Sn} \text{ à } 400s.$$



(a) solution avec 20 itérations (maillage standard et pas de temps 0,01s)



(b) solution avec 2 itérations (maillage standard et pas de temps 0,01s)



(c) solution avec 1 seule itération (maillage standard et pas de temps 0,01s)

Figure 4.44 : Influence du couplage complet avec (a) 20 (b) 2 itérations et (c) 1 seule itération respectivement. La 1^{ère} colonne présente « f_1 » à 100s et la 2^{ème} colonne présente l'Indice de ségrégation $(f^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$ à 400s.

4.6.2.5 Confrontation avec d'autres résultats numériques

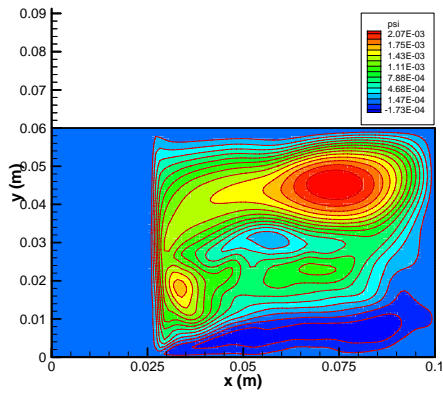
En comparant nos résultats avec d'autres résultats d'investigations montrés en figures 4.41 obtenus avec les codes SOLID ; CALCOSOFT et R2SOL, nous notons que les résultats obtenus par notre modèle et ceux de ces codes sont *généralement* qualitativement semblables. Notons ici la différence des modèles mathématiques (c'est-à-dire les équations sont différentes) utilisés par la présente étude et ces études (remarque 4.9). Nous pensons que ces différences sont attribuées essentiellement à la différence de modèle mathématique utilisé. Une autre comparaison, en termes de *ségrégation finale* obtenue, entre nos résultats et ces résultats numériques a été réalisée et présenté dans la section 4.6.2.7 ci-dessous.

4.6.2.6 Effet d'un champ magnétique :

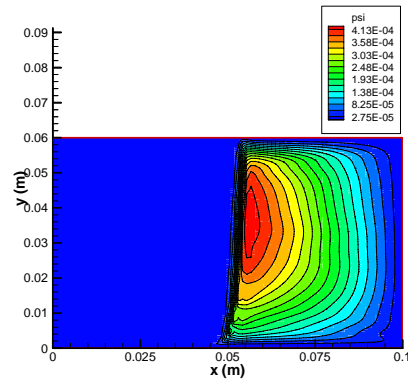
Dans le but de tester la *stabilisation* de l'écoulement de convection *thermosolutale* par l'application d'un *champ magnétique* et par conséquent étudier l'influence de champs magnétiques sur la *ségrégation* pour cet alliage (Sn-5%Pb). Nous avons entrepris le présent test numérique. Le champ magnétique est appliqué en premier lieu dans la direction x et en second lieu celle de y . Vu le manque de données concernant les valeurs exactes de la conductivité électrique du système Sn-5%Pb, la valeur ($Ha=500$) a été estimée pour le champ magnétique selon les valeurs considérées pour le premier système d'alliage étudié (Pb-10%Sn). Les résultats de ce calcul numérique sont présentés sur la figure 4.45. L'examen des figures (a) (b) et (c) montre clairement l'effet *stabilisant* sur l'écoulement et par conséquent sur le *modèle de ségrégation*. Contrairement au cas du système Pb-10%Sn, dans le cas de l'alliage Sn-5%Pb le champ magnétique horizontal conduit à une ségrégation plus *prononcée* que le champ *vertical*. En particulier la formation des *canaux ségrégés inclinés* est plus prononcée dans le cas de champ horizontal.

Avant de passer à la *confrontation* avec les *expériences*, nous avons présenté en figure 4.46 les résultats obtenus après 3h et 20min de refroidissement. La Fig. 4.46 (I) présente les résultats obtenus *sans* champ magnétique alors sur les Figs. 4.46 (II) et 4.46 (III) sont présentés les résultats avec un champ *horizontal* et *vertical* respectivement. Notons que dans tous les calculs numériques, entrepris ici, l'approche en *couplage* avec une *seule itération* a été utilisée, alors qu'un facteur de raffinement de 1,2 (pour le raffinement de maillage près des parois de cavité dans les directions x et y) est appliqué. Le maillage utilisé étant le

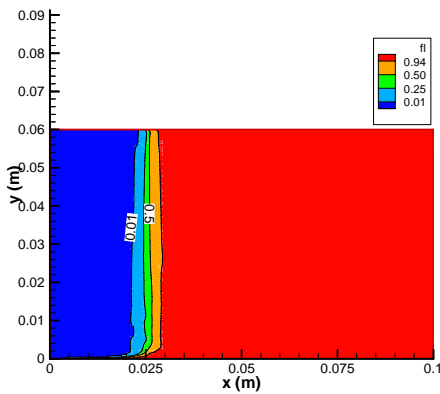
maillage standard B de taille de 100x100 alors que le pas de temps étant le pas de temps standard (soit de 0,01s).



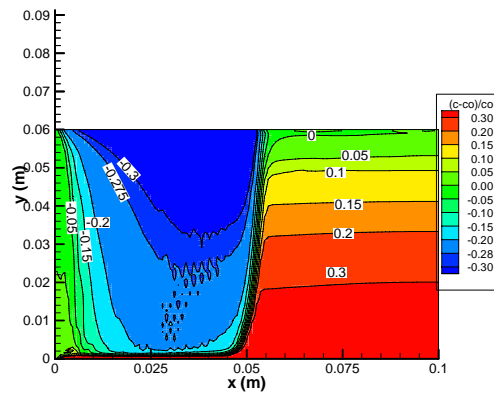
Fonctions de courant à 100 s



Fonctions de courant à 400s

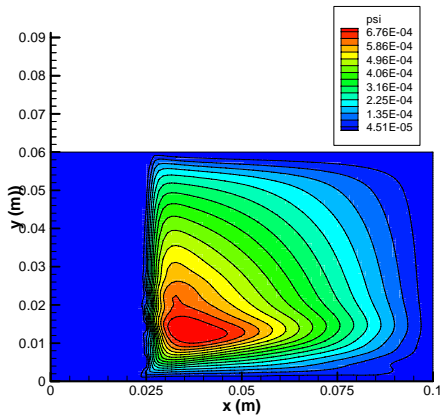


Fractions massiques de liquide à 100 s

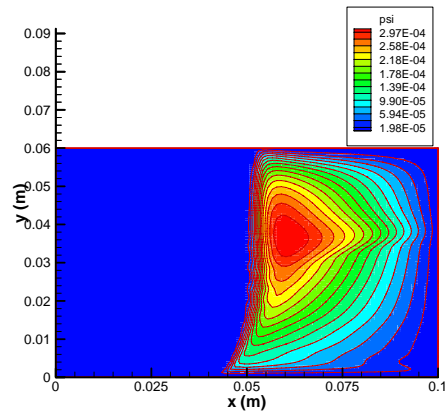


indice de ségrégation à 400s

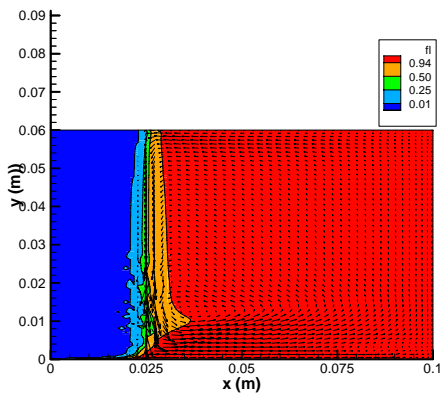
Figure 4.45-I : Résultats dans le cas d'absence de champ magnétique ($Ha=0$). Le maillage standard B (100x100) et pas de temps standard ont été utilisés. À $t= 100$ s par exemple ($\psi_{\max}=0,00223$ et $\psi_{\min} = -0,000333$) et aussi ($v_{\min}=-4,46$ mm/s ; $v_{\max}=1,64$ mm/s) et ($u_{\min}=-2,53$ mm/s ; $u_{\max}=2,52$ mm/s)



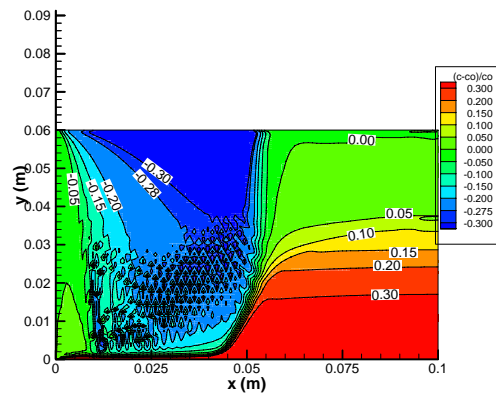
Fonctions de courant à 100 s



Fonctions de courant à 400s



Fractions massiques de liquide à 100 s

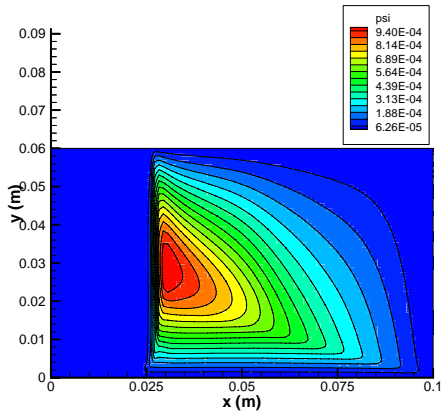


Indice de ségrégation à 400s

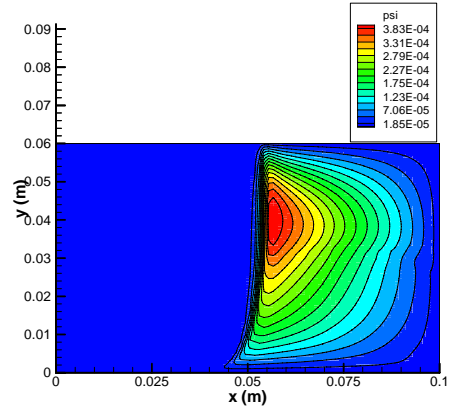
Figure 4.45-II : Résultats dans le cas de stabilisation par champ horizontal ($Ha=500$). Le maillage standard B (100x100) et pas de temps standard ont été utilisés (le nombre d'itération est 20). À 100 s

par exemple ($\psi_{\max}=0,0007215$ et $\psi_{\min}=-7,92 \times 10^{-9}$) et aussi à 100 s ($u_{\min}=-0,51 \text{ mm/s}$;

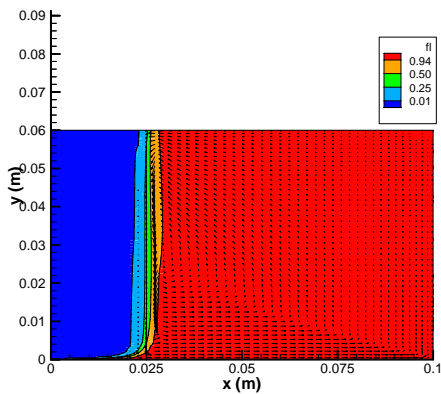
$$u_{\max}=0,94 \text{ mm/s} ; v_{\max}=0,14 \text{ mm/s} ; v_{\min}=-1,91 \text{ mm/s}$$



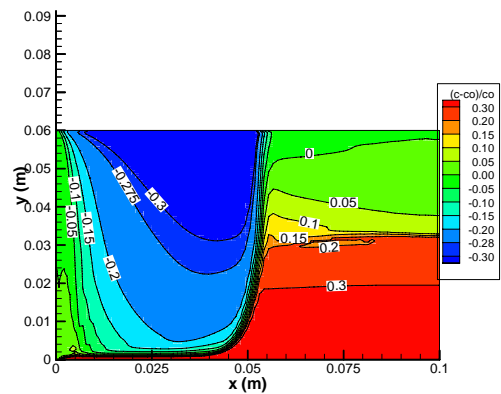
Fonctions de courant à 100 s



Fonctions de courant à 400s

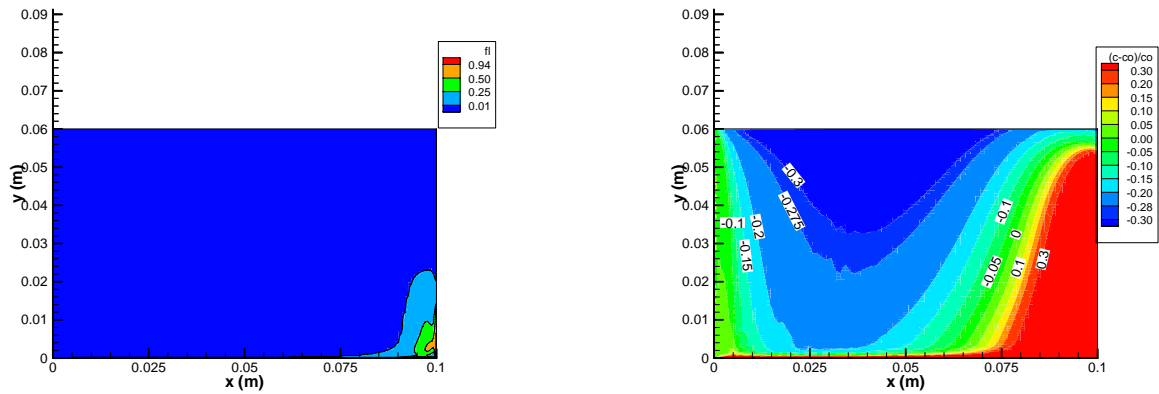


Fractions massiques de liquide à 100 s

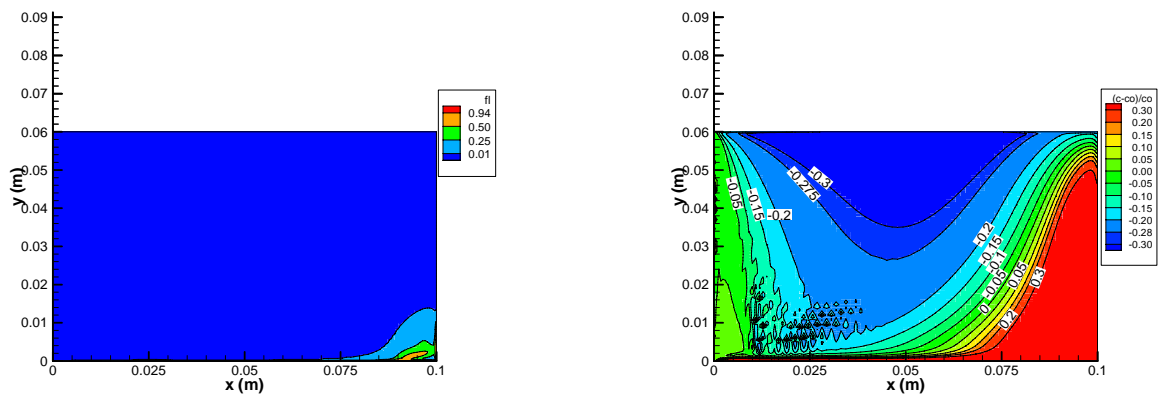


Indice de ségrégation à 400s

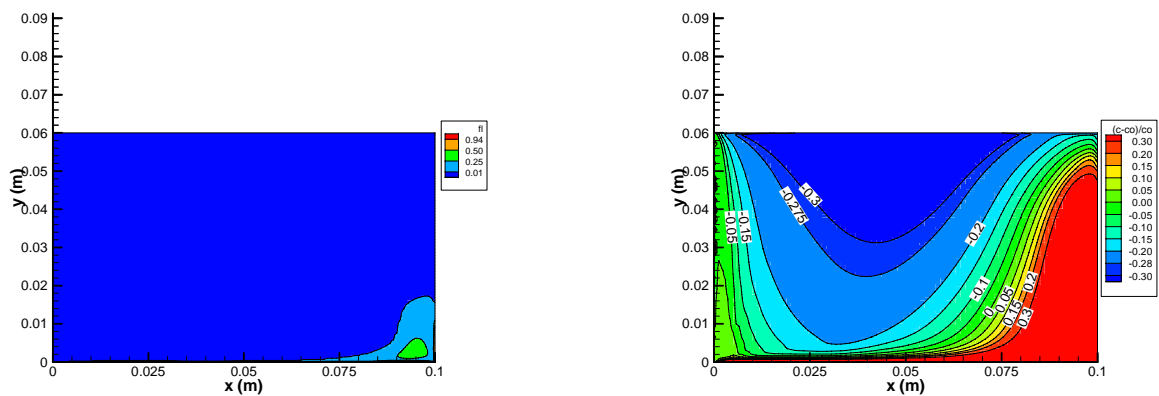
Figure 4.45-III : Résultats dans le cas de stabilisation par champ vertical ($Ha=500$). Le maillage standard B (100x100) et pas de temps standard ont été utilisés. À 100 s par exemple ($\psi_{\max}=0,001002$ et $\psi_{\min}=-1,49 \times 10^{-8}$) et aussi à 400 s ($u_{\min}=-0,62\text{mm/s}$; $u_{\max}=0,72\text{mm/s}$; $v_{\max}=0,36\text{mm/s}$; $v_{\min}=-3,58\text{mm/s}$).



(a) Cas de l'absence de champ magnétique ($Ha=0$)



(b) Champ magnétique horizontal ($Ha= 500$)



(c) Champ magnétique vertical ($Ha= 500$)

Figure 4.46 : Résultats après 3h et 20 min de refroidissement. La 1ère colonne présente les fractions massiques de liquide et la 2ème colonne présente l'indice de ségrégation $(\hat{c}^{Sn} - f_0^{Sn})/f_0^{Sn}$. Sur les figures nous avons adoptées les mêmes légendes adoptées précédemment

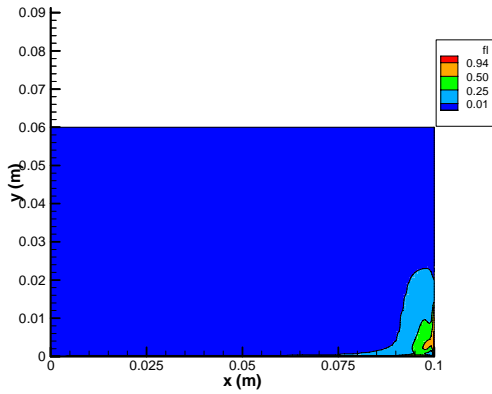
4.6.2.7 Confrontation avec l'expérimental

Dans le but de comparer nos résultats avec l'expérimental, sur la **figure 4.47** nous avons présenté les profils de concentration dans différentes sections (horizontales) traversant le lingot après (4h) de refroidissement. Dans les calculs numériques, entrepris ici, l'approche en *couplage* avec une *seule itération* a été utilisée, alors que le maillage étant le *maillage grossier* de taille (60x60). En outre, le pas de temps standard est utilisé.

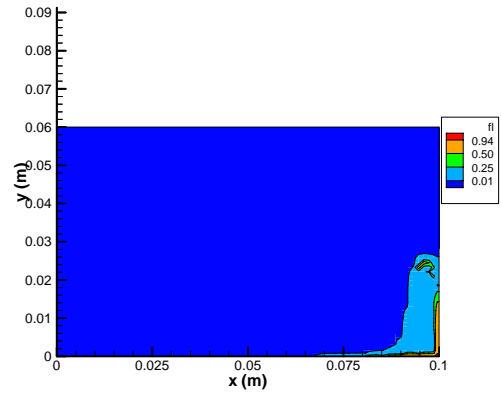
Il est remarqué que les mesures et prédictions numériques sont en *bon agreement* figure 4.47 (a). S'il est admis que les valeurs de concentration peuvent être considérées exactes de $\pm 1\%$ (soit $(f^{Sn} - f_0^{Sn}) \pm 0,01$) des valeurs de concentration mesurées. Excepté la région près de la paroi de droite de la cavité située (entre environ 85 mm et 100 mm) nos résultats sont différents des mesures. Ceci est évident puisque après (4h) cette région surtout du bas est composée de phases pâteuse et liquide dont les concentrations sont élevées.

D'autre part, les résultats numériques obtenus par les codes, SOLID et R2SOL ([Weitao \(2005\)](#)), ont été également rapporté sur la figure 4.47 (b).

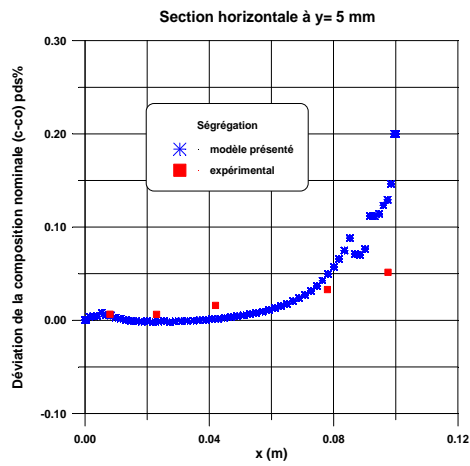
L'examen de profile de ségrégation, le long des différentes sections, traversant le lingot, dans la direction horizontale, nous permet d'observer que nos résultats *globalement* coïncident avec les résultats *expérimentaux* et un peu moins avec les *résultats numériques* obtenus par *R2SOL et SOLID*. Les oscillations observées sur les résultats numériques (SOLID et R2SOL ([Weitao \(2005\)](#))) indiquent clairement les *canaux ségrégés inclinés*. Ces tendances sont peu prédites par le modèle présenté puisque nous avons utilisé un maillage de faible résolution (comme nous avons vu en se référant à la discussion de la section 4.6.2.2 qu'en fait le maillage faible ne capture pas d'une meilleure façon la formation de *canaux ségrégés inclinés*).



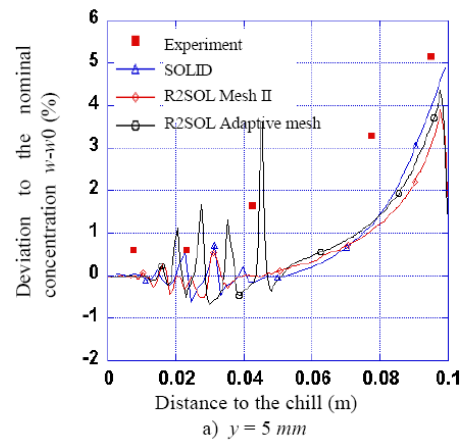
Fractions massiques de liquide à 3h 20min (maillage 100x100)



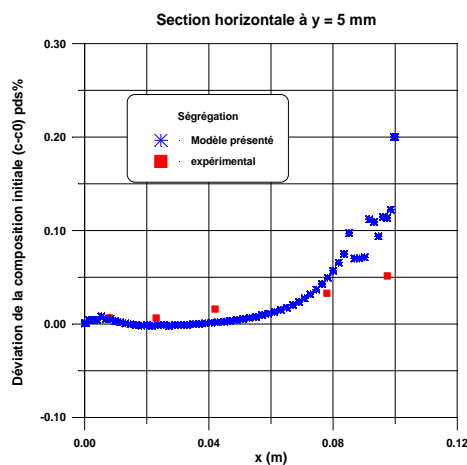
Fractions massiques de liquide à 4h (maillage 60x60)



(a) Modèle présenté et expérimentaux (3h 20min) (100x100)

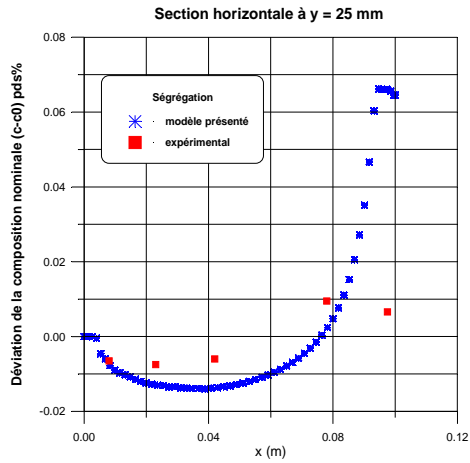


(b) Modèles (Weitao (2005))

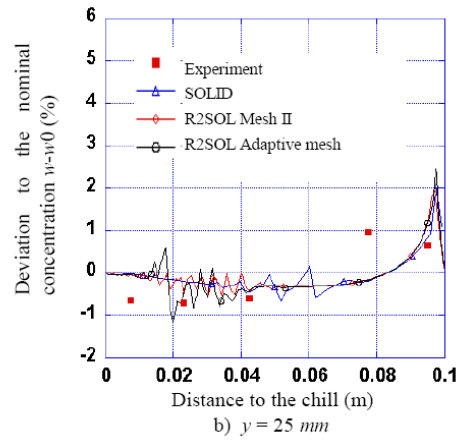


(a) Modèle présenté et expérimentaux (4h) (maillage 60x60)

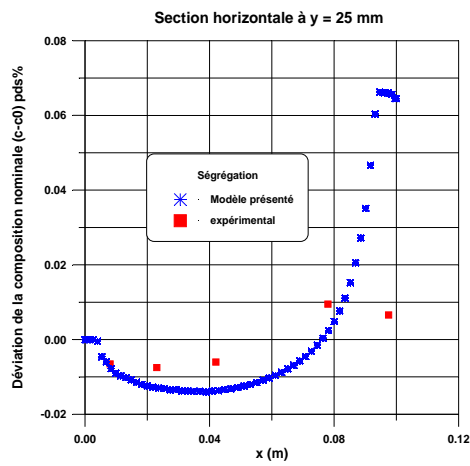
I- Section horizontale à y= 5 mm



(a) Modèle présenté et expérimentaux (3h 20min) (100x100)

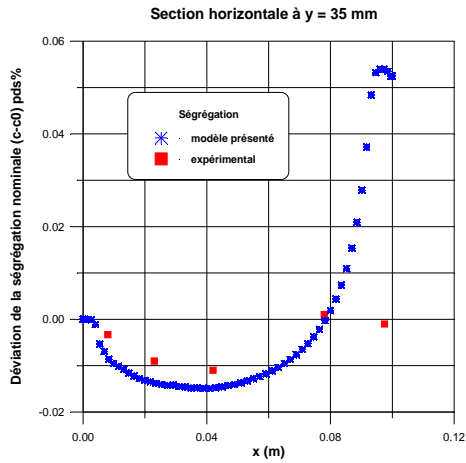


(b) Modèles (Weitao (2005))

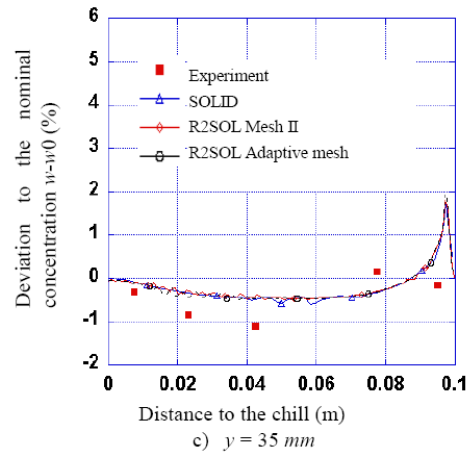


(a) Modèle présenté et expérimentaux (4h) (maillage 60x60)

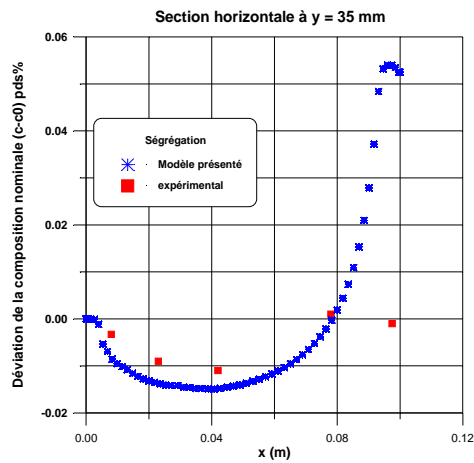
II- Section horizontale à y= 25 mm



(a) Modèle présenté et expérimentaux (3h 20min) (100x100)

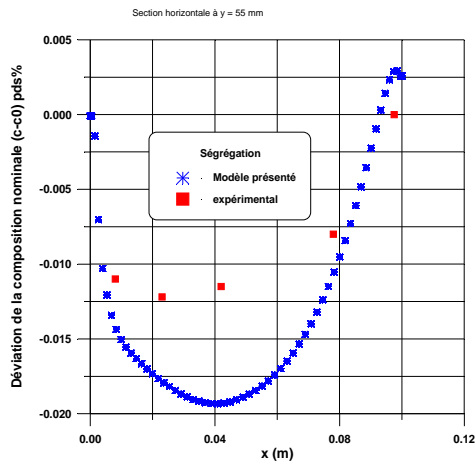


(b) Modèles (Weitao (2005))

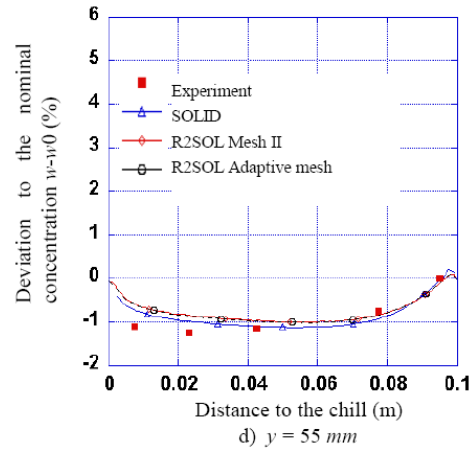


(a) Modèle présenté et expérimentaux (4h) (maillage 60x60)

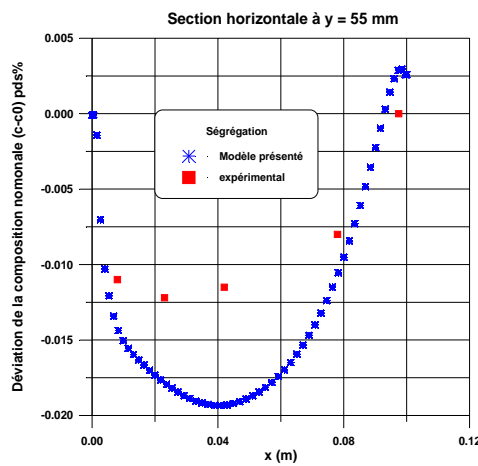
III- Section horizontale à y= 35 mm



(a) Modèle présenté et expérimentaux (3h 20min) (100x100)



(b) Modèles (Weitao (2005))



(a) Modèle présenté et expérimentaux (4h) (maillage 60x60)

IV- Section horizontale à $y= 55 \text{ mm}$

Figure 4.47 : Confrontation avec les expériences et numériques : Comparaison entre différents modèles de résolutions numériques et les expériences. (a) Résultats du modèle présenté et expérimentaux et (b) résultats de R2SOL et SOLID (remarque : les figures (b) sont tirées de la thèse [Weitao \(2005\)](#)).

4.6.2.8 Discussions des résultats pour l'alliage Sn-5%Pb

➤ *À l'égard du pas de temps, taille et raffinement de maillage*

En comparant les résultats obtenus par les différents maillages et pas de temps en (Figs. 4.42 et Figs. 4.43), nous notons qu'un maillage fin *adéquat* et un *petit* pas de temps sont nécessaires pour capturer, comme il le faut, les *canaux ségrégés (inclinés)*.

Dans le but de discuter l'influence de la taille de maillage sur les *canaux ségrégés*, nous présentons les champs de *fraction liquide* et de vitesse en figure 4.48 (I) et figure 4.48 (II). Les résultats sont obtenus par la formulation en *couplage complet* (20 itérations) en utilisant différents maillages.

La figure 4.48 (I) montre les *fractions massiques de liquide* et le champ de vitesse superimposé à $t = 100$ s. Le calcul est réalisé en utilisant le *maillage grossier (A)* (tableau 4.8). Un *canal ségrégé* (droit) a été formé à la surface du bas de cavité. Par conséquent, un écoulement « *canal* » fort en bas de cavité peut être observé. Alors que, l'écoulement fluide dans la direction contre des aiguilles d'une montre se produit dans la masse liquide.

La figure 4.48 (II) présente les résultats calculés en utilisant le maillage *le plus fin (C)* de taille (140x140) (tableau 4.8). Outre que le *canal ségrégé* (droit) qui apparaît en bas de cavité, plusieurs *canaux inclinés* peuvent être aussi observés. Dans la région pâteuse en zoom, nous pouvons observer que le fluide dans les *canaux inclinés* se déplace vers la masse liquide avec une *vitesse relativement élevée*. En comparant les figure 4.48 (I) et figure 4.48 (II), bien que l'écoulement fluide dans la masse liquide soit similaire, l'écoulement dans la région en zoom est tout à fait différent.

Nous rappelons, ici, la **condition de refusion** (donnée ci-dessus pour l'alliage Pb-10%Sn) qui indique que dans le cas d'écoulement de fluide interdendritique se déplaçant le long de la direction de gradient température (de la température faible vers la température élevée) « si la vitesse de fluide est $>$ à la vitesse de l'isotherme et si $(\partial f_i / \partial t)$ devient positive », le phénomène de **refusion** peut se produire et les *canaux* se croître, conduisant à des *canaux ouverts* à la masse liquide. Ceci est le cas, aussi, pour la solidification de l'alliage Sn-5%Pb, dans lequel l'écoulement fluide, dans la direction contre les aiguilles d'une montre, *encourage* et *promue* la formation des *canaux ségrégés (inclinés)*. Les calculs des tests montrent

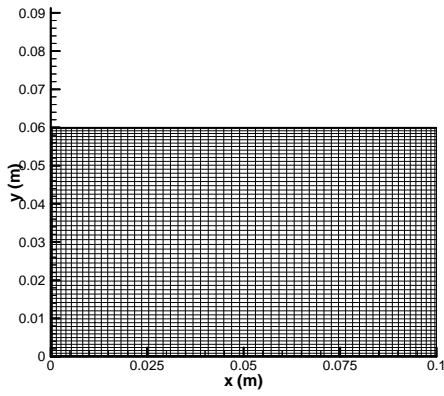
combien l'usage d'un maillage *fin* (et d'un petit pas de temps) est nécessaire pour calculer le développement des *instabilités* dans l'écoulement de fluide interdendritique et par conséquent de *capturer* la formation des *canaux (inclinés)* ; alors qu'un maillage grossier (ou pas de temps large) *lisse* le champ vitesse, de telle sorte que les petites perturbations ne peuvent se développer.

➤ *À l'égard de nombre des itérations de couplage à travers chaque pas de temps*

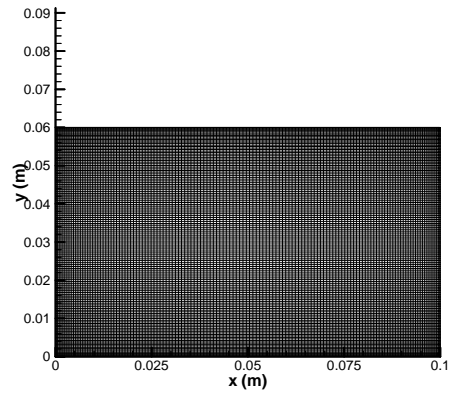
Nous avons trouvé que la prédiction de *canaux ségrégés (inclinés)* est peu *sensible* au nombre des *itérations de couplage* à travers chaque pas de temps (Fig. 4.44). Depuis que la résolution en *couplage complet* avec 20 itérations est très coûteuse, nous voulons capturer les *canaux* en utilisant une *seule itération*. En utilisant le maillage standard (B) et le pas de temps standard $\Delta t = 0,01$ s, le calcul a été réalisé par l'approche en *couplage complet* avec seulement *1 itération* et les résultats sont présentés en figure 4.49. La Figure 4.49 (a) montre que les contours des fractions massiques de liquide à $t = 100$ s, le contour zigzagué de $f_l=0,25$ indique les instabilités de l'écoulement de fluide interdendritique. La figure 4.49 (b) montre la distribution de la ségrégation (*indice de ségrégation*) à $t = 400$ s, révélant les *canaux ségrégés*. En comparant la figure 4.49 (résolution *une itération*) et la figure 4.48 (II) (résolution avec 20 itérations), nous notons que les *canaux ségrégés* peuvent être capturés par la résolution à *une itération* lorsque nous utilisons un maillage plus fin. Cependant, plus d'investigation doivent être nécessaires pour évaluer les différences entre les the résultats.

➤ *À l'égard de l'effet des champs magnétiques appliqués*

À partir de la Fig. 4.45, il est confirmé que le champ magnétique statique et uniforme appliqué, surtout dans la direction verticale, conduit à la *suppression* de l'écoulement par la réduction des vecteurs de vitesses. L'effet du champ magnétique vertical est montré sur la Fig. 4.46 (représentant la ségrégation).

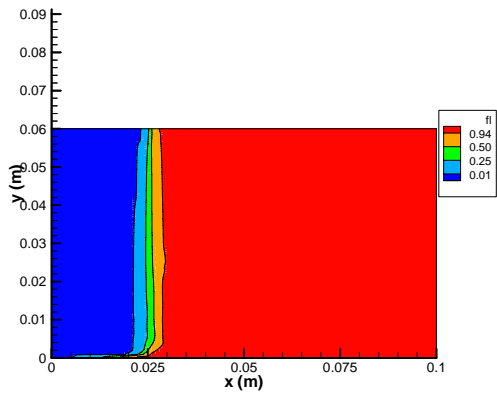


Maillage grossier (60x60)

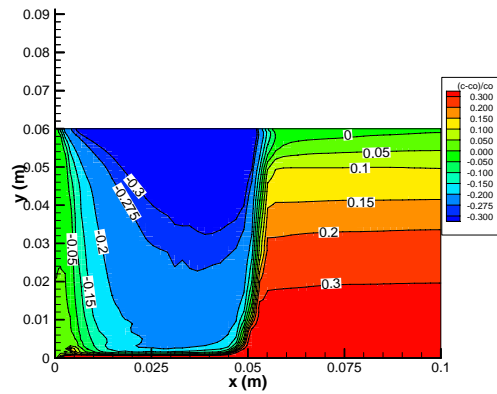


Maillage le plus fin (140x140)

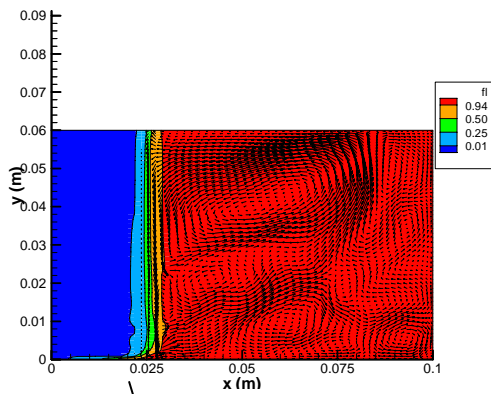
Figure 4.48 (I) : Influence de maillage et illustration des *canaux ségrégés inclinés* : (I)- les deux types de maillage (grossier et le plus fin)



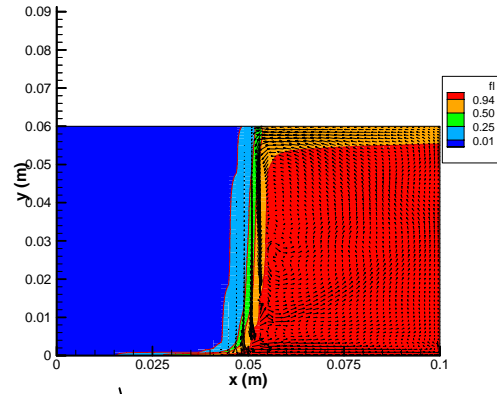
Fractions massiques de liquide (f_l) à 100s



Indice de ségrégation à 400 s



Fractions (f_l) superposées avec le champ de vitesse à 100s



Fractions(f_l) superposées avec le champ de vitesse à 400s

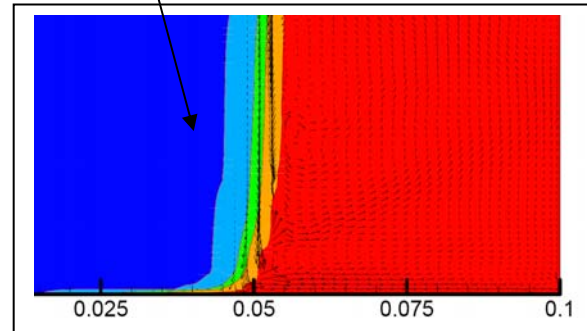
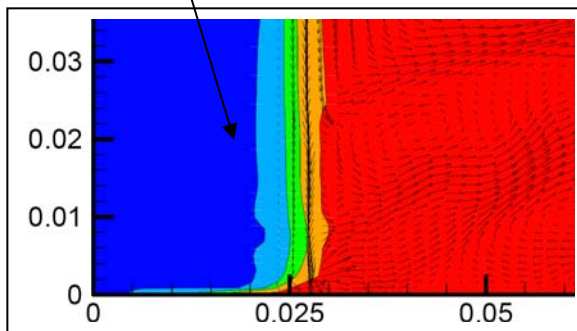
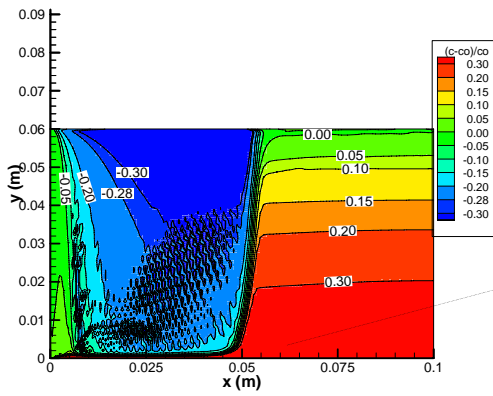


Figure 4.48 (II) : Influence de maillage et illustration des *canaux ségrégés inclinés* : (I)- Maillage grossier



Indice de ségrégation à 400 s

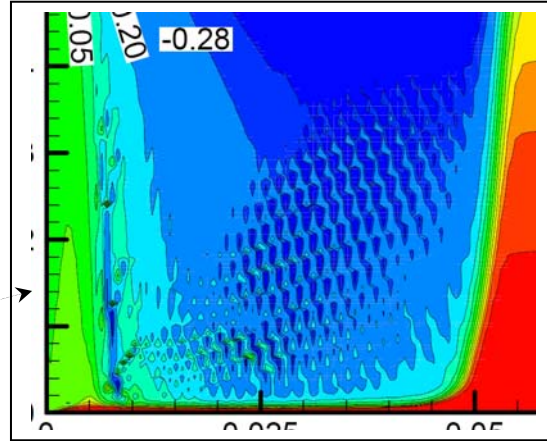
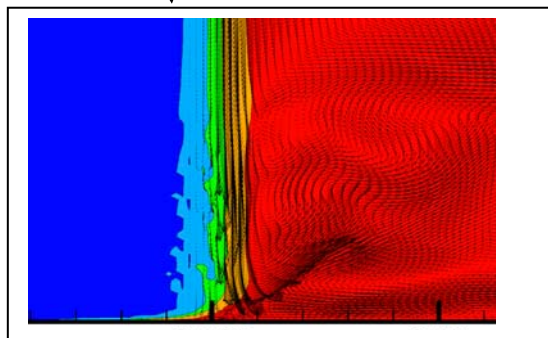
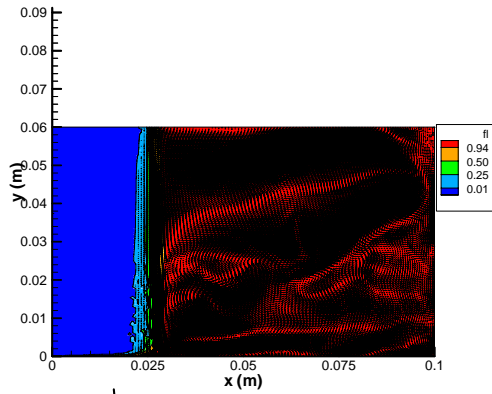
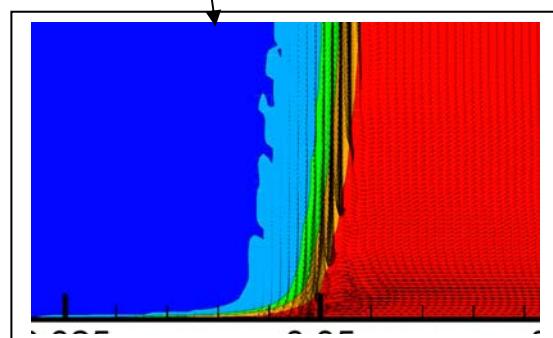
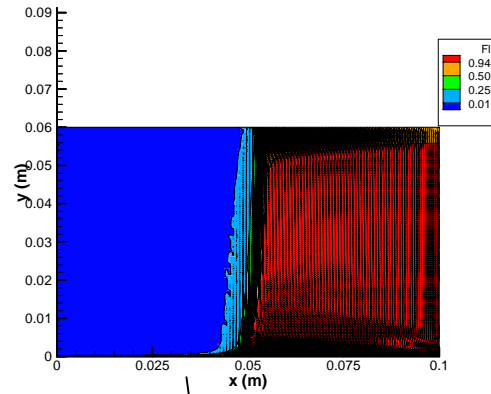


Illustration du canal ségrégué en bas et les canaux ségrégués inclinés à 400s



Fractions (f_i) superposées avec le champ de vitesse à 100s



Fractions (f_i) superposées avec le champ de vitesse à 400s

Figure 4.48 (III) : Influence de maillage et illustration des canaux ségrégués inclinés : (III) Maillage le plus fin

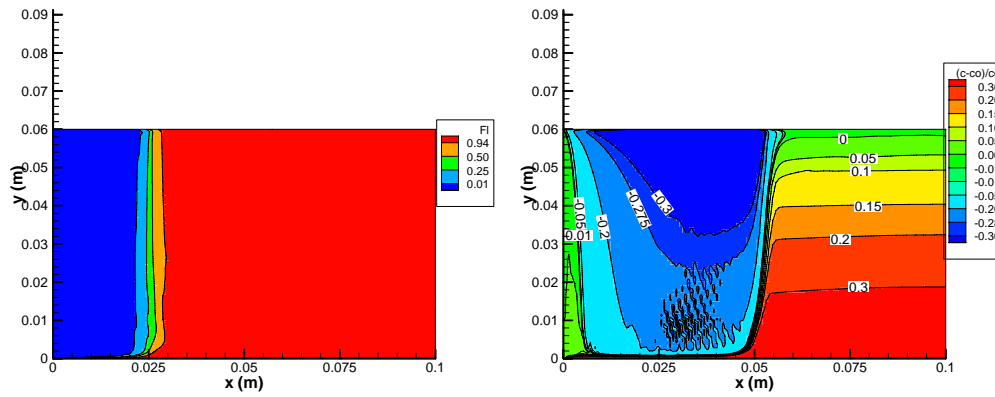


Figure 4.49 : Résultats obtenus avec une seule itération en utilisant le maillage le plus fin (140x140).

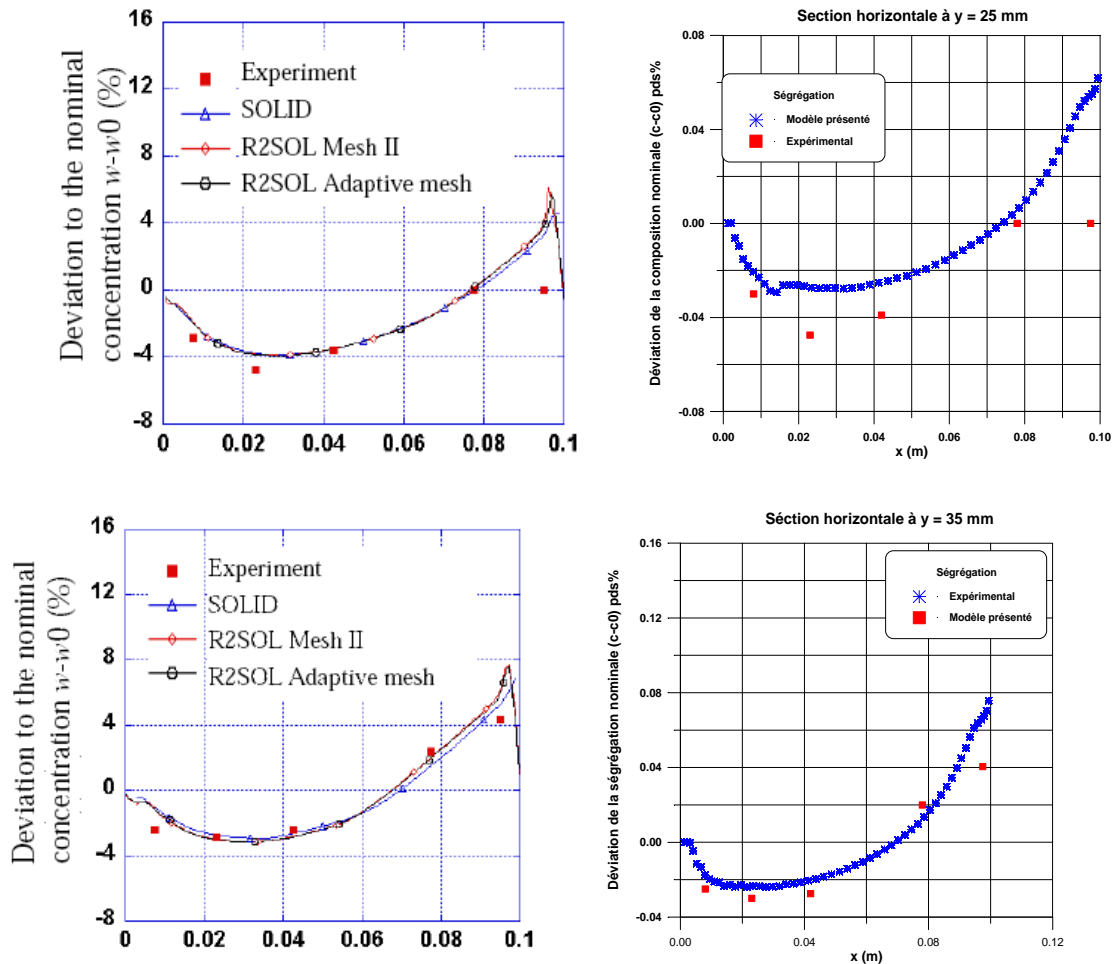


Fig. 4.50 : Macroségrégation sur deux sections horizontales à la fin de la solidification.

4.6.3 Résultats pour l'alliage Pb-48%Sn

Vu le nombre élevé de pages réalisé jusqu'ici, nous présentons ici, pour l'alliage Pb-48%Sn, seulement les résultats de ségrégation finale obtenus après 860000 pas de temps ce qui correspond à environ 7400 sec (soit environ 2 heures de refroidissement).

4.6.3.1 Confrontation avec l'expérimental

Une comparaison *quantitative* entre les résultats numériques et expérimentaux est montrée en Figure 4.50, pour laquelle les profils de concentration dans différentes sections de lingot après la solidification complète sont tracés. Dans les calculs nous avons utilisé 1 seule itération et un maillage de 100x100. Les mesures et les prédictions numériques sont en assez bon accord, excepter dans la section de droite, où les variations sont importantes (aussi bien que la non-exactitude de mesure, particulièrement due à la déformation de spécimen).

4.6.4 Remarques finales

Le modèle numérique présenté en chapitre 3 a été appliqué pour le calcul de *ségrégation* dans les alliages *Sn-5%Pb* et *Pb-48%Sn*. Dans le premier alliage, les convections (thermique et solutale) sont dans la même direction, conduisant à une forte tendance à la formation des *canaux ségrégés*. Alors que dans le second alliage, les effets de gradients (thermique et solutal) sur la masse volumique de liquide sont opposés, mais la dernière domine l'écoulement fluide et cet alliage aussi montre une forte tendance à la formation de *ségrégation*.

À partir de tests numériques entrepris, nous pouvons conclure quelques points pour le calcul de *ségrégation* comme suit :

- Les tests de calcul pour les deux alliages montrent que la taille de maillage et pas de temps influencent largement les résultats. Le calcul avec un maillage grossier et un pas de temps large ne peut pas capturer les localisations conduisant aux *canaux ségrégés*. Par conséquent, dans le but de prédire ces *canaux*, des maillages de taille suffisamment fine et de petits pas de temps doivent être utilisés.

- Finalement, en ce qui concerne l'effet de stabilisation par champ magnétique. Les résultats de test numérique entrepris montrent les *tendances* largement rapportées dans la littérature sur les effets de stabilisation des champs magnétiques.

4.7 Différences entre les résultats numériques du modèle présenté et expérimentaux

La synthèse entre les résultats numériques du modèle présenté et des expériences, a révélée que certaines différences quantitatives ont été constatées. Les conclusions qu'on peut tirer, que ce désaccord *quantitatif* entre les résultats prédits et mesurés est essentiellement dû :

Le modèle de microségrégation utilisé : Ces différences peuvent être attribuées à l'utilisation de la *règle du levier*, qui néglige les effets importants de diffusion massique microscopique de soluté ($D_s = 0$).

Les propriétés thermophysiques des matériaux : Des incertitudes demeurent aussi quant aux propriétés thermophysiques des matériaux, généralement, prises constantes dans les prédictions numériques, ces propriétés varient souvent en fonction de la température et concentration.

Le modèle de perméabilité choisi dans la zone pâteuse : le modèle de Darcy choisi ici joue un rôle significatif dans ces différences. En effet, la perméabilité des zones dendritiques colonnaires est généralement reliée à la porosité (g) par la loi Kozeny–Carmann (équation (1.30)), représentative des milieux poreux homogènes et isotropes. Or, les zones pâteuses colonnaires sont, à l'évidence, très hétérogènes : la porosité varie d'une valeur nulle à l'unité au sein de la zone pâteuse. Cette propriété a été qualifiée d'hétérogénéité évolutive. De plus, des expériences ont clairement démontré la forte anisotropie des zones dendritiques colonnaires.

4.8 Conclusion du chapitre

Le modèle présenté basé sur l'approche continue a été, avec succès, mis en application dans la présente investigation, afin d'analyser numériquement les procédés de transport lors d'un processus à changement de phase liquide-solide des alliages binaires.

Les premiers calculs numériques ont été entrepris sur les systèmes étain-plomb ou plomb-étain, dans une cavité rectangulaire.

Les résultats obtenus conduisant à des caractéristiques robustes relatives à la solidification d'alliage binaire, ces caractéristiques ont été supposé à être existées ou révélé par des expériences : le couplage entre les écoulements contrôlés par les forces de flottabilité thermosolutale associées avec les régions pâteuse et liquide ; l'établissement d'un front de liquidus fortement irrégulier et la formation des *poches liquides dues à la refusion dans les zones pâteuse et liquide*. En effet, la refusion facilite la formation des canaux qui fournissent la nature préférentielle des *écoulements de canaux préférentiels (riches en soluté)*, discutée ci-dessus. Par l'utilisation de ce modèle, les calculs numériques entrepris ici révèlent, une conclusion concernant la relation entre l'écoulement de *canal*, se produisant lors des premières étapes de solidification, et la formation de la *ségrégation* finale de type canal (*ségrégation -A*) dans le lingot solidifié.

Chapitre 5 - Étude numérique de l'écoulement convectif d'un fluide conducteur dans une cavité 3-D : Effet d'un champ magnétique statique appliqué

5.1 Introduction

Dans le présent chapitre, une étude numérique est entreprise pour calculer l'écoulement convectif tridimensionnel (3-D), d'un fluide à faible nombre de Prandtl (Pr), observé sous un gradient de température appliqué. Le domaine de simulation est sélectionné comme une cavité parallélépipède 3-D remplie d'un liquide métallique et chauffée de dessous et partiellement chauffée latéralement (Fig.5.1), qui peut représenter une configuration souvent utilisée dans la solidification et croissance cristalline. Dans de telle configuration, le phénomène de bifurcation de perte de symétrie « symmetry breaking bifurcation » dans l'écoulement convectif à partir d'un état stationnaire stable à un état non-stationnaire (instable) peut se produire à des paramètres de contrôle critiques associés avec la technique de croissance de cristal concernée.

Le présent chapitre se focalise sur le phénomène de perte de symétrie et transition d'un état stationnaire symétrique à un état non-symétrique dans un fluide à faible nombre de Prandtl ($Pr=0,01$). L'effet d'un champ magnétique horizontalement appliqué est aussi considéré dans le but de stabiliser le champ d'écoulement en retardant la bifurcation. La dépendance du nombre de Rayleigh critique Ra_{cr} sur le nombre de Hartmann (Ha) est examinée à travers une étude paramétrique. Le diagramme de la stabilité pour $Ra_{cr}(Ha)$ correspondant à la transition d'un écoulement symétrique à non-symétrique est donné.

Les résultats de simulation montrent que dans l'absence d'un champ magnétique appliqué et à des valeurs relativement petites du nombre de Rayleigh (Ra), un champ d'écoulement stationnaire et symétrique est observé. Les écoulements classiques de type spiral typiquement caractérisant les effets 3-D (dans la 3ème direction) sont aussi identifiés. Lorsque le nombre Ra augmente à sa première valeur critique, l'écoulement se bifurque d'un état stationnaire symétrique à un état non-symétrique. La perte dans la symétrie se produit dans le mi-plan

vertical et dans le plan diagonal. Ce qui est dû à la symétrie de cette configuration dans le mi-plan vertical et le plan diagonal.

Un champ magnétique statique et uniforme appliqué horizontalement est également considéré pour examiner son effet sur la stabilisation de l'écoulement fluide dans la fonte. Les simulations montrent aussi que la première valeur critique pour laquelle la symétrie disparaît augmente avec l'augmentation du niveau (Ha) de champ magnétique. Les résultats de simulation indiquent qu'un champ magnétique horizontal peut être utilisé pour supprimer la convection et par conséquent retarder la perte de symétrie se produisant à des valeurs critiques des paramètres de contrôle.

Remarque 5.1. Pour illustrer davantage l'effet tridimensionnel (3-D) sur les écoulements de convection et montrer, aussi, le potentiel des champs magnétiques appliqués dans la stabilisation de l'écoulement avec transfert de chaleur par convection le présent chapitre est réalisé pour essayer d'accomplir ce but. Cependant, vu la difficulté de problème à changement de phase, la simulation est faite seulement au cas de l'écoulement avec transfert de chaleur par convection sans changement de phase (et l'équation de conservation de soluté ne sera pas considérée ce qui signifie que le cas présent correspond à un processus où le coefficient de dilution solutal est pris égale à zéro).

5.2 Motivations

Le présent chapitre analyse numériquement le caractère 3-D de fluides à faible Pr et focalise sur le phénomène d'instabilité de perte de symétrie « symmetry breaking » et la transition à partir d'un écoulement stationnaire stable de structure symétrique à un écoulement de structure non-symétrique dans une configuration 3-D, où, l'écoulement est dirigé par les gradients de température vertical et horizontal (Fig.5.1). Par conséquent, le comportement de fluide uniformément-chauffé de dessous tombe dans la catégorie de problème de Rayleigh-Bénard alors que le comportement de fluide chauffé à partir des deux côtés (latéraux) dans la catégorie de problème de cavité latéralement chauffée. Le comportement de fluide dans le dernier cas est plus complexe.

L'objectif principal du présent chapitre est d'entreprendre une analyse 3-D complète pour ces systèmes.

La première motivation de conduire ce chapitre est le peu d'études numériques 3-D réalisées pour ce cas; principalement dû au prix extrêmement élevé en temps de calcul nécessaire pour effectuer de telles simulations (par exemple voir les études récentes dans [Bennacer et al. (2006) ; Sheu et al. (2007)]. [Bennacer et al. 2006] ont réalisé des calculs de simulation numérique 3-D d'écoulement convectif dans la même configuration (que celle considérée ici) et ils ont examiné la bifurcation perte de symétrie dans l'écoulement fluide et aux états transitoires. L'analyse de perte de symétrie est fondée sur la distribution du taux de transfert de chaleur. Il est montré que de telles pertes de symétrie puissent être modifiées par la variation de la « hauteur de la cavité ». [Sheu et al 2007] ont aussi considéré cette configuration.

La seconde motivation est de rechercher les limitations des modèles 2-D dans la prédiction de la transition d'état stationnaire stable à l'état oscillatoire. Ainsi il est rapporté dans [Afrid & Zebib (1990)] que la largeur de la cavité a un effet important sur la transition à un état de convection instationnaire (instable). Il a été trouvé que la réduction de largeur de deux à un conduit à un nombre critique (Gr_{cr} par conséquent Ra_{cr}) élevé, ce qui fait que les résultats des modèles 2-D sont totalement inadéquats. L'autre limitation de modèles 2-D est due au fait que les modèles 2-D ne peuvent pas représenter proprement les champs observés dans les cavités avec une largeur finie. Par exemple comme il est rapporté dans [Hung & Andereck, (1988)], les études 2-D ne parviennent pas de prédire l'écoulement unicellulaire observé expérimentalement et sous-estiment la valeur critique Gr , spécialement si la largeur de la cavité est relativement petite. En outre, les modèles 2-D échouent dans la prédiction des caractéristiques de l'écoulement qui ont été confirmées expérimentalement. Par conséquent, les comparaisons quantitatives du paramètre de contrôle à la transition (à sa valeur critique) aussi bien que le modèle de mouvement observé peut être accomplies à travers des simulations entièrement 3D.

En outre, le présent chapitre considère aussi la possibilité de stabilisation de l'écoulement convectif au moyen d'un champ magnétique, statique et uniforme, appliqué horizontalement.

Une étude paramétrique est également entreprise pour la stabilisation de l'écoulement de fluide sous de variétés d'intensités de champ magnétique (différents Ha). Le diagramme de stabilité, approximatif, correspondant, montrant la dépendance du nombre de Rayleigh critique (Ra_{cr}) sur Ha , est présenté.

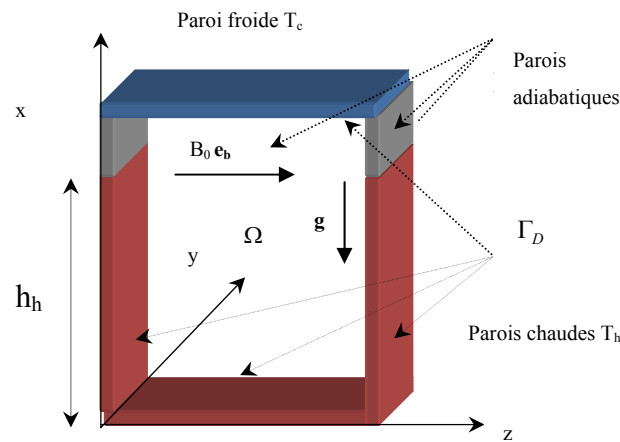


Figure 5.1 : la géométrie et les conditions aux limites du domaine simulé (configuration étudiée par [Bennacer et al. 2006]).

5.3 Formulation mathématique et résolution numérique du problème

Considérons la cavité de la Fig.5.1 [Bennacer et al. 2006] qui est remplie d'un liquide métallique conducteur électrique à faible nombre de Prandtl ($Pr = 0,01$). La hauteur, de cavité, est désignée par L_x . La longueur et la largeur (*width*) de la cavité sont L_z et L_y , respectivement (avec : $L_x = L_y = L_z = 100$ mm). L_z est pris l'échelle de longueur pour le problème.

Le liquide dans la cavité est chauffé en dessous et refroidis par le haut. Les parois verticales sont chauffées vers le haut à la hauteur adimensionnelle H ($H = h_h/L_z = 0,75$) et sont adiabatiques pour la partie restante $(1 - H)$. Les parois frontale et arrière sont considérées adiabatiques. Les parois chauffées sont maintenues à une température (T_h), qui correspond à la température du four dans un système de croissance cristalline. La paroi froide en haut est maintenue à une température inférieure (T_c), qui correspond à la température du front de solidification. En outre il est supposé qu'aucun flux de chaleur n'est imposé. Les propriétés thermophysiques (conductivité thermique k , viscosité dynamique μ , diffusivité thermique α) du liquide conducteur sont prises comme des constantes. Il est supposé que l'écoulement est

Newtonien, laminaire et incompressible avec aucune dissipation visqueuse, et l'approximation de Boussinesq est supposée.

5.3.1 Les équations de conservation décrivant l'écoulement avec transfert de chaleur

Remarque 5.3. Comme la résolution dans le présent chapitre est effectuée au moyen du logiciel de calcul commercial [COMSOL 3.5 (2008)] en éléments finis. Nous adoptons ici les notations utilisées en éléments finis et aussi les équations de conservation sont mises sous forme conformément avec celles disponible dans le logiciel.

Considérons le domaine spatial $\Omega_t \subset R^{n_{sd}}$ (Fig.5.1) au temps $t \in (0, t_{\max})$, où n_{sd} est le nombre de dimensions de l'espace, Γ_t est la limite (frontière) de Ω_t . La partie de la limite pour laquelle la température est prescrite (condition aux limites essentielle) est désignée par $(\Gamma_t)_D$. Les conditions aux limites de Neumann (naturelles) sont imposées à la partie restante de la limite (frontière) $(\Gamma_t)_N$.

Les équations de conservation décrivant l'écoulement convectif dans la cavité sont les suivantes :

5.3.1.1 Équations conservation de masse et quantité de mouvement

Nous considérons la formulation vitesse–pression des équations de Navier–stokes dirigeant l'écoulement incompressible en régime transitoire [Donea & Huerta, 2003] :

Continuité

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \Omega_t \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.1)$$

Quantité de mouvement

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{F} \quad \text{sur } \Omega_t \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.2)$$

où ρ , $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$ sont la masse volumique, le vecteur vitesse et les forces de volume externes, respectivement, et $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de contrainte donné par

$$\boldsymbol{\sigma}(p, \mathbf{u}) = -p\mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$$

avec le tenseur de taux de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T]$

où $\mathbf{x}(x, y, z)$ est le vecteur position, p la pression et \mathbf{I} le tenseur identité.

Pour le champ de vitesse d'écoulement la condition de Dirichlet homogène (pas de glissement) est supposée sur la cavité entière, par conséquent :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{sur } (\Gamma_t)_D \cup (\Gamma_t)_N = \Gamma_t \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.3)$$

Pour laquelle peut s'écrire

$$\mathbf{u}(0, y, z, t) = \mathbf{u}(L_x, y, z, t) = \mathbf{u}(x, 0, z, t) = \mathbf{u}(x, L_y, z, t) = \mathbf{u}(x, y, 0, t) = \mathbf{u}(x, y, L_z, t) = 0$$

Comme une condition initiale à $t = 0$, le champ de vitesse $\mathbf{u}_0(\mathbf{x}) = 0$ est spécifié sur le domaine Ω_t par

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \Omega_0 \quad (5.4)$$

5.3.1.2 Équation de conservation d'énergie

Le bilan d'énergie sur le domaine Ω_t avec sa frontière Γ_t conduit à l'équation de convection-diffusion de la chaleur suivante, où ni génération (chauffage par effet Joule) ni absorption de chaleur ne sont considérées

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\alpha \nabla T) = 0 \quad \text{sur } \Omega_t \quad \text{et } \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.5)$$

où T représente la température.

Les conditions aux limites thermiques associées avec l'équation (5.5) sont

$$T(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t) \quad \text{sur } (\Gamma_t)_D \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad \text{et } \mathbf{n} \cdot \alpha \nabla T = 0 \quad \text{sur } (\Gamma_t)_N \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.6)$$

où \mathbf{n} est normale extérieure à la frontière (limite) et $g(\mathbf{x}, t)$ est une température spécifiée sur la frontière. Les conditions aux limites de température peuvent être écrites comme :

$$\begin{aligned}
 T(0, y, z, t) &= T_h, \quad T(L_x, y, z, t) = T_c, \\
 T(x, y, 0, t) &= T(x, y, L_z, t) = T_h && \text{for } 0 < x < h_h, \\
 (\partial T / \partial z)_{(x, y, 0, t)} &= (\partial T / \partial z)_{(x, y, L_z, t)} = 0 && \text{for } h_h < x < L_x, \text{ and} \\
 (\partial T / \partial y)_{(x, 0, z, t)} &= (\partial T / \partial y)_{(x, L_y, z, t)} = 0
 \end{aligned}$$

La condition $T(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x}) = T_h$ sur Ω_0 est spécifiée comme une condition initiale.

5.3.1.3 Équation de conservation de l'espèce (soluté)

La conservation de soluté (espèce chimique) sur le domaine Ω_t avec sa frontière Γ_t , où aucune source n'est considérée s'écrit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (D \nabla C) = 0 \text{ sur } \Omega_t \text{ et } \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.5)$$

où C représente la concentration.

Les conditions aux limites solutales associées avec l'équation (5.5) sont

$$C(\mathbf{x}, t) = g_c(\mathbf{x}, t) \text{ sur } (\Gamma_t)_D, \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \text{ et } \mathbf{n} \cdot D \nabla C = 0 \text{ sur } (\Gamma_t)_N, \quad \forall t \in (0, t_{\max}) \quad (5.6)$$

où \mathbf{n} est normale extérieure à la frontière (limite) et $g_c(\mathbf{x}, t)$ est une concentration spécifiée sur la frontière. Les conditions aux limites de concentration telles que les parois sont température peuvent être écrites comme [Bennacer et al. 2006] :

$$\begin{aligned}
 C(0, y, z, t) &= C_h, \quad C(L_x, y, z, t) = C_c, \\
 C(x, y, 0, t) &= C(x, y, L_z, t) = C_h && \text{for } 0 < x < h_h, \\
 (\partial C / \partial z)_{(x, y, 0, t)} &= (\partial C / \partial z)_{(x, y, L_z, t)} = 0 && \text{for } h_h < x < L_x, \text{ and}
 \end{aligned}$$

$$(\partial C / \partial y)_{(x,0,z,t)} = (\partial C / \partial y)_{(x,L_y,z,t)} = 0$$

La condition $C(\mathbf{x},0) = C_0(\mathbf{x}) = C_h$ sur Ω_0 est spécifiée comme une condition initiale.

2.1.3 Bilan de charge électrique et force magnétique de volume

La cavité est soumise à un champ magnétique uniforme appliqué horizontalement $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_b$ avec l'intensité de champ de B_0 comme il est montré en Fig. 5.1. Pour de liquides métalliques, la force magnétique de volume \mathbf{F}_L agissant sur les points du liquide (domaine Ω_l) peut être prise simplement comme

$$\mathbf{F}_L = \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (5.7)$$

où la contribution de la charge électrique est négligée, et la densité de courant \mathbf{J} est donnée par la loi d'Ohm par

$$\mathbf{J} = \sigma_e (-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (5.8)$$

La densité de courant \mathbf{J} est régie par la conservation de courant

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (5.9)$$

avec l'hypothèse que les champs induits dus au champ magnétique appliqué sont négligeables. Celle-ci est une bonne approximation pour les liquides métalliques depuis que les nombres de Reynolds magnétique sont suffisamment petits [Yildiz & Dost, (2007) ; Moreau 1999]. Dans les équations précédentes ϕ est le potentiel électrique et σ_e la conductivité électrique de la phase liquide. Dans ce cas la force magnétique de volume devient

$$\mathbf{F}_L = \sigma_e (-\nabla \phi + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \quad (5.10)$$

La combinaison de (5.8) et (5.9) conduit à l'équation de Poisson suivante

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = B_0 \mathbf{e}_b \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) \quad (5.11)$$

qui régie la distribution du potentiel électrique.

Pour la fonction de potentiel électrique, $\phi(\mathbf{x}, t)$, les conditions de parois isolées sont utilisées sur la totalité des frontières de la cavité :

$$\nabla \phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_t \times (0, t_{\max})$$

Comme une condition initiale, la fonction de potentiel prend la valeur de $\Phi(\mathbf{x}, 0) = \Phi_0(\mathbf{x}) = 0$ sur Ω_0 .

5.3.2 Les formes adimensionnelles des équations de conservation décrivant l'écoulement

Les variables adimensionnelles sont adoptées (pour les coordonnées, composantes de vitesse, pression, temps, température et potentiel électrique, respectivement) :

$$X = x/L_z, \quad Y = y/L_z, \quad Z = z/L_z; \quad U = u L_z / \alpha; \quad V = v L_z / \alpha; \quad W = w L_z / \alpha; \quad P = p L_z^2 / \rho_l \alpha^2; \\ \tau = t \alpha / L_z^2; \quad \theta = (T - T_c) / \Delta T; \quad \mathcal{G} = (C - C_c) / \Delta C \quad \text{et} \quad \Phi = \phi / \alpha B_0.$$

où ρ_l est la masse volumique de fluide, (u, v, w) sont les composantes de vitesse et $\Delta T = (T_h - T_c)$ est la différence caractéristique de température. Alors que $\Delta C = (C_h - C_c)$ et la différence caractéristique de concentration.

Avec les hypothèses et définitions précédentes, les formes adimensionnelles des équations de conservation gouvernant l'écoulement et transfert de chaleur (équations de continuité, quantité de mouvement, énergie et potentiel électrique) dans le domaine adimensionnel $\Omega_\tau \times (0, \tau_{\max})$ peuvent être écrites, respectivement comme suit :

Continuité

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \tag{5.12}$$

Quantité de mouvement

$$\partial \mathbf{U} / \partial \tau + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} = -\nabla P + \text{Pr} \nabla^2 \mathbf{U} - \text{Pr} Ra \theta \mathbf{e}_g + \text{Pr} Ha^2 [-\nabla \Phi + \mathbf{U} \times \mathbf{e}_B] \times \mathbf{e}_B \tag{5.13}$$

qui s'exprime telle que :

$$\partial \mathbf{U} / \partial \tau + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\text{Pr} Ra \theta \mathbf{e}_g + \text{Pr} Ha^2 [-\nabla \Phi + \mathbf{U} \times \mathbf{e}_B] \times \mathbf{e}_B$$

où $\boldsymbol{\sigma}(P, \mathbf{U}) = -P\mathbf{I} + 2\text{Pr} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{U})$; et avec $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{U}) = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T]$,

Énergie

$$\partial \theta / \partial \tau + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \theta = \nabla^2 \theta \quad (5.14)$$

Espèce

$$\partial \mathcal{G} / \partial \tau + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathcal{G} = \nabla^2 \mathcal{G} \quad (5.15)$$

Potentiel électrique

$$\nabla^2 \Phi = \nabla \cdot (\mathbf{U} \times \mathbf{B}) = Ha^2 \text{Pr} \mathbf{e}_B \cdot (\nabla \times \mathbf{U}) \quad (5.16)$$

avec $\mathbf{U}(\mathbf{X}, \tau)$ est le vecteur vitesse adimensionnel, $\text{Pr} = \nu / \alpha$ est le nombre de Prandtl, ν viscosité cinématique, $Ra = g\beta_T \Delta T L_x / \nu \alpha$ est le nombre de Rayleigh thermique, g l'accélération de la gravité, β_T le coefficient de dilatation thermique, \mathbf{e}_g est le vecteur unité dans la direction de la gravité et \mathbf{e}_B est le vecteur unité dans la direction du champ magnétique.

Comme il est mentionné auparavant, la condition aux limites de vitesse d'écoulement est de type sans-glissement sur les frontières entières du domaine $\mathbf{U}(0, Y, Z, \tau) = \mathbf{U}(1, Y, Z, \tau) = \mathbf{U}(X, 0, Z, \tau) = \mathbf{U}(X, 1, Z, \tau) = \mathbf{U}(X, Y, 0, \tau) = \mathbf{U}(X, Y, 1, \tau) = \mathbf{0}$ sur Γ_τ , $\forall \tau \in (0, \tau_{\max})$.

Semblable les conditions aux limites de température adimensionnelle sont :

$$\theta(0, Y, Z, \tau) = 1, \quad \theta(1, Y, Z, \tau) = 0,$$

$$\theta(X, Y, 0, \tau) = \theta(X, Y, 1, \tau) = 1 \quad \text{pour } 0 < X < H,$$

$$(\partial \theta / \partial Z)_{(X, Y, 0, \tau)} = (\partial \theta / \partial Z)_{(X, Y, 1, \tau)} = 0 \quad \text{pour } H < X < 1, \text{ et}$$

$$(\partial\theta/\partial Y)_{(X,0,Z,\tau)} = (\partial\theta/\partial Y)_{(X,1,Z,\tau)} = 0$$

Les conditions aux limites de concentration adimensionnelle de soluté, [Bennacer et al 2006] sont :

$$\begin{aligned} \vartheta(0, Y, Z, \tau) = 1, \quad \vartheta(1, Y, Z, \tau) = 0, \quad (\partial\vartheta/\partial Z)_{(X,Y,0,\tau)} = (\partial\vartheta/\partial Z)_{(X,Y,1,\tau)} = 0 \\ (\partial\vartheta/\partial Y)_{(X,0,Z,\tau)} = (\partial\vartheta/\partial Y)_{(X,1,Z,\tau)} = 0 \end{aligned}$$

Les conditions aux limites de la fonction de potentiel électrique

$$\nabla\Phi(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_\tau \times (0, \tau_{\max})$$

Les conditions initiales sur Ω_0 pour toutes les variables dépendantes adimensionnelles du problème sont données par

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}, 0) = 0 ; T(\mathbf{X}, 0) = 1 ; \text{et } \Phi(\mathbf{X}, 0) = 0$$

Nous poursuivons la démarche dans [Bennacer et al. (2006)], ici, et nous prenons un rapport de flottaison $N_{\text{boy}}=0$.

2.3 Résolution numérique

2.3.1 La méthode en éléments finis GLS (Galerkin/Least-Square) Stabilisée pour l'écoulement incompressible instationnaire

Le calcul des écoulements incompressibles par éléments finis peut introduire deux sources principales d'instabilités numériques potentielles associées avec la formulation classique standard de Galerkin. La première est due à la présence des termes de convection dans les équations de conservation et peuvent générer des oscillations dites « *spurious node-to-node* » principalement dans le champ de vitesse. La seconde source d'instabilité est due à l'utilisation inappropriée de combinaisons de fonctions d'interpolation pour représenter les champs de vitesse et pression. Ces instabilités apparaissent usuellement comme des oscillations principalement dans le champ de pression [Tezduyar, 1992 ; Mittal et al. 1991 ; Donea & Huerta, 2003].

Dans le présent chapitre, nous utilisons la formulation de stabilisation en éléments finis dite GLS « *stabilized Galerkin/Least-Square (GLS)* » disponible au sein du logiciel COMSOL dans le but d'éviter ces types d'instabilités numériques. La description de cette formulation stabilisée peut être trouvée dans [Tezduyar, 1992 ; Mittal et al. 1991 ; Donea & Huerta, 2003]. La formulation utilisant des **éléments interpolation d'ordre égale pour la vitesse et pression** proposée par Tezduyar *et al.* [Tezduyar, 1992 ; Tezduyar et al. 1991] est adoptée, ici, pour la simulation d'écoulement fluide incompressible et elle est aussi étendue pour traiter l'écoulement 3-D piloté par la combinaison de forces de flottabilité et magnétique.

Pour plus de détails de la méthode voir les références et l'article [Mechighel et al. 2009b].

2.3.2 Formulation stabilisé (SUPG) ligne de courant amont (Upwind) Petrov-Galerkin pour l'équation d'advection – diffusion

Les résolutions de problèmes de transport de chaleur dominé par convection par la méthode de Galerkin sont souvent dégradées par des oscillations « *spurious node-to-node* » [Donea & Huerta, 2003]. Celles-ci peuvent être supprimées par un raffinement sévère du maillage (et un très petit pas de temps) ce qui affaiblie l'utilisation pratique de la méthode. Par conséquent, pour l'équation de transfert de chaleur nous adoptons la méthode de stabilisation en éléments finie « SUPG », disponible dans COMSOL, et dans [Donea & Huerta (2003) ; Ed Akin & Tezduyar (2004) ; Zabaras & Samanta, (2004)].

2.3.3 Formulation FEM standard de Galerkin pour l'équation de charge électrique

La formulation classique de Galerkin est utilisée pour l'équation (5.16).

5.4. Résultats et discussions

Dans le but d'examiner l'existence de bifurcation d'écoulement à partir d'état symétrique permanent stable à l'état non-symétrique, des calculs de champ d'écoulement ont été effectués dans l'intervalle $1 \leq Ra \leq 10^5$, avec **un pas de 10**. Chaque calcul pour une valeur de Ra est réalisé en prenant le calcul de la valeur précédente comme un vecteur initial. Bien que l'existence d'autres types de bifurcations dans cet intervalle de valeurs de Ra, comme celles

reportées dans [Sheu et al (2007)], est observée, nous sommes intéressés uniquement par le premier type de bifurcation, qui est de type perte de symétrie (*symmetry breaking*). La même procédure est suivie dans l'étude de l'effet du champ magnétique externe appliqué. Mais dans ce cas l'intervalle Ra est très large puisque la bifurcation (*symmetry breaking*) est retardée par le champ magnétique appliqué.

5.4.1 La validation de modèle

Les résultats de simulation obtenus dans la présente étude sont comparés avec ceux de [Bennacer et al. 2006] et [Sheu et al (2007)], qui ont étudié une géométrie semblable pour différentes valeurs de Ra . Les résultats sont présentés en termes de valeurs du nombre de Nusselt moyen (Nu_{av}) aux surfaces du haut et bas et tabulés dans le Tableau 5.1. Les résultats sont en bon accord avec (l'erreur relative maximale est trouvée à être inférieure à 4%).

Les résultats en termes de distributions de nombre de Nusselt local (Nu) (qui représente le taux de transfert de chaleur local) à la paroi de bas pour $Ra = 10$ et 2000 sont comparés avec les résultats de [Bennacer et al. 2006] et sont montrés en Figs. 5.2 (a, b), respectivement. Il est observé que les distributions de Nu local calculées, sur la surface du bas, sont en bon accord avec les résultats en [Bennacer et al. 2006]. Les régions symétriques en Figs. 2a et b montrent une augmentation d'intensité d'écoulement avec le nombre Ra .

Les résultats en termes de la première valeur critique de Rayleigh (correspondant à la première valeur critique approximativement pour la bifurcation qui représente la transition du comportement de système à partir d'une solution d'état stationnaire symétrique basique à celle non-symétrique) sont aussi en bon accord avec ceux dans [Bennacer et al. 2006]. La petite différence entre valeur calculée dans la présente étude et celle dans [Sheu et al (2007)] nous pensons est due au type de maillage (maillage uniforme), et sa faible résolution, utilisé dans [Sheu et al (2007)]. Depuis deux méthodes numériques sont utilisées ici et dans [Bennacer et al. 2006 ; Sheu et al (2007)], cette bifurcation n'a pas une origine numérique mais une origine physique.

D'autre validation du modèle présent est réalisée au moyen des modèles d'écoulement à des valeurs larges de Ra . Par exemple, les projections iso-contours de la composante de vitesse dans la direction X , à $Ra = 10^4$, sont présentées en Figs. 5.3, sur différents plans de

section transversal ($Y = Z = 0,3$) et sur le plan diagonal; joignant à $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 1, 1)$. Le champ faible calculé montre une structure permanente non-symétrique. Les résultats prédits ici sont très proches de ceux obtenus dans [Sheu et al (2007)] (Figs. 5.3) qui fournit une validation supplémentaire du modèle présent.

5.4.2 Description de régimes d'écoulement convectif dirigé par la force de flottabilité thermique sans la présence d'un champ magnétique

Écoulement symétrique permanent (stable).

Le seul paramètre de contrôle dans ce cas est le nombre de Rayleigh Ra . Pour de petites valeurs de (Ra) , la force de flottabilité résultante des surfaces chauffées (bas et les deux surfaces latérales) est équilibrée par la viscosité du fluide, et par conséquent la chaleur se *travels* à partir de section chaude vers la surface du haut principalement par conduction. Les flux de chaleur convectif et conductif, le long de lignes traversant le centre de la cavité dans les directions X, Y et Z sont présentés en Figure 5.4. Il est montré que pour des valeurs Ra modérées (ex. $Ra = 100$) le transfert de chaleur est principalement conductif avec une petite contribution de convection (Figs. 5.4a), due à l'écoulement convectif faible résulté à ces valeurs modérées. À des valeurs de Ra relativement élevées ($Ra = 2800$), le transport convectif est plus important (Fig. 5.4b). La convection est due au mouvement de fluide induit par le gradient de température appliqué sur les surfaces latéralement chauffées. Ce qui est parce que le fluide est chauffé à partir de côté alors le champ gravitationnel est perpendiculaire au gradient de la masse volumique, et ainsi la convection se survient à chaque valeur du nombre Ra . Alors que, pour le fluide chauffé de dessous, le mouvement de fluide induit se survient seulement si les conditions critiques de l'initiation de convection de Rayleigh-Bénard sont excédées (c'est-à-dire si Ra est égal ou supérieur que la valeur critique).

Les isothermes pour ($Ra = 100$ et 2800) sont présentées sur la Fig. 5.5. Pour chaque Ra , il est montré le refroidissement sur la surface du haut, et le chauffage sur la surface du bas et les deux surfaces latérales, et les surfaces adiabatiques.

La structure d'écoulement calculée pour cette intervalle de Ra consiste de deux cellules principales de convection en rotation opposée à l'intérieure de la cavité, comme il est montré en Fig. 5.6 (a, b). Qualitativement, pour les cas de $Ra=100$, et 2800 , les champs d'écoulement stationnaires sont semblables (voir Fig.5.6a). Les champs d'écoulement sont 3D et

bicellulaire dans l'intervalle entier des nombres de Ra qui donnent augmentation aux champs d'écoulements permanent ($Ra < Ra_{cr}$). La similarité est mieux observée dans les diagrammes de la Fig. 5.6b qui présentent les projections de champ de vecteurs de vitesse au plan de symétrie ($Y = 0,5$). Comme il est montré en Fig. 5.6, il y en a deux cellules rotatives opposées les une à l'autre dans chaque plan depuis que le fluide chaud monte le long des parois latérales chauffées vers la région supérieure qui est adiabatique de la cavité ($0,75 < X < 1$). Dans cette région supérieure, le fluide circule et déplace (moves) à partir des régions chaudes vers le milieu latéral de la cavité ($Z = 0,5$), le long duquel, le fluide se déplace vers le bas ou descend (moves down) vers la surface de dessous, et la grandeur de vitesse d'écoulement augmente. Ce mouvement apporte le fluide froid à partir du haut à la paroi du bas à travers le centre de la cavité. La grandeur maximale de la vitesse d'écoulement est observée dans la région proche du milieu de la cavité. Dans chaque cellule, proche de la paroi chaude de dessous de la cavité, le fluide circule et se déplace vers les parois latérales chaudes, et la vitesse de l'écoulement *rend faible*, ce qui signifie que la convection de Rayleigh-Bénard n'a pas été initiée pour cet intervalle de Ra . L'écoulement résultant pour cet intervalle de Ra montre une structure d'écoulement spiral faible, semblable à une structure d'écoulement 2D dans une cavité profonde [El Ganaoui, M. & Bontoux, P. (1998)].

Dans la présente géométrie, l'écoulement fluide est entendu à être symétrique par rapport aux plans $Z = 0,5$ et $Y = 0,5$ (correspondant aux plans de symétrie de la présente cavité) (voir les vecteurs de vitesse en Figs. 5.7 (b) et la composante U de vitesse dans la direction X , tracée dans le plan $X=0,5$ en Fig. 5.8 (a), qui aussi a une symétrie par rapport au plan diagonal joignant les points à $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(1, 1, 1)$ (Fig. 5.8b).

Pour ce premier intervalle, l'augmentation dans Ra change l'intensité d'écoulement avec un effet non significatif sur le transfert de chaleur entier (qui est représenté par le nombre de Nusselt moyen Nu_{av} en Tableaux 5.1 et 5.2). Les régimes symétriques stationnaires résultant montrent augmentations dans l'intensité d'écoulement avec Ra (Tableau 5.3). En addition, l'écoulement montre une nature 3-D de plus en plus notable lorsque le nombre Ra augmente. À un nombre élevé Ra (dans cette intervalle), les effets 3-D observés peuvent conduire à quelques instationnarités (unsteadiness) d'écoulement [Durst et al. 1974 ; Fearn et al. 1990]. Nous notons aussi un écoulement relativement faible dans la cavité dans la direction de la largeur (c'est-à-dire la direction Y) (Tableau 5.3). Cette augmentation dans l'intensité d'écoulement induit un taux élevé de transfert de chaleur local Nu dans la ligne de centre de la

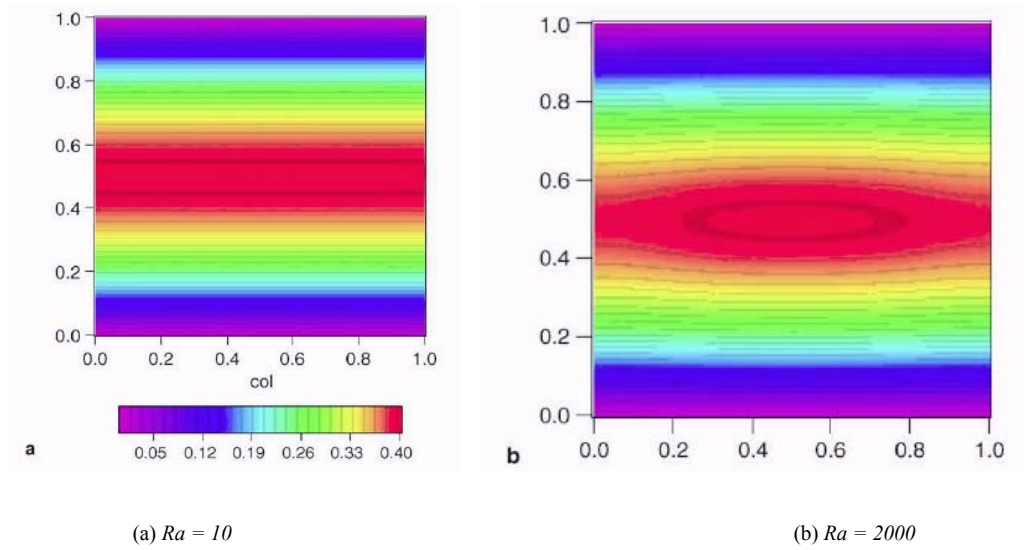
cavité due à l'arrivée du fluide froid. Le maximum du taux de transfert local est localisé au centre de la surface de dessous comme il est représenté en (Figs. 5.8 (a-c)).

Tableau 5.1: Les résultats de comparaisons

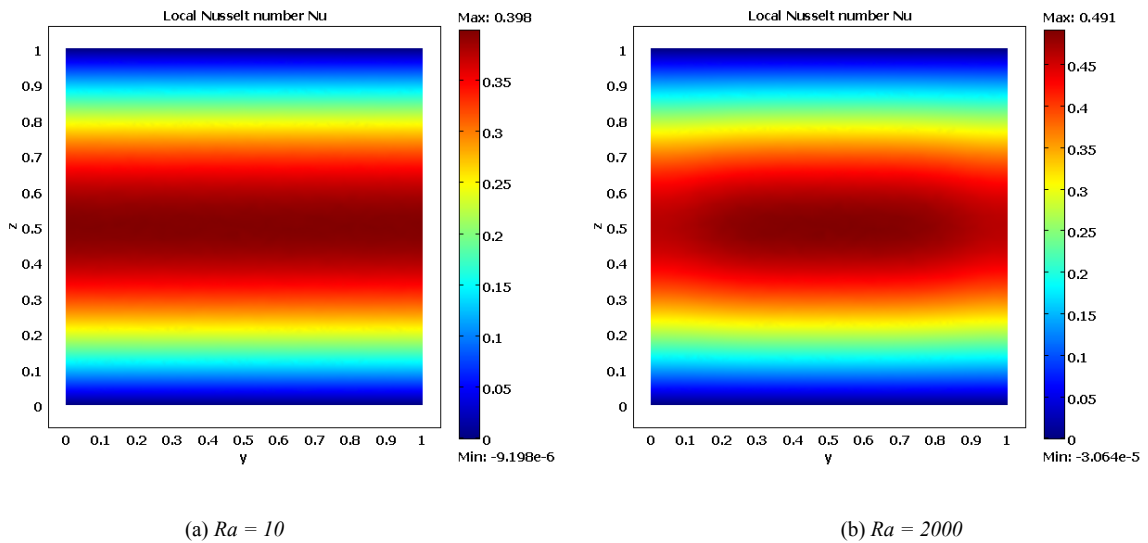
	Ra	10	1000	2000	3000	4000
Surface du Haut	Présente étude	-2.1571	-2.1593	-2.16468	-2.17168	-2.1783
	Bennacer et al.	-2.10	-2.12	-2.13	-2.14	-2.15
	Sheu et al.	-	-2.1077	-2.1134	-2.1308	-
Surface du bas	Présente étude	0.2546	0.2769	0.30092	0.323164	0.3352
	Bennacer et al.	0.258	0.279	0.304	0.310	0.337
	Sheu et al.	-	0.28061	0.30438	0.31148	-
Valeur approx. de Ra_{cr}	Présente étude	Environ 2800				
	Bennacer et al.	<3000				
	Sheu et al.	3040				
Méthode numérique	Présente étude	éléments finis Stabilisée (GLS FEM) avec un maillage non-uniforme (en utilisant COMSOL Multi-physique)				
	Bennacer et al.	Volumes finis avec un maillage non-uniforme de 82 x 82 x 82				
	Sheu et al.	Volumes finis avec un maillage uniforme de 41 x 41 x 41				

Tableau 5.2: Nombres de Nusselt moyens obtenus pour différentes valeurs de Ra

Ra	100	2500	2750	2800
Surface de haut	-2.15716	-2.16815	-2.17003	-2.17041
Surface de bas	0.2565	0.31311	0.319222	0.320044



Résultats dans Bennacer et al.



Résultats de la présente étude

Figure 5.2: Comparaison entre les résultats présents et ceux de [Bennacer et al. 2006] en termes de distributions locales du nombre Nusselt (Nu) sur la surface inférieure chauffée ($X = 0$) pour les conditions (a) $Pr = 0,001$ et $Ra = 10$, et (b) $Pr = 0,001$ et $Ra = 2000$

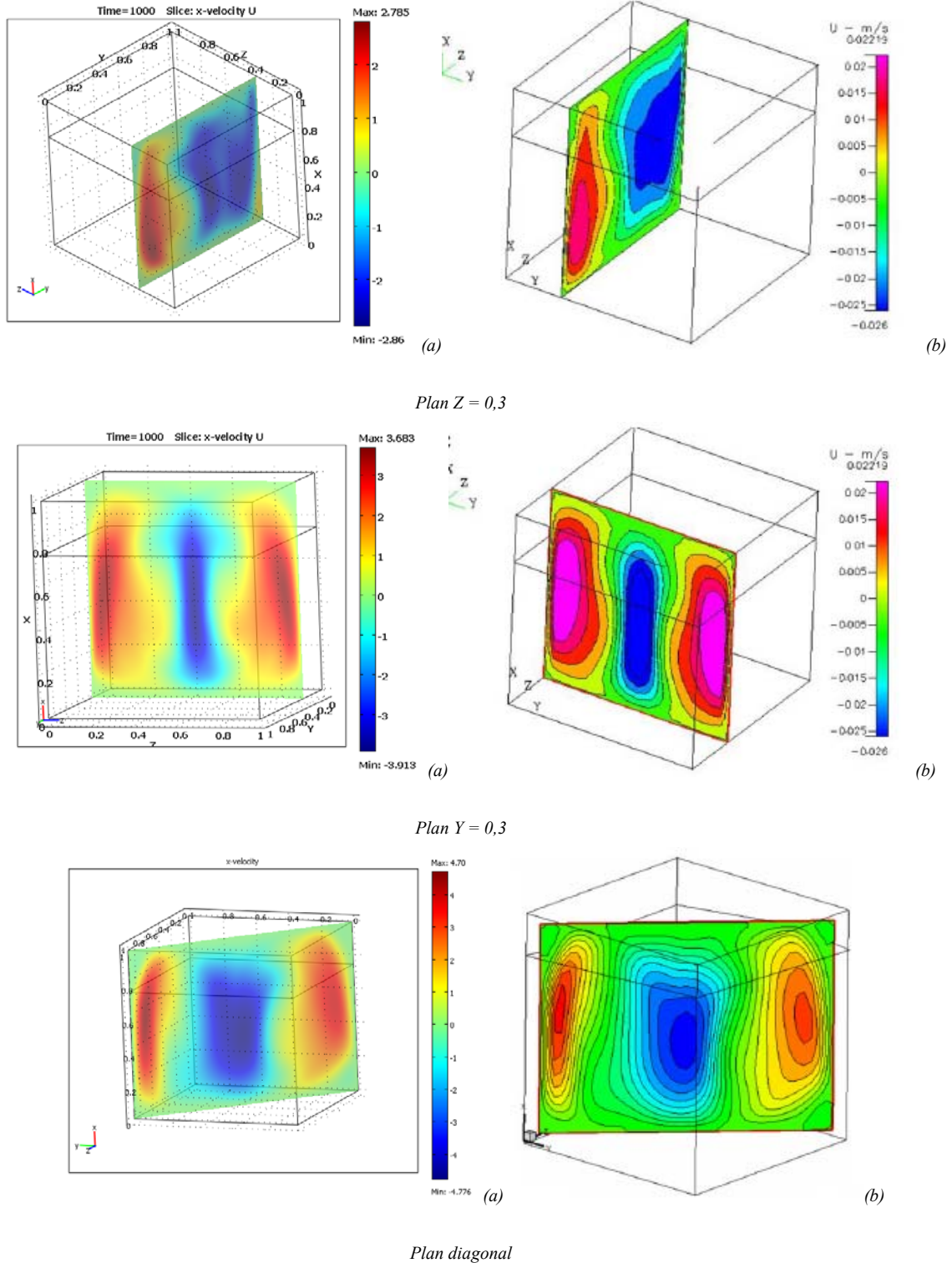


Figure 5.3: Les iso-contours de la vitesse U aux différents plans de coupe obtenus à de large Ra ($Ra = 10^4$) (la symétrie reste par rapport au mi-plan $Z = 0,5$, en revanche il y en a pas de symétrie par rapport au mi-plan $Y = 0,5$ et au plan diagonal). Résultats (a) de la présente étude et (b) dans [Sheu et al. 2007] (notons que les axes Z, Y dans cette réf. correspond aux axes Y, Z dans la présente étude).

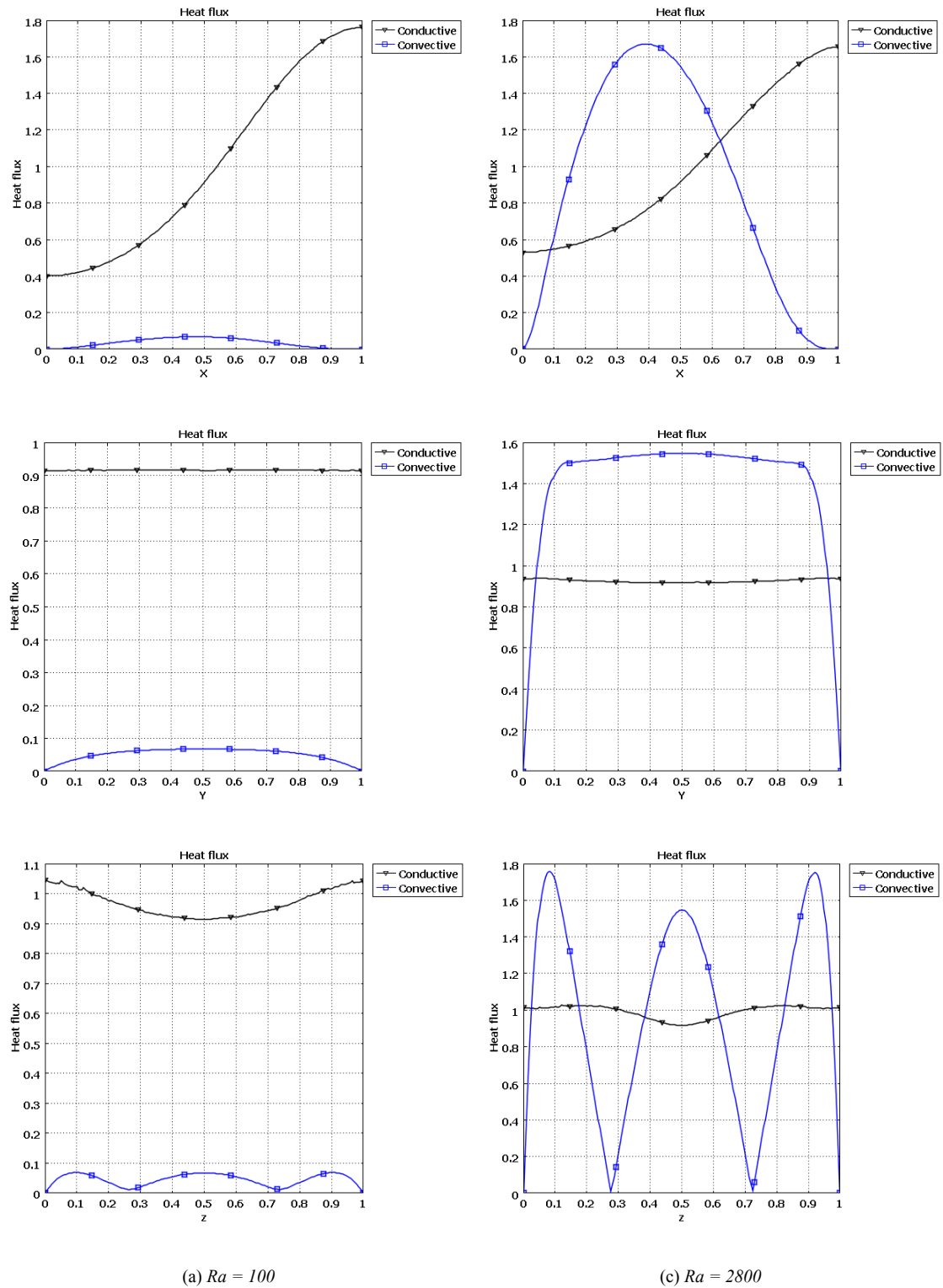


Fig. 5.4 : Flux de chaleur le long des lignes traversant le centre de la cavité dans les directions X, Y, Z, respectivement, pour $Ra=100$ and $Ra=2800$.

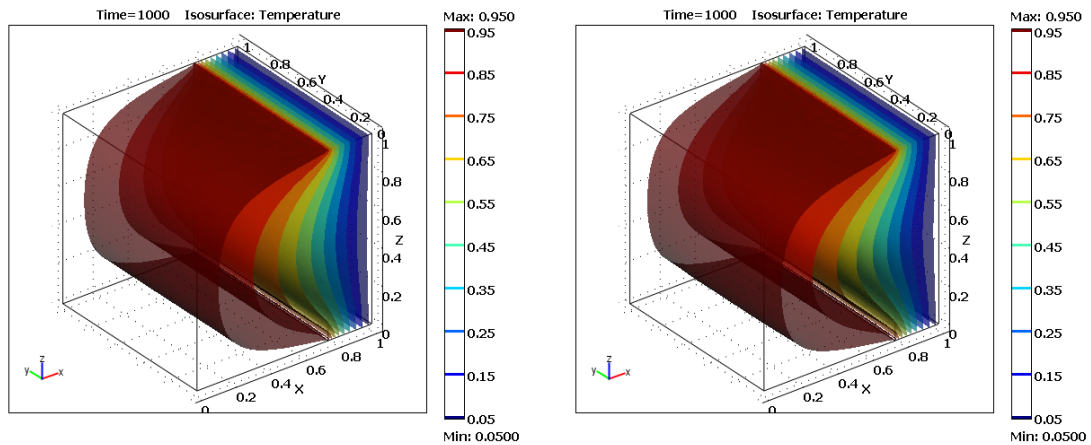
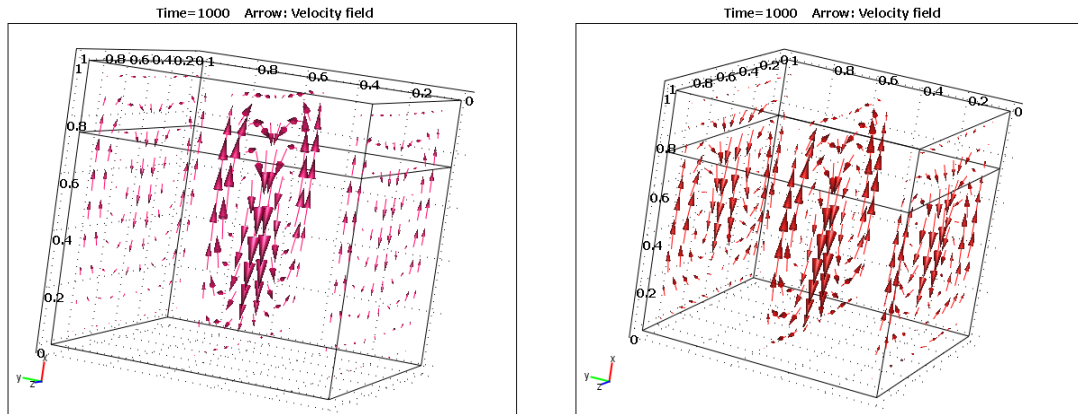


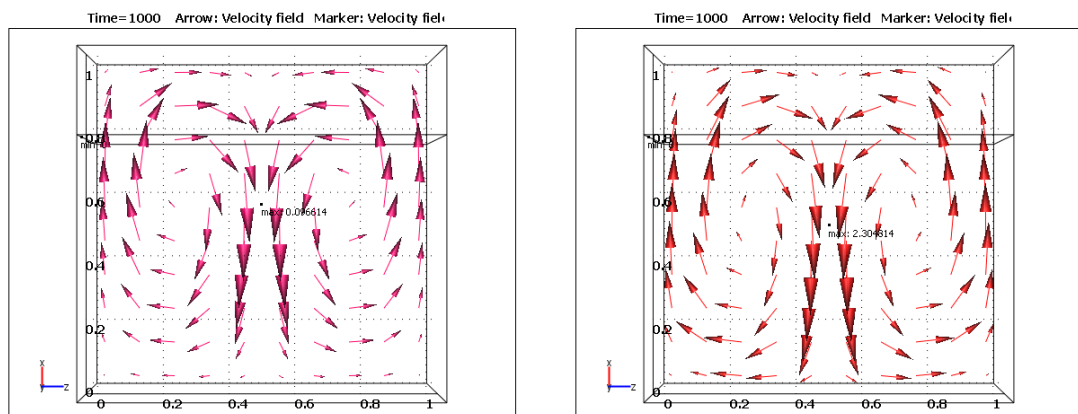
Figure 5.5 : Isothermes pour différentes valeurs modérées de Ra (100 et 2800) respectivement

Table 5.3: Vitesses adimensionnelles obtenues pour différentes valeurs de Ra

Ra	U		V		W	
	Max	Min	Max	Min	Max	Min
1	8.22×10^{-4}	-9.56×10^{-4}	2.46×10^{-5}	-2.47×10^{-5}	5.48×10^{-4}	-5.49×10^{-4}
10	0.008223	-0.009574	2.29×10^{-4}	-2.30×10^{-4}	0.005488	-0.005497
100	0.082083	-0.096614	0.003344	-0.00331	0.055022	-0.055121
1000	0.751638	-0.901746	0.156699	-0.156709	0.501138	-0.49858
2000	1.422247	-1.704009	0.341277	-0.33565	0.86921	-0.860884
2500	1.741362	-2.083842	0.441124	-0.433173	1.026835	-1.015816
2750	1.898515	-2.268378	0.487048	-0.484599	1.136456	-1.124303
2800	1.929574	-2.304774	0.495316	-0.495443	1.158346	-1.146603



(a) Les écoulements permanents, représentés par deux cellules rotatives opposées l'une et l'autre, pour $Ra = 100$ et $Ra = 2800$, respectivement



(b) les projections de vecteurs de vitesse dans le mi-plan vertical ($Y=0,5$) pour différentes valeurs de Ra , (état stationnaire), une symétrie par rapport ($Z=0,5$) pour $Ra=100$ et $Ra=2800$

Figure 5.6 : Les modèles d'écoulement stationnaire (conditions à $Pr = 0,001$ et $Ra = 100$ et 2800 respectivement)

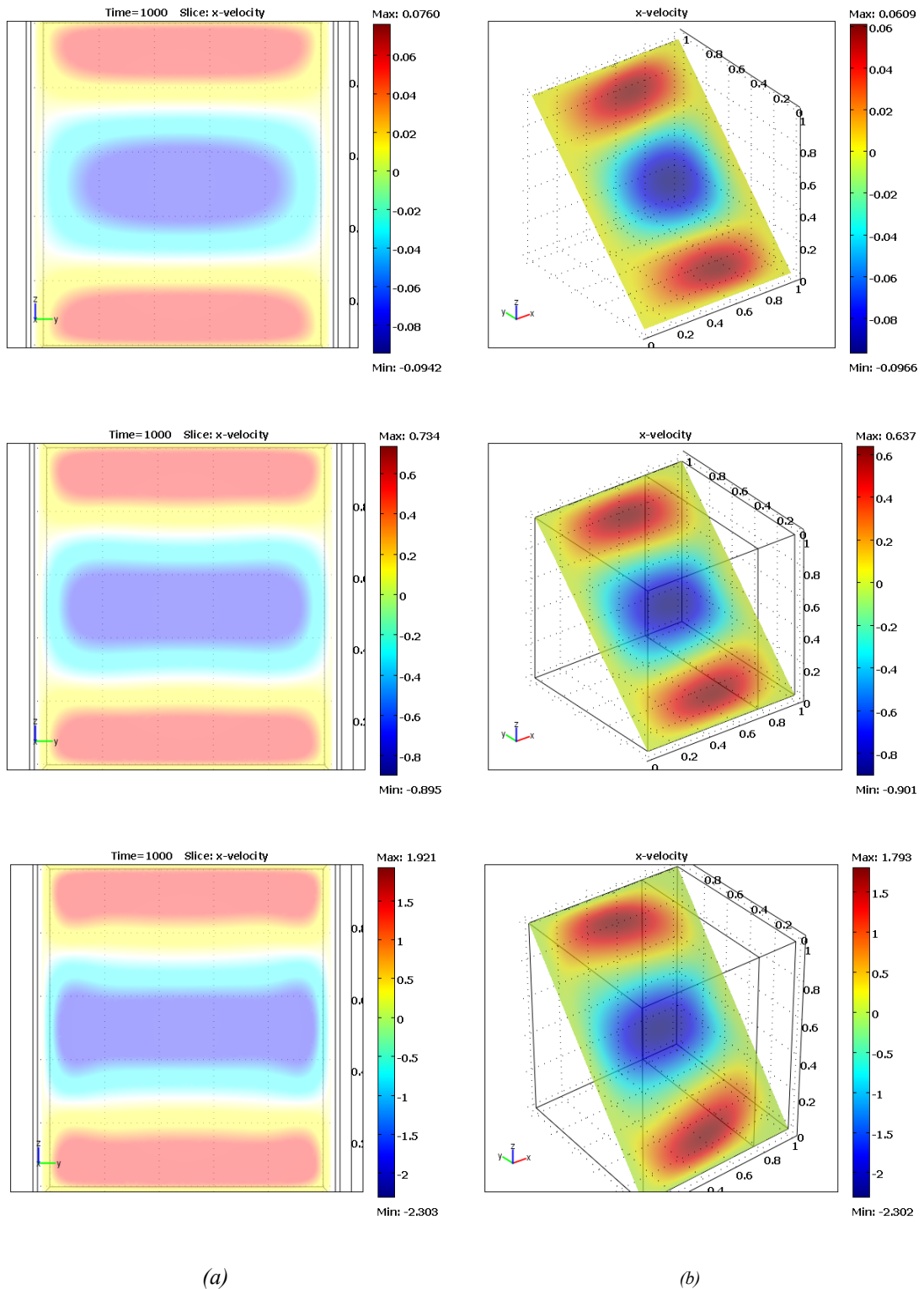


Figure 5.7: Composante de vitesse dans la –direction X (U) sur le plan ($X=0,5$) et sur le plan diagonal joignant les points de coordonnées $(0,0,0)$, $(1,0,0)$, $(1,1,1)$, pour différentes valeurs modérées de Ra : (a) une symétrie par rapport le mi-plan vertical ($Y=0,5$) aussi bien par rapport au mi-plane latéral ($Z=0,5$); (b) une symétrie dans ce plan diagonal.

Rupture de symétrie centrale (*Central Symmetry-Breaking*) et la transition.

À la valeur de Ra autour de (≈ 2810) une rupture de symétrie centrale s'apparait. Une transition à partir d'un écoulement symétrique en état stationnaire à un écoulement non-symétrique est observée. En fait, lorsque Ra atteint sa valeur critique la symétrie centrale initialement observée de l'écoulement à l'état stationnaire disparaît et l'écoulement devient non-symétrique. Cette perte de symétrie est une caractéristique reconnue de ce type de géométrie de cavité avec des parois (frontières) rigides. Il est possible que cette perte de symétrie et la transition à partir d'écoulement symétrique à l'état stationnaire à un écoulement non-symétrique est due au gradient latéral de température. La transition vers un état instationnaire ou la dépendance de temps est une fonction de la géométrie et le type des conditions aux limites utilisées. Comme il est rapporté dans [Afrid and A. Zebib, 1990] pour deux types de cavités 3-D latéralement chauffées avec quatre frontières rigides (cavité avec surface rigide supérieure et avec une surface supérieure libre), la transition à un régime dépendant du temps apparaît. La transition à la dépendance de temps est aussi connue dans les modèles 2-D de cavités latéralement chauffées. Par exemple, comme il est montré dans [Gelfgat et al. 1999b] pour certaines valeurs du rapport de forme (aspect ratio) et Pr , la première instabilité de l'écoulement est une perte de symétrie centrale (*a central-symmetry-breaking*) qui évolue en un écoulement non-symétrique de l'état stationnaire en état stationnaire et l'écoulement devient instable oscillant pour des valeurs grandes du nombre de paramètre de contrôle (*control parameter number*). La forte dépendance des paramètres critiques sur la géométrie et les conditions aux limites dans les cavités 2D chauffées latéralement a été aussi rapportée dans [Gelfgat et al. 1997].

Remarque 5.3. Il doit être noté que le calcul proche des valeurs critiques de Ra prend plus de temps que celui loin d'elles.

Modèles de l'écoulement instable de structure non-symétrique. Comme il est mentionné auparavant, pour des Ra relativement faibles et pour la géométrie étudiée, trois symétries possibles de champ d'écoulement ont été observées par rapport aux demi-plans ($Z = 0,5$, $Y = 0,5$), et aussi une symétrie par rapport au plan diagonal. Même l'écoulement résultant flow (après la bifurcation) reste symétrique par rapport au plan de symétrie ($Z = 0,5$), comme il est montré en Fig. 5.9, où la projection de la composante de vitesse U et la distribution de Nu sont tracés pour différentes valeurs de Ra . Cependant, la perte de symétrie dans le champ d'écoulement se produit verticalement (la direction Y) dans le plan diagonal.

En fait, la symétrie disparaît par rapport au mi-plan vertical ($Y = 0,5$). La perte de symétrie dans le plan diagonal est illustrée en Fig. 5.10. la perte de symétrie dans le champ thermique peut aussi être illustrée (voir Fig. 5.11) par les distributions de flux de chaleur conductif et convectif le long de la ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Y . Il est observé que la perte de symétrie se produit par rapport à ($Y = 0,5$), en revanche la perte de symétrie est maintenue par rapport au mi-plan ($Z = 0,5$), comme il est montré en Fig. 5.12, par les flux de chaleur conductif et convectif le long de la ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Z .

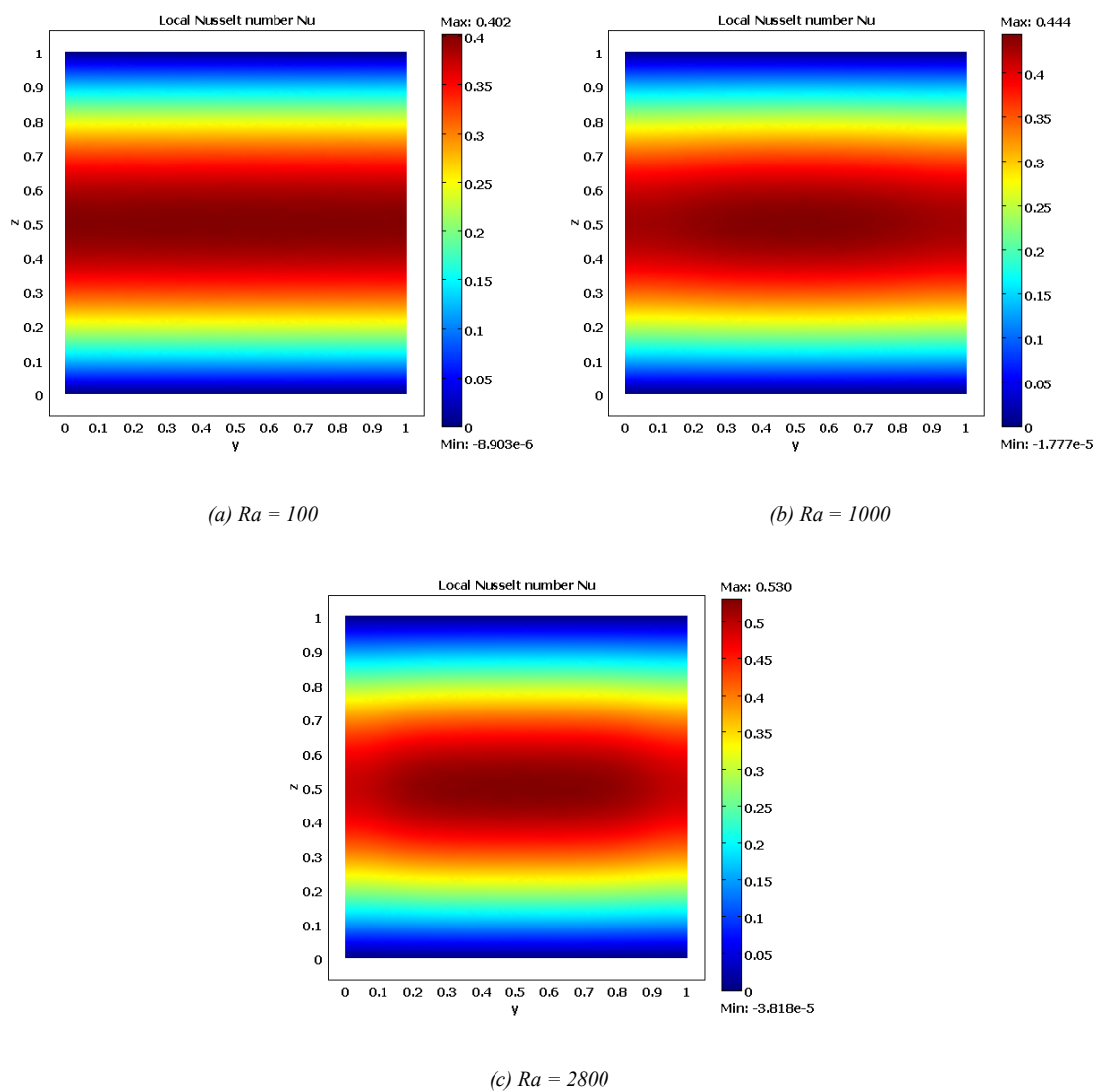


Figure 5.8: Taux de transfert de chaleur local (Nu), à l'état stationnaire, les distributions sur la surface de bas $X = 0$ pour différentes valeurs modérées de Ra , la symétrie est observée par rapport à ($Y = 0,5$ et $Z = 0,5$)

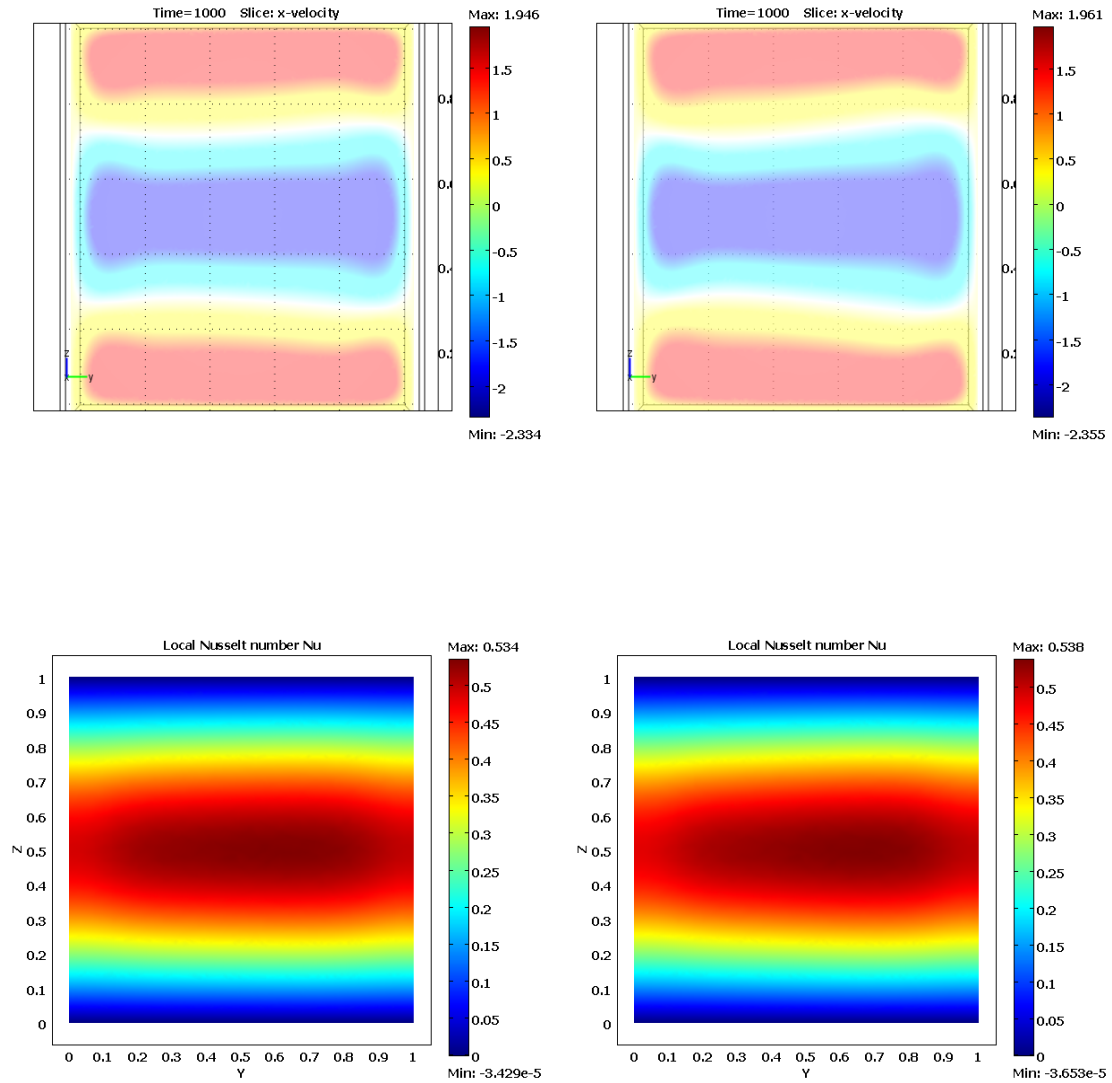


Figure 5.9: La composante de vitesse (U) dans le plan $X = 0,5$ et distribution du nombre Nu sur la surface de dessous $X = 0$ pour différentes valeurs de Ra (2850 et 2900), la symétrie est conservée par rapport à $Z = 0,5$, en revanche la symétrie disparaît dans le plan $Y = 0,5$

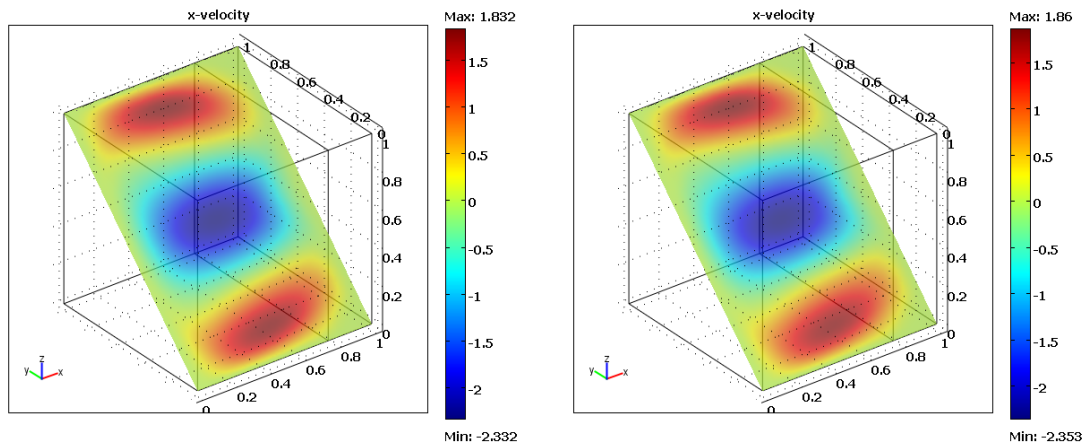


Figure 5.10: La projection de composante de vitesse (U) sur le plan diagonal, pour différentes valeurs de Ra (2850 et 2900), perte de symétrie par rapport au plan diagonal

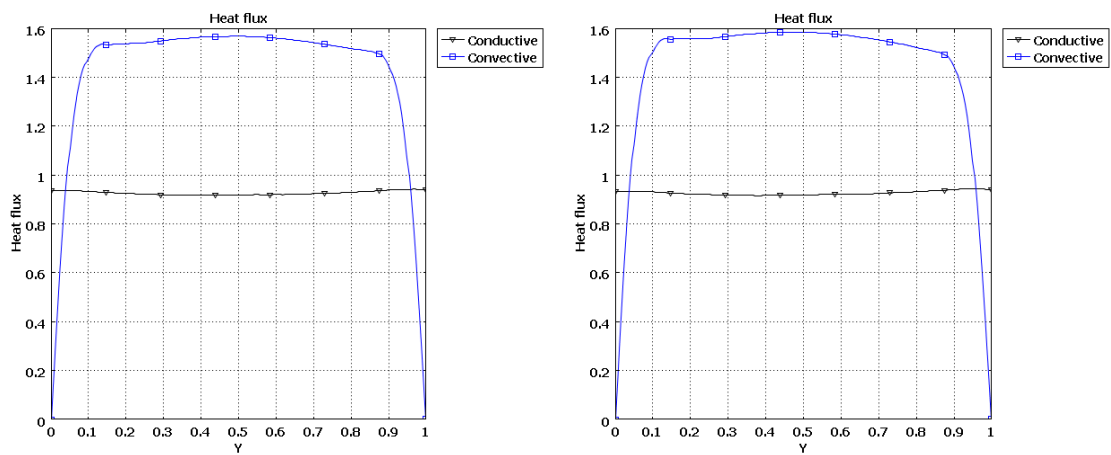


Figure 5.11: Illustration de la perte de symétrie par la distribution de flux de chaleur le long de la ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Y , pour différents Ra (2850 et 2900), perte en symétrie par rapport au mi-plan ($Y=0,5$)

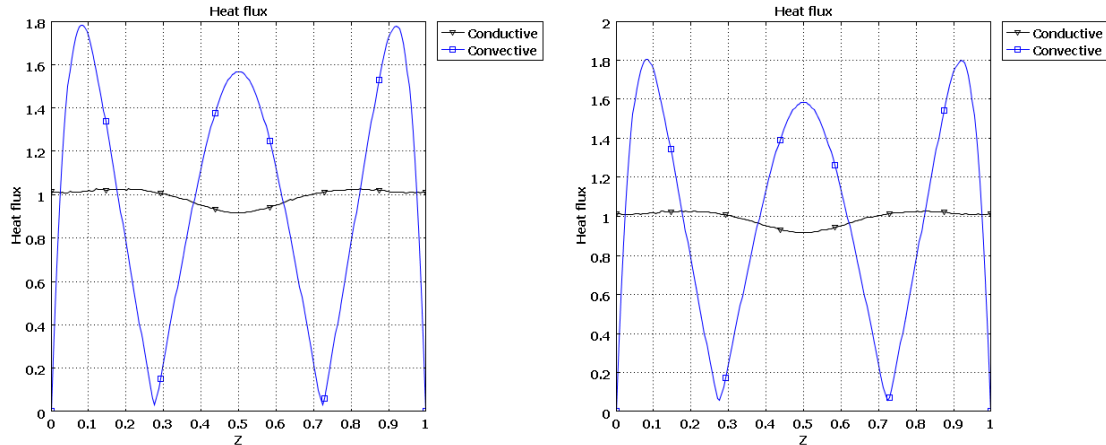


Figure 5.12: Distribution de flux de chaleur le long de lignes traversant le centre de la cavité dans la direction Z, pour différents Ra (2850 et 2900), la symétrie est conservée par rapport au mi-plan ($Z = 0,5$)

5.4.3 Application d'un champ magnétique horizontal externe (statique et uniforme)

Effet stabilisant d'un champ magnétique. Les calculs montrent que l'effet d'un champ magnétique appliqué est stabilisateur comparés avec ceux en l'absence de champ (c'est-à-dire $Ha = 0$). Ce qui est dû à l'effet de stabilisation des forces magnétiques agissant sur les points du fluide. Par exemple, pour le cas où $Ha = 2$, les écoulements symétrique à l'état stationnaire (stable) sont obtenus à $Ra < 3 \times 10^3$. La bifurcation et transition se développent pour ce cas ($Ha = 2$) lorsque Ra est environ ($\approx 3 \times 10^3$) (de tels écoulements symétrique en état stationnaire (stable) sont présentés en Fig. 5.13, par exemple à $Ra = 2875$). Pour cette valeur de Ra une perte de symétrie se produit dans le mi-plan ($Y = 0,5$) et dans le plan diagonal (Figs. 5.14a et b). Qualitativement, les champs d'écoulement symétrique stable (*steady*) et non-symétrique (*steady*) obtenus à $Ha = 2$ sont semblables aux champs d'écoulement symétrique and non-symétrique stables en absence de champ (c'est-à-dire $Ha = 0$). Pour le cas à $Ha = 2$, les valeurs maximales et minimales calculées des composantes de vitesse d'écoulement convectif symétrique stable sont réduite par rapport au cas de $Ha = 0$ (voir Table 5.4).

Une augmentation supplémentaire en Ha conduit à des écoulements plus stables et faibles comme il est montré en Tableau 5.4 et la Fig. 5.15. L'examen du Tableau 5.4 et Fig. 5.15 révèle que pour chaque valeur Ra l'écoulement devient faible avec une augmentation

dans Ha . Par conséquent, nous pouvons conclure que sous les conditions géométrie supposées, un champ magnétique appliqué supprime et stabilise le champ d'écoulement (convection) et retarde la bifurcation « perte de symétrie centrale » (voir Tableau 5.4). En fait, le champ magnétique appliqué affaiblit et fait uniformiser principalement la composante selon X de vitesse comme il est observé dans la Fig. 5.15. La composante de vitesse dans la direction Z est aussi réduite. Par exemple, les valeurs maximales moyennes de composante de vitesse dans les directions X et Z à $Ha = 0$ sont réduites approximativement par 3 et 2 fois, respectivement, à $Ha = 15$ (Fig. 5.15).

En outre, le champ magnétique appliqué affecte le transfert convectif de chaleur. Les vitesses sont affaiblies, par conséquent, la quantité de chaleur transférée par convection est petite, conduisant à des distributions de flux convectif de chaleur faible et plus uniforme (voir Figs. 5.4a et 5.16). L'influence de champ magnétique sur le transfert convectif de chaleur est mieux illustrée par l'augmentation dans la valeur critique de Ra (à laquelle l'écoulement devient instable) avec l'augmentation de champ magnétique appliqué (Table 5.4). En fait, puisque l'instabilité est créée par des *perturbations dominantes* infiniment petites, le transfert convectif de chaleur affecte fortement la stabilité de l'écoulement. L'application d'un champ magnétique réduit par conséquent le flux convectif de chaleur, et stabilise ainsi l'écoulement.

Le diagramme de stabilité correspondant (élaboré approximativement), montre la dépendance de nombre de Rayleigh critique (Ra_{cr}) sur Ha , est présenté en Figure 5.17.

En conclusion. Les résultats de la présente simulation 3-D montrent que pour la géométrie, du creuset, modélisée (qui peut être considérée comme une simple version d'une configuration verticale de Bridgman chauffée de dessous), une augmentation dans l'intensité d'écoulement peut conduire à des structures non-symétriques d'écoulements pour de petits paramètres de contrôle (principalement le nombre de Rayleigh). L'effet du nombre Ra sur la structure d'écoulement et la distribution de transfert de chaleur est présenté.

Les résultats de simulations sont comparés avec ceux de la littérature. Il est montré que la perte de symétrie se produit pour des nombres Ra faibles en comparaison avec ceux des modèles 2-D de la littérature. La présente analyse illustre, également, la limitation de simulations 2-D dans l'identification de telles transitions. L'écoulement devient tridimensionnel pour des nombres de Ra relativement faibles. Les résultats illustrent, aussi,

l'effet de la profondeur (*depth*) de la cavité sur l'écoulement moyen indiquant l'existence d'une longueur d'onde « *wavelength* » dans la 3^{ème} direction.

L'application d'un champ magnétique externe présente lui-même comme un outil (moyen) prometteur pour l'amortissement et la stabilisation des structures d'écoulement.

Tableau 5.4. Valeurs maximale et minimale obtenues pour les vitesses adimensionnelles, à l'état stationnaire (temps = 1000), dans la cavité à $Ra = 100$ et à différentes valeurs de Ha (de 0 à 50) et les valeurs critiques Ra approximatives correspondantes

Ha	U		V		W		Ra _{cr} approximatif
	Max	Min	Max	Min	Max	Min	
0	0.082083	-0.096614	0.003344	-0.00331	0.055022	-0.055121	2.81 x 10 ³
1	0.081573	-0.095659	0.003189	-0.003159	0.054679	-0.054779	2.9 x 10 ³
2	0.080097	-0.092908	0.002844	-0.00292	0.053678	-0.053779	3 x 10 ³
4	0.074747	-0.083455	0.002215	-0.002196	0.050035	-0.050143	3.4x10 ³
6	0.067355	-0.071524	0.00179	-0.001823	0.045012	-0.045131	4.2 x 10 ³
8	0.059606	-0.059773	0.001725	-0.001631	0.039627	-0.03973	5.3 x 10 ³
10	0.052409	-0.049599	0.001911	-0.001752	0.034612	-0.03476	5.7 x 10 ³
15	0.03788	-0.031366	0.001889	-0.001714	0.024217	-0.024175	1.4 x 10 ⁴
20	0.028139	-0.020972	0.001611	-0.001473	0.017497	-0.017518	2.5 x 10 ⁴
30	0.017728	-0.011098	0.001123	-0.001016	0.010054	-0.010149	7.45 x 10 ⁴
40	0.012093	-0.006838	0.00089450	-0.00073586	0.006496	-0.00652	1.6x 10 ⁵
50	0.008909	-0.004642	0.000673	-0.000572	0.004569	-0.004511	2.5 x10 ⁵

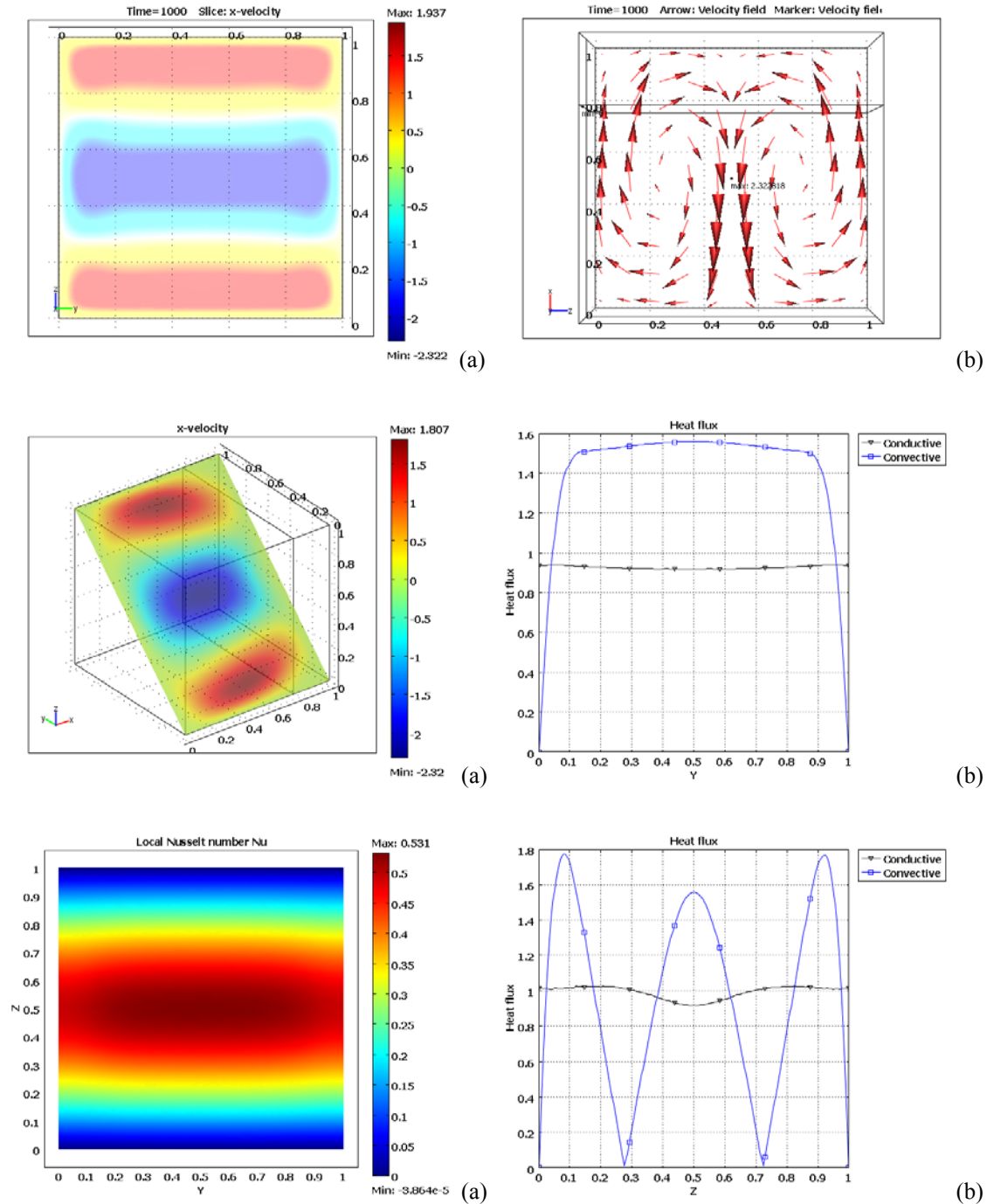
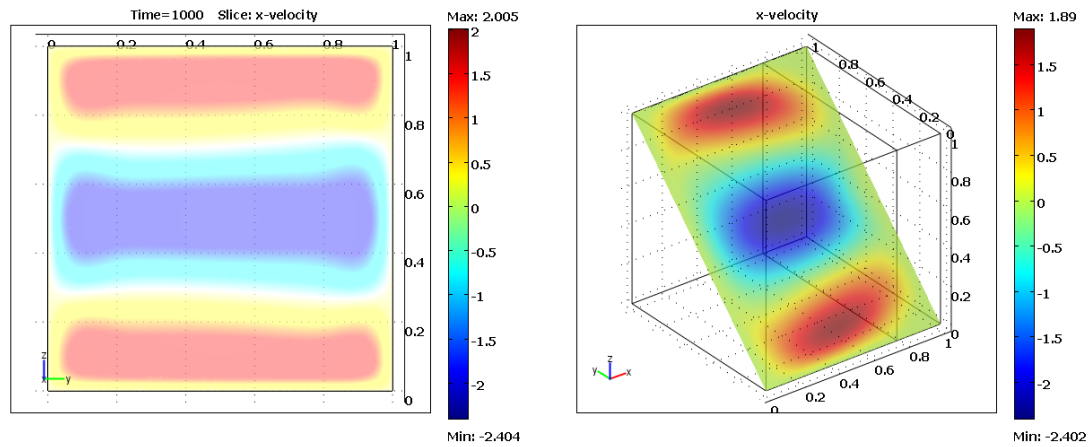
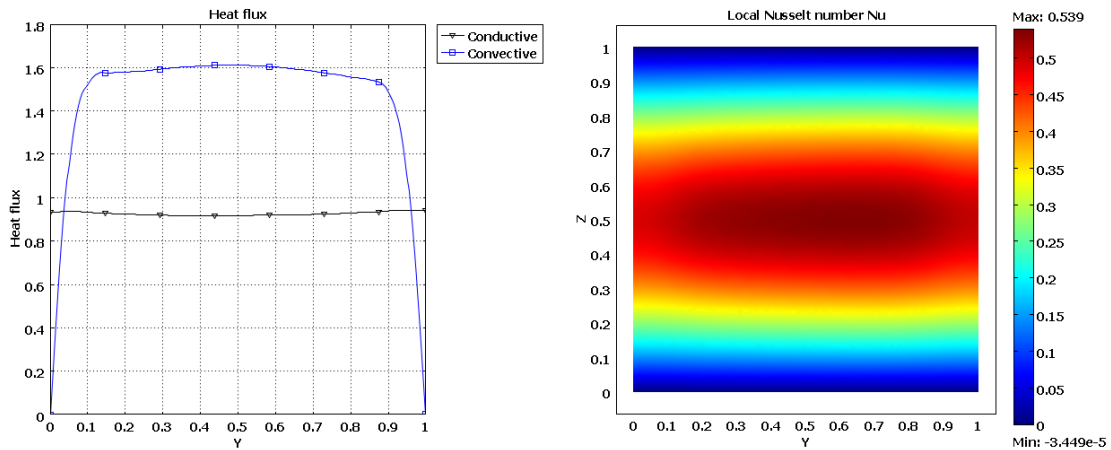


Figure 5.13: écoulement convectif stable de structure symétrique à $Ra = 2875$ (cas où $Ha = 2$) **(a)**- illustration de structure symétrique de l'écoulement par les projections de la composante de vitesse dans la direction X sur le mi-plan $X=0,5$ et sur le plan diagonal et par la distribution de nombre de Nusselt sur la surface de dessous, respectivement ; **(b)**- illustration de la structure symétrique d'écoulement par la projection de champ de vecteur vitesse sur le plan de symétrie $Y=0,5$ et par les distributions de flux de chaleur le long de lignes traversant le centre de la cavité dans les directions Y et Z, respectivement

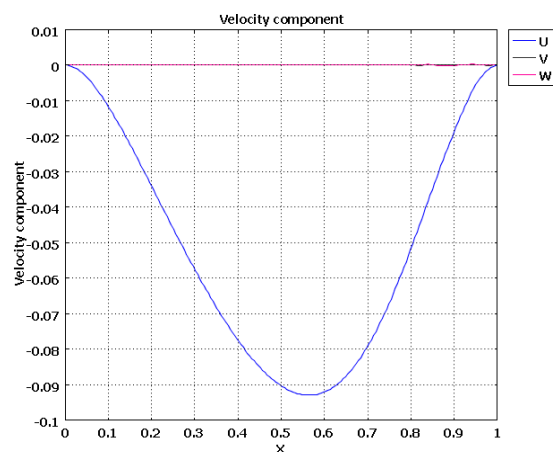
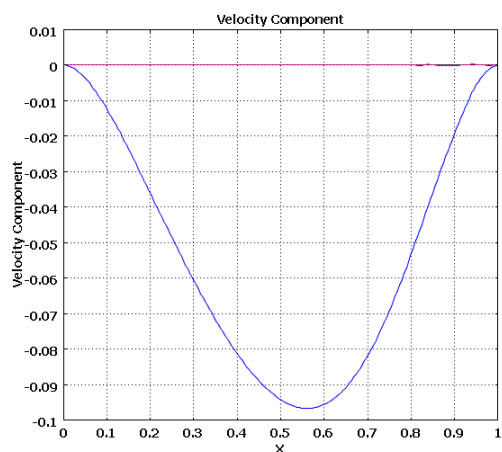
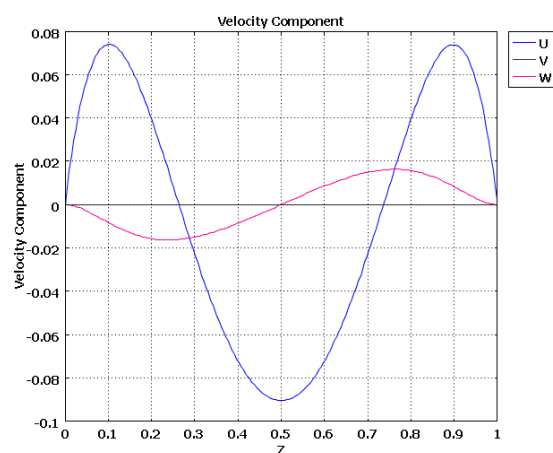
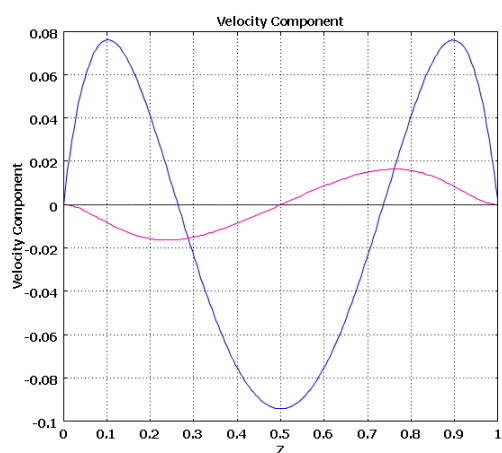
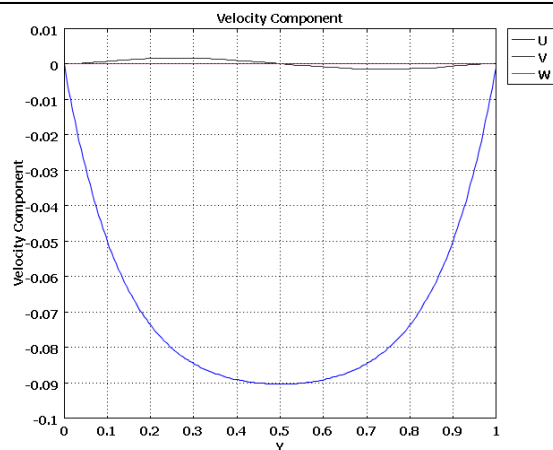
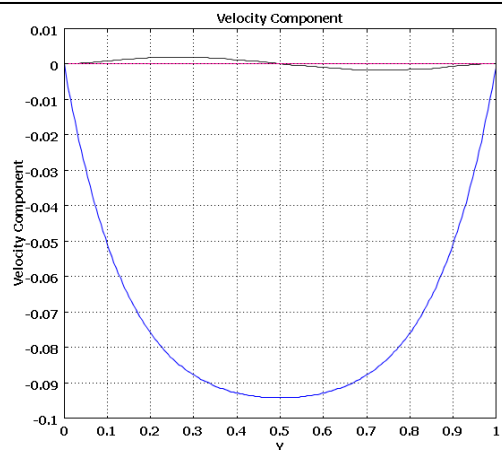


(a) illustration de la perte en symétrie par les projections de la composante de vitesse dans la direction X sur le mi-plan $X=0,5$ et sur le plan diagonal, respectivement



(b) illustration de la perte en symétrie par les distributions de flux de chaleur le long de ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Y et par la distribution de nombre de Nusselt sur la surface de dessous, respectivement

Figure 5.14: Perte en symétrie et transition à une structure non-symétrique d'écoulement à $Ra = 3 \times 10^3$ ($Ha = 2$)



$Ha = 0, Ra = 100$

$Ha = 2, Ra = 100$

(continue)

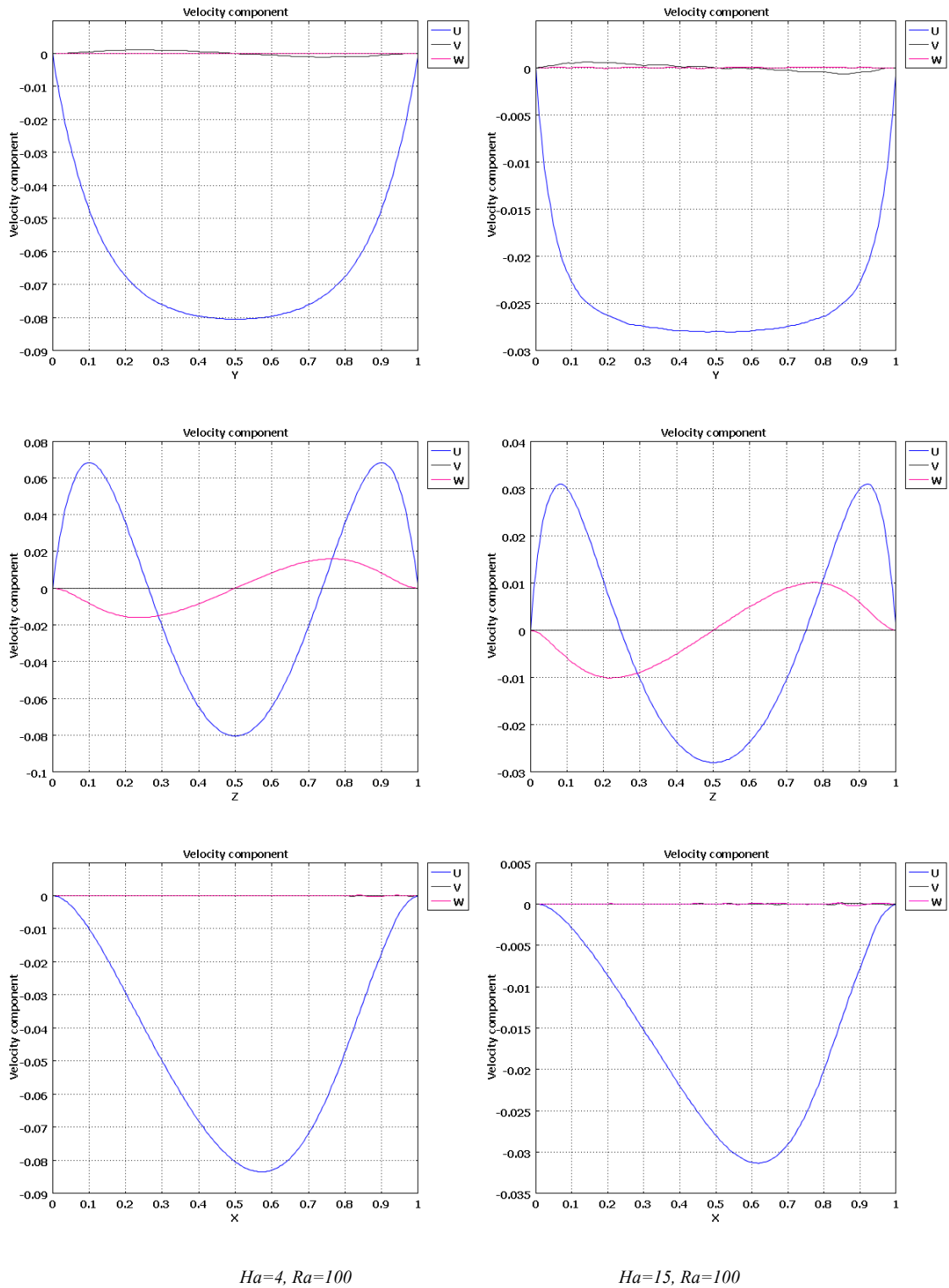


Figure 5.15: Effets d'amortissement de différentes intensités de champ magnétique appliqué ($Ra = 100$) (a) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Y ; (b) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Z et (c) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction X

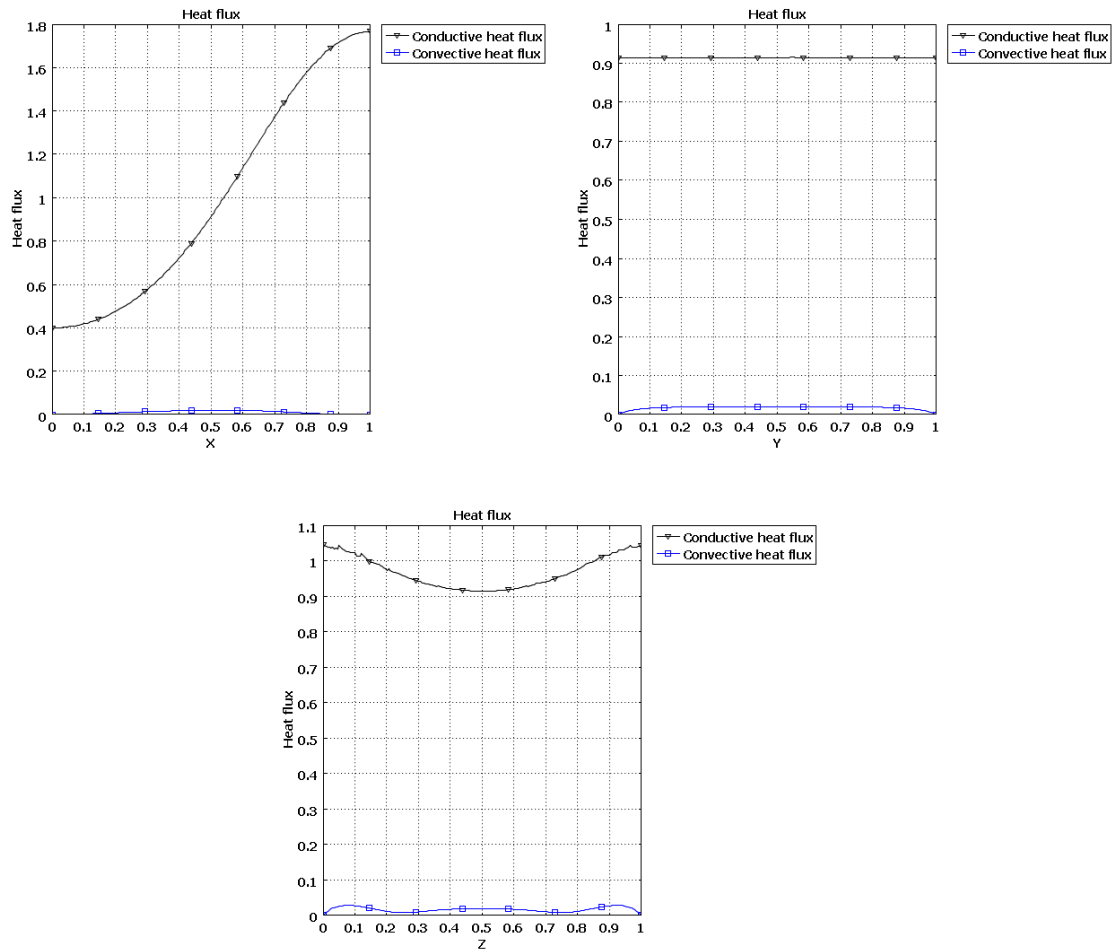


Figure 5.16: effets d'amortissement du champ magnétique appliqué ($Ha = 15$) ($Ra = 100$) (a) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Y; (b) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction Z, (c) Ligne traversant le centre de la cavité dans la direction X

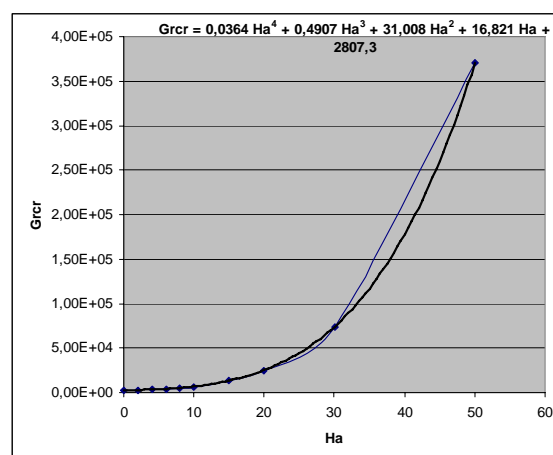


Figure 5.17: Diagramme Ra_{cr} - Ha (approximatif)

Conclusions et perspectives

Conclusion générale

Le phénomène de modélisation de convection lors de changement de phase notamment la solidification des alliages binaires est d'une grande complexité et a donné lieu à de nombreux travaux de modélisation pour améliorer sa compréhension. La difficulté de modélisation est de tenir compte du couplage entre les phénomènes, des différentes échelles caractéristiques qui entrent en jeu et de l'existence des régimes de solidification colonnaire et équiaxe.

La présente étude est un modèle mathématique fondé sur l'approche continue qui a été développé pour la modélisation numérique de convection lors de solidification d'un alliage binaire. L'effet de stabilisation par champ magnétique a été aussi illustré et examiné.

Dans la méthodologie de résolution numérique une attention particulière est portée dans la discrétisation des termes sources *convectifs* et *diffusifs* dans les équations de conservation des espèces et énergie (un schéma d'ordre élevé a été employé). Alors que la discrétisation de termes sources des équations de quantité de mouvement a été entrepris en moyen du « *schéma Centrale en Différences Finies* ». Le modèle est employé pour les calculs numériques du mélange Pb-Sn, dans une cavité rectangulaire, pour lequel le fluide le plus léger (étain) est rejeté du fait de la solidification latérale. Les résultats obtenus conduisant à des caractéristiques robustes relativement à la solidification d'alliage binaire. Ces caractéristiques sont supposées être réalistes ou révélées par l'expérience : le couplage entre les écoulements contrôlés par les forces de flottabilité thermosolutale associées avec les régions pâteuse et liquide ; l'établissement d'un front de *liquidus* fortement irrégulier et la formation des *poches liquides* dues à la *refusion* dans les zones pâteuse et liquide. En effet, la refusion facilite la formation des canaux qui privilégient la *convection de l'étain-riche* (*écoulements de canaux préférentiels*) dans le fluide inter dendritique au front *liquidus*. Les calculs numériques entrepris révèlent la relation entre l'écoulement de *canal*, qui se produit lors des premières étapes de solidification, et la formation de la *macro ségrégation* finale.

D'autre part l'effet de stabilisation par l'application d'un champ magnétique a été identifié par les calculs numériques réalisés. Il apparaît qu'un champ magnétique fort peut

supprimer et réduire les intensités de l'écoulement conduisant ainsi à une réduction de la ségrégation ce qui résulte en une meilleure qualité de cristal formé.

D'autre part, une étude numérique est entreprise pour calculer l'écoulement convectif tridimensionnel (3-D), d'un fluide à faible nombre de Prandtl (Pr), sous un gradient de température appliqué. Le domaine de simulation est une cavité 3-D remplie d'un liquide métallique et chauffée par dessous et partiellement chauffée latéralement. Dans une telle configuration, le phénomène de bifurcation et de perte de symétrie « *symmetry breaking bifurcation* » dans l'écoulement convectif d'un état stationnaire stable à un état instable peut se produire pour des paramètres de contrôle critiques, notamment le nombre de Rayleigh, associés à la technique de croissance de cristal.

La perte de symétrie et transition a bien été identifiée. L'effet d'un champ magnétique appliqué horizontalement est aussi considéré dans le but de stabiliser le champ d'écoulement en retardant la bifurcation. La dépendance du nombre de Rayleigh critique Ra_{cr} sur le nombre de Hartmann (Ha) est examinée à travers une étude paramétrique. Le diagramme de la stabilité pour $Ra_{cr}(Ha)$ correspondant à la transition d'un écoulement symétrique à non-symétrique est donné.

Les résultats de simulation montrent qu'en l'absence d'un champ magnétique appliqué et à des valeurs relativement petites du nombre de Rayleigh (Ra), un champ d'écoulement stationnaire et symétrique est observé. Les écoulements classiques de type spiral caractérisant typiquement les effets 3-D (dans la 3ème direction) sont aussi identifiés. Lorsque le nombre Ra augmente à sa première valeur critique, l'écoulement se bifurque d'un état stationnaire symétrique à un état non-symétrique. La perte de la symétrie se produit dans le demi-plan vertical et dans le plan diagonal. Ce qui est dû à la symétrie de cette configuration dans le demi-plan vertical et le plan diagonal.

Un champ magnétique statique et uniforme appliqué horizontalement est également considéré pour examiner son effet sur la stabilisation de l'écoulement fluide dans la fonte. Les simulations montrent aussi que la première valeur critique pour laquelle la symétrie disparaît augmente avec le niveau (Ha) du champ magnétique. Les résultats de simulation indiquent qu'un champ magnétique horizontal peut être utilisé pour supprimer la convection et par conséquent retarder la perte de symétrie se produisant à des valeurs critiques des paramètres de contrôle.

Les résultats de la présente simulation 3-D montrent que pour la géométrie, du creuset, modelée (qui peut être considérée comme une simple version d'une configuration verticale de Bridgman chauffée par dessous), une augmentation de l'intensité d'écoulement peut conduire à des structures non-symétriques d'écoulements pour de petits paramètres de contrôle (principalement le nombre de Rayleigh). L'effet du nombre Ra sur la structure d'écoulement et la distribution de transfert de chaleur est présenté.

Les résultats de simulations sont comparés avec ceux dans la littérature. Il est montré que la perte de symétrie se produit pour des nombres Ra faibles en comparaison avec ceux des modèles 2-D de la littérature. La présente analyse illustre, également, la limitation de simulations 2-D dans l'identification de telles transitions. L'écoulement devient tridimensionnel à relativement faibles nombres de Ra . Les résultats illustrent, aussi, l'effet de la profondeur (*depth*) de la cavité sur l'écoulement moyen indiquant l'existence d'une longueur d'onde « *wavelength* » dans la 3^{ème} direction.

L'application d'un champ magnétique externe présente lui-même comme un outil prometteur pour l'amortissement et la stabilisation des structures d'écoulement.

Perspectives

Comme des perspectives il est recommandé de modéliser

- la convection au cours de changement de phase en non équilibre et tenir compte en particulier de phénomène de sous refroidissement solutal discuté en chapitre 1.
- Etendre le modèle au cas 3D pour mieux illustrer les phénomènes de transports convectifs.
- utiliser des champs magnétiques non statiques.
- modéliser en croissance cristalline.

REFERENCES

Afrid M. & Zebib, A. (1990)

Oscillatory three-dimensional convection in rectangular cavities and enclosures, *Phys. Fluids A* 2 (8), 1990 pp. 1318 – 1327

Ahmad N., Combeau H., Desbiolles, J.-L., Jalanti T., Lesoult G., Rappaz, J., Rappaz, M. & Stomp C. (1998)

“Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between FVM and FEM predictions and a Confrontation with Experiments”, *Metall. and Mater. Trans. A*, **29A**, 617-630

Alboussière, T., Neubrand AC. Garandet JP., Moreau, R. (1997)

“Segregation during horizontal Bridgman growth under an axial magnetic field”, *Journal of Crystal Growth* 181, 133-144

Anile A. M., Allegretto, W. Ringhofer, C. (2003)

“Mathematical problems in semiconductor physics” Springer, Germany

Armour, N.; Yildiz, M.; Yildiz, E.; Dost, S. (2008)

“Liquid Phase Diffusion Growth of SiGe under Magnetic Fields”, *ECS Transactions*, **16(10)**, 135-146

ASM Volume 15, (1992)

ASM Handbook, Volume 15

Asta, M., Beckermann, C., Karma, A., Kurz, W., Napolitano, R., Plapp, M., Purdy, G. Rappaz, M. et Trivedi, R. (2009)

“Solidification microstructures and solid-state parallels: Recent developments, future directions”, *Acta Mater.* **57**, pp 941-971

Battle T.P. (1992)

Mathematical modelling of solute segregation in solidifying materials. International Materials Reviews, **37(6)**:249–270,

Beckermann C. (2001)

Modeling of macrosegregation: Past, present and future. In R. Abbaschian, H. Brody, and A. Mortensen, editors, *Proceedings of the M.C. Flemings Symposium on Solidification and Materials Processing*, pages 297–309

Beckermann, C. (2008)

“Macrosegregation”, in *ASM Handbook, Volume 15: Casting* ASM Handbook Committee, p 348-352

Beckermann, C. (2000)

“*Modeling of Macrosegregation: Past, Present and Future*”, Presented at the Flemings Symposium, Boston, MA, June 2000

Beckermann, C., Fan, C., & Mihailovic J. (1991)

“*Numerical Simulations of Double-Diffusive Convection in a Hele-Shaw Cell*”, Inter. Video J. of Engineering Research, **1**, 71-82

Beckermann, C. & Ni, J. (1992)

“*Modeling of equiaxed solidification with convection,*” In Proc. First Int. Conf. Transport Phenomena in Processing, Honolulu, Hawaii, March, 1992

Beckermann C. & Viskanta R. (1988)

“*Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture*”, PhysicoChemical Hydrodynamics, **10(2)**, 195–213

Beckermann, C. & Viskanta, R. (1993)

“*Mathematical modeling of transport phenomena Durant alloy solidification*”, Appl. Mech. Rev. **46**, pp 217-231.

Beckermann, C. & Wang, C.Y. (1995)

Multiphase/scale modeling of alloy solidification. Ann. Rev. of Heat transf. **6**, 115-198.

Beckermann, C., & Wang C.Y. (1997)

“*Equiaxed Dendritic Solidification with Convection Part III. Comparisons with NH₄Cl-H₂O Experiments*”, Metall. and Mater. Trans. A, **27A**, 2784-2795

Bennacer, R., El Ganaoui, M. & Leonardi, E. (2006)

“*Symmetry breaking of melt flow typically encountered in a Bridgman configuration heated from below*”, Applied Mathematical Modelling, **30**, 1249–1261

Bennon W.D. & Incropera F.P. (1987a)

“*A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems –I- Model formulation*”, Int. J. Heat Mass Transfer, **30(10)**, 2161–2170

Bennon, W.D. & Incropera, F.P. (1987b),

“*A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems –II- Application to solidification in a rectangular cavity*”, Int. J. Heat Mass Transfer, **30(10)**, 2171–2187

Bennon, W.D. & Incropera, F.P. (1987c),

“*The Evolution of Macrosegregation in Statically Cast Binary Ingots*”, Metallurgical Transactions B, **18B**, 611-616

Bennon, W.D. and F.P. Incropera, (1988)

"Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change using a Continuum Model," Numerical Heat Transfer 13, 277-296

Bhat, M.S., Poirier, D.R., Heinrich, J.C. et Nagelhout D. (1994)

"Permeability normal to columnar dendrites at high fraction liquid", Scripta Metall. Mater., 31(3):339–344, 1994.

Bolling, G.F. & Tiller, W.A. (1961)

J. Appl. Phys., Vol 32, 1961, p 2587

Bousquet-Mélou, P. (2001)

« Modélisation Macroscopique et Simulation Numérique de la Solidification des Mélanges Binaires », thèse de Doctorat de l'Université de Paris 6

Brody, H.D & Flemings, M.C., (1966)

"Solute redistribution in dendritic solidification", Trans. Metallurgical Society of AIME, **236**, 615-624

Burton, J.A., Prim, R.C. & Slichter, W.P. (1953)

J. Chem. Phys. 21 (1953), 1987

Byungsoo K. (2002)

"Development of macrosegregation during solidification of binary alloys", Thèse de PhD, Pennsylvania university.

Campbell, J. (2003)

"Casting", Elsevier Science Ltd.

Cao, W. Z. & Poulikakos, D. (1989)

"Solidification of an alloy in a cavity cooled through its top surface", Int. J. Heat Mass Transfer, 33, 427-434

Carman, P.C. (1939)

"Permeability of saturated sands, soils and clays", J. Agr. Sci., **29**, 262–273

Chakraborty, S. (2001)

"Studies on Momentum, Heat and Mass Transfer in Binary Alloy Solidification Processes", PhD thesis Indian Institute of Science

Chakraborty, S. & Dutta, P. (2002)

"The effect of solutal undercooling on double-diffusive convection and macrosegregation during binary alloy solidification: a numerical investigation", Int. J. Numer. Meth. Fluids, **38**, 895–917

Chakraborty S. & Dutta P. (2003)

"Three-dimensional double-diffusive convection and macrosegregation during non-equilibrium solidification of binary mixtures", Inter. J. of Heat and Mass Transfer 46, 2115–2134

Chandrasekhar S. (1961)

"Hydrodynamics and Hydromagnetic stability" (Clarendon, Oxford, 1961)

Chang, S. & Stefanescu, D.M. (1996)

"A model for macrosegregation and its application to Al-Cu castings", Metallurgical and Materials Transactions, 27A, 2708-2721

Chedzey H.A. & Hurle, D.T.J. (1966)

Nature 210 (1966) 933.

Chen, J. H. & Tsai, H. L. (1993)

"Inverse segregation for a unidirectional solidification of aluminum-copper alloys", Int. J. Heat Mass Transfer, 36, 3069-3075

Chen T.F. (1997)

"Analytical and experimental studies for space boundary and geometry inverse heat conduction problems", PhD university de Montréal

Christenson, M.S. & Incropera, F.P. (1989b)

"Solidification of an Aqueous Ammonium Chloride Solution in a Rectangular Cavity-I- Experimental Study", Int. J. Heat Mass Transfer, 32, 47-68

Christenson, M.S., Bennon, W.D. & Incropera, F.P. (1989a)

"Solidification of an Aqueous Ammonium Chloride Solution in a Rectangular Cavity-II- Comparison of Predicted and Measured Results", Int. J. Heat Mass Transfer, 32, 69-80

Clyne, T.W. & Kurz, W. (1981)

"Solute redistribution during solidification with rapid solid state diffusion", Metallurgical and Materials Transactions, 12A, 965-971

Combeau, H., Appolaire, B. & Lesoult G. (1998)

« Recent progress in understanding and prediction of macro and mesosegregations", In B. G. Thomas and C. Beckermann, editors, Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes VIII. TMS (The Minerals, Metals and Materials Society), 1998.

Combeau, H., Drezet, J.-M., Mo, A., & Rappaz, M. (1996)

"Modeling of Microsegregation in Macrosegregation Computations", Metallurgical and Materials Transactions A, 27A, 2314-2327

Combeau H., Roch, F., Chevrier, J.C., Poitroult, I. & Lesoult, G. (1990)

"Advanced methods in Heat Transfer", GB, 1990, LC. Wrobel, ed., Springer-Verlag, NY, 1990, vol.3

COMSOL Multiphysics Modeling Guide, COMSOL 3.5 (2008)

Coriell, S.R. et McFadden, G.B. (1989)

“*Buoyancy effects on morphological instability during directional solidification*”, *Journal of Crystal Growth*, **94**, 513

Coriell, S.R. et McFadden, G.B. (2002)

“*Applications of morphological stability theory*”, *Journal of Crystal Growth* 237–239 8–13

Deal, A. (2004)

“*Enhanced morphological stability in Sb-doped Ge single crystals*”, PhD thesis, Univ. de Florida

deVahl Davis, G. (1983)

“*Natural convection of air in a square cavity: A benchmark numerical solution*”, *Int. J. for Num. Meth. in Fluids* **3**, 249-264

Dennis, B.H.; Dulikravich, G.S. (2002)

“*Magnetic field suppression of melt flow in crystal growth*”, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, **23**, 269–277

Donea J. & Huerta, A. (2003)

“*Finite Element Methods for Flow Problems*”, 2003 John Wiley & Sons, Ltd

Dost, S. & Lent, B. (2007)

“*Single Crystal Growth of Semiconductors from Metallic Solutions*,” Elsevier, Amsterdam

Dost, S., & Okano Y. (Editors), (2007)

“*Crystal Growth Under Applied Fields*”, *Research Signpost*, 37/661 (2), Trivandrum-695 023, Kerala, India, 2007.

Drew D.A. (1983)

“*Mathematical modeling of two-phase flow*,” *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **15**, 261-291

Durst, F., Melling, A. & Whitelaw, J.H (1974)

J. Fluid Mech. **64**, 111 (1974)

Ed Akin, J.; Tezduyar, T.E. (2004)

“*Calculation of the advective limit of the SUPG stabilization parameter for linear and higher-order elements*”, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, **193**, 1909–1922

El Ganaoui, M. & Bontoux, P. (1998)

“*An homogenisation method for solid–liquid phase change during directional solidification*”, *Numerical and Experimental Methods in Heat Transfer*, ASME, HTD, **361(5)**, 453–469.

El Ganaoui M., Prud'Homme, R. & Bennacer, R. Editeurs, (2007),

"Melting and solidification : processes and models", Comptes Rendus Mécanique. Vol. 335, Issues 5-6, May-June 2007.

Evans, J.W.; Seybert, C.D.; Leslie, F. & Jones, W.K. (2000)

"Suppression/reversal of natural convection by exploiting the temperature/compositional variation of magnetic susceptibility", Journal of Applied Physics, **88(7)**, 4347-4351

Fearn, R.M.; Mullin T. & Cliffe, K.A. (1990)

J. Fluid Mech. 64, 111 (1990)

Felicelli, S.D Heinrich, J.C. et Poirier D.R. (1991)

"Simulation of freckles during vertical solidification of binary alloys", Metall. Trans. B, 22B:847–859, 1991.

Felicelli, S.D., Heinrich, J.C., & Poirier, D.R. (1998a)

"Three-Dimensional Simulations of Freckles in Binary Alloys", J. Cryst. Growth, 191, pp. 879-888

Felicelli, S.D., Poirier, D.R., & Heinrich, J.C. (1998b)

"Modeling Freckle Formation in Three Dimensions during Solidification of Multicomponent Alloys", Metall. Mater. Trans., B, 29B, 847-854

Felicelli, S.D., Poirier, D.R. & Heinrich, J.C. (1997)

"Macrosegregation patterns in multicomponent alloys", J. Crystal Growth, 177, 145-161

Feller, R.J. & Beckermann, C. (1993)

"Modeling of the globulitic solidification of a binary metal alloy", Int. Comm. in Heat and Mass Transfer, **20**, 311-322

Flemings, M.C., (1974)

"Solidification Processing", McGraw Hill, New York

Flemings M.C. (2000)

"Our understanding of macrosegregation: Past and present", ISIJ International, 40(9):833–841

Flemings, M.C. & Nereo, G.E. (1967)

"Macrosegregation, part I.", Trans. Met. Soc. AIME, **239**, 1449–1461

Fletcher, C.A.J. (1991)

"Computational Techniques For Fluid Dynamics", Vol. 1, (Springer, 1991)

Ganapathysubramanian, B. & Zabaras, N. (2005)

"On the control of solidification using magnetic fields and magnetic field gradients", International Journal of Heat and Mass Transfer **48**, 4174–4189

Ganesan S. & Poirier D. R. (1990)

“Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification”, Metall. Trans. B, **21B**, 173–181

Gelfgat, A.Y. (1999)

“Different Modes of Rayleigh–Bénard Instability in Two- and Three-Dimensional Rectangular Enclosures”, Journal of Computational Physics, **156**, pp. 300–324.

Gelfgat, A.Y. & Bar-Yoseph, P.Z. (2001)

“The effect of an external magnetic field on oscillatory instability of convective flows in a rectangular cavity”, Phys. Fluids, **13(8)**, 2269-2278

Gelfgat, A.Y.; Bar-Yoseph, P.Z.; Solan, A. (2001)

“Effect of axial magnetic field on three-dimensional instability of natural convection in a vertical Bridgman growth configuration”, J. Cryst. Growth, **230**, 63-72

Gelfgat, A.Y.; Bar-Yoseph P.Z. & Yarin, A.L. (1997)

“On oscillatory instability of convective flows at low Prandtl number”, Journal of fluids engineering, Transactions of the ASME **119**, 823–829

Gelfgat, A.Y.; Bar-Yoseph, P.Z. & Yarin, A.I. (1999a)

“Stability of multiple steady states of convection in laterally heated cavities”, J. Fluid Mech., **388**, 315–334

Gelfgat, A.Y.; Bar-Yoseph, P.Z.; Yarin, A.I. (1999b)

“Non-symmetric convection flows in laterally heated rectangular cavities”, *IJCFD*, **11**, 261–273

Gouttebroze S. (2005)

« Modélisation 3D par Éléments finis de la macro ségrégation lors de la solidification d'alliages binaires », thèse de doctorat, École des mines de Paris, France.

Goyeau, B., Benihaddadene, T., Gobin D. & Quintard, M. (1997)

“Averaged Momentum Equation for Flow through a Nonhomogeneous Porous Structure”, Transport in Porous Media, **28**, 19–50

Goyeau, B., Benihaddadene, T., Gobin D. & Quintard, M. (1999)

“Numerical Calculation of the permeability tensor in a dendritic mushy zone”, Metall. and Mater. Trans. B, **30B**, 613-622

Gray, W.G. (1975)

“A derivation of the equations for multi-phase transport”, Chem. Eng. Science, **30**, 229-233

Gray, W.G. (1983)

“General conservation equations for multi-phase systems: IV- Constitutive theory including phase change”, Adv. Water Resources, **6**, pp. 130-140

Gu, J.P. & Beckermann, C. (1999)

Simulation of Convection and Macrosegregation in a Large Steel Ingot”, Metall. and Materials Transactions, **30A**, 1357-1366

Gulliver, G.H. (1913)

J. Inst. Met., Vol 9, 1913, p 120

Guo J. & Beckermann C. (2003)

“Three-Dimensional Simulation of Freckle Formation During Binary Alloy Solidification: Effect of Mesh Spacing”, Numerical Heat Transfer, Part A, 44: 559–576,

Hassanizadeh M. & Gray W.G. (1979),

“General conservation equations for multi-phase systems: I- Averaging procedure”, Adv. Water Resource, **2**, 131-144

Hassanizadeh M. & Gray, W.G. (1990)

“Mechanics and thermodynamics of multiphase flow in porous media including inter-phase boundaries”, Adv. Water Resources, 13

Hayase, T.; Humphrey, J.A.C. & Grief R. (1992)

J. Comp. Phys. Vol. 98 (1992), p. 108.

Hellawell A. (1990)

“Micro- and macro-segregation during alloy solidification”, in J. E. Lait and I. V. Samarasekera, editors, Proceedings of the F. Weinberg International Symposium on Solidification Processing, Hamilton, Ontario, **29**, 395–411

Herlach, D.M., Cochrane, R.F., Egry, I., Fecht H.J. et Greer, A.L. (1993)

“Containerless Processing in the Study of Metallic Melts and Their Solidification”, Int. Mater. Rev., **38**, 273–347

Hills, R.N., Loper, D.E. & Roberts, P.H. (1983)

“A thermodynamically consistent model of a mushy zone”, Q. J. Mech. Appl. Math., **36**, 505-539

Hof, B.; Juel, A.; Mullin, T. (2003)

“Magnetohydrodynamic damping of convective flows in molten gallium”, J. of Fluid Mechanics, **482**, 163-179

Holmes D.E. & Gatos H.C. (1981)

J. Electrochem. Soc, 128, 429.

Hebditch D.J. & Hunt, J.D. (1974)

Metall. trans. (1974), 5, 1557-1564.

Hung M.C. & Andereck, C.D. (1988)

Phys. Lett. A 132, 253 (1988)

Hunt, J.C.R. & Moreau R. (1976)

“Liquid-metal magnetohydrodynamics with strong magnetic fields: A report on Euromech 70”, *J. Fluid Mech.*, **78** part 2, 261-288

Huppert, H.E. (1990)

“The fluid mechanics of solidification”, *J. Fluid Mech.* **212**, 209-240

Hurle, D.T.J. (1966)

“Temperature oscillations in molten metals and their relationship to growth striate in melt-grown crystals”, *Phil. Mag.* **13**, 305-310.

Hurle, D.T.J. (1967)

In: *Crystal Growth*, ed. HS Peiser (Pergamon, Oxford, 1967) 65.

Hurle, D.T.J.; Jakeman E.; Johnson, C.P. (1974)

“Convective Temperature Oscillations in Molten Gallium”, *J. Fluid Mech.*, **64(3)**, 565-576

Hurle D., Jakeman, E. & Wheeler, A. (1982)

“Effect of Solutal Convection on the Morphological Stability of a Binary Alloy”, *Journal of Crystal Growth*, **58**, 163-179

Impey, M.D.; Riley, D.S.; Wheeler, A.A. & Winters, K.H. (1991):

“Bifurcation analysis of solutal convection during directional solidification”, *Phys. Fluids*, **A3(4)**, 535–550

Incropera, F.P. (1997)

“Effect of Buoyancy and Externally Induced Forces on the Solidification of Binary Mixtures”, Final report for DOE Contract No. DE-FG02-87ER13759, Project period (1987-1997)

Kämpfer T.U. (2002)

“Modeling of Macrosegregation Using an Adaptive Domain Decomposition Method”, Thèse de Doctorat ès Sciences de l'école Polytechnique Fédérale de Lausanne.

Katz, R.F. & Worster, M.G. (2008)

“Simulation of directional solidification, thermochemical convection, and chimney formation in a Hele-Shaw cell”, *Journal of Computational Physics*, **227**, 9823–9840

Kim D. & Brown, R. (1991)

J. of Crystal Growth 114 (1991) 411

Kobayashi, S. (1985)

Tetsu-to-Hagané (J. Iron Steel Inst. Jpn.), Vol 71, 1985, p S199, S1066

Koster, J.N., Seidel, T., & Derebail, R. (1997)

“A radiosopic technique to study convective fluid dynamics in opaque liquid metals,” J. Fluid Mech., 343, pp. 29-41

Krane, M.J.M. & Incropera, F.P. (1994)

“Analysis of the Effect of Shrinkage on Macrosegregation in Alloy Solidification”, In Transport Phenomena in Solidification, ASME HTD-Vol. 284, AMD-Vol. 182, pp. 13-28

Krane, M.J.M. & Incropera, F.P. (1995)

“Analysis of the Effect of Shrinkage on Macrosegregation in Alloy Solidification”, Metallurgical Transactions 26A, 2329-2339

Krane, M.J.M. & Incropera, F.P. (1997)

“Solidification of Ternary Metal Alloys. Part II: Prediction of Convective Phenomena and Solidification Behavior in Pb-Sb-Sn Alloys,” Int. J. Heat Mass Transfer 40, 3837-3847

Kurtz, W. & Fisher, D.J., (1984)

“Fundamentals of solidification” Trans Tech Pub

Kumar, V.; Dost, S.; Durst, F. (2007)

“Numerical Modeling of Crystal Growth under Strong Magnetic Fields: An Application to the Traveling Heater Method”, Appl. Math. Modelling, 31, 589-605

Lan, C.W., Lee, I.F. & Yeh, B.C. (2003)

“Three-dimensional analysis of flow and segregation in vertical Bridgman crystal growth under axial and transversal magnetic fields”, Journal of Crystal Growth, 254, 503–515

Lan, C.W. & Yeh, B.C. (2004)

“Three-dimensional analysis of flow and segregation in vertical Bridgman crystal growth under a transversal magnetic field with ampoule rotation”, Journal of Crystal Growth, 266, 200–206

Larson, D.J., Alexander, J.I.D., Gillies, D., Carlson, F.M., Wu J. & Black, D. (1994)

“NASA Conference Publication 3272, Launch +one year Science Review of USML-1”, 1994.

Lee J., Lee, K. & Mok, J. (2005)

“The effects of thermosolutal convection on macrosegregation during alloy solidification”, ISIJ International, 45(8), 1151-1159

Liu Weitao (2005)

“Finite element modeling of macrosegregation and thermomechanical phenomena in solidification processes”, thèse de doctorat, École des mines de Paris, France.

Liu, Y.C.; Dost, S.; Lent, B.; Redden, R.F. (2003)

“A Three-Dimensional Numerical Simulation Model for the Growth of CdTe Single Crystals by the Traveling Heater Method under Magnetic Field”, *J. Crystal Growth*, 254, 285-297

Liu, Y. C.; Dost, S.; Sheibani, H. (2004)

“A Three Dimensional Simulation for the Transport Structures in Liquid Phase Electroepitaxy under Applied Magnetic Field,” *Int. J. Transport Phenomena*, 6, 51-62

Ma, N. & Walker J.S. (1996)

“Magnetic damping of buoyant convection during semiconductor crystal growth in microgravity: Continuous random g-jitters”, *Phys. Fluids*, 8 (4), 944-953

Marle, C. (1982)

“On macroscopic equations governing multiphase flow with diffusion and chemical reactions in porous media”, *Inter. J. of Eng. Science*, 20(5), 643-662

Mechighel, F., El Ganaoui, M., Kadja, M., Pateyron, B., & Dost, S. (2009)

“Numerical Simulation of Three Dimensional Low Prandtl Liquid Flow in a Parallelepiped Cavity Under an external Magnetic Field”, *FDMP*, 2009

Mechighel, F., Kadja, M., El Ganaoui, M., & Pateyron, B. (2009)

“Study of Macrosegregation Defects Formation Caused by Double Diffusive Convective Flow during Solidification of a Binary Alloy

Mechighel, F., Pateyron, B., Kadja, M., El Ganaoui, M. & Dost, S. (2010)

“Numerical Simulation Study for the Effect of the Strength and the Direction of a Static Magnetic Field on the Transient Double-Diffusive Flow in Liquid Phase during an Alloy Solidification”, *Defect and Diffusion Forum*, 297-301, 97-104

Mehrabian, R., Keane, M. & Flemings, M.C. (1970)

“Interdendritic fluid flow and macrosegregation; influence of gravity”, *Metall. Trans.*, 1, 1209–1220

Mittal, S., Ratner, A., Hastreiter D. & Tezduyar, T.E. (1991)

“Space-time finite element computation of incompressible flows with emphasis on flows involving oscillating cylinders”, *International Video Journal of Engineering Research*, 83-96

Moreau, R. (1999)

“The fundamentals of MHD related to crystal growth”, *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials* 161-194

Mosbah, S. (2008)

“Multiple Scales Modeling of Solidification Grain Structures and Segregation in Metallic Alloys”, Thèse de Doctorat de l'école Nationale Supérieure des Mines de Paris

Müller, G.; Ostrogorsky, A. (1994):

“Convection in melt growth”, In Handbook of Crystal Growth (ed. D. T. J. Hurle), North-Holland, Amsterdam, **2**, 711-781

Müller, G. (1998)

“Melt growth of semiconductors”. Mater. Sci. Forum, **276-277**, pp-87-108

Mullins W.W. et Sekerka, R.F. (1964)

“The stability of the planar interface during solidification of dilute binary alloy”, Journal of applied Phys. **35**, 444

Neilson, D.G. & Incropera, F.P. (1993)

“Three-Dimensional Considerations of Unidirectional Solidification in a Binary Liquid”, Numerical Heat Transfer Part, A23, 1-20

Neilson, D.G. & Incropera, F.P. (1993)

“Experimental Study of Unidirectional Solidification of Aqueous Ammonium Chloride in a Cylindrical Mold with and without Rotation,” Experimental Heat Transfer **6**, 131-155

Neilson, D.G. & Incropera, F.P. (1991)

“Unidirectional solidification of a binary alloy and the effects of induced fluid motion”, Int. J. Heat Mass Transfer, **34(7)**, 1717-1732

Neumann, G. (1990)

“Three-dimensional numerical simulation of buoyancy driven convection in vertical cylinders heated from below”, J. Fluid Mech. **214**; 559-578

Ni, J. & Beckermann, C. (1993)

“Modeling of globulitic alloy solidification with convection,” J. Materials Processing Manufacturing Science, **2**, 217-231

Ni J. & Beckermann, C. (1991)

“A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena during Solidification”, Metall. Trans. B, **22B**, 349-361

Ni, J. & Incropera, F.P. (1995a)

“Extension of the Continuum Model for Transport Phenomena Occurring during Metal Alloy Solidification: Part 1 - The Conservation Equations”, Int. J. Heat Mass Transfer, **38**, 1271-1284

Ni, J. & Incropera, F.P. (1995b)

“Extension of the Continuum Model for Transport Phenomena Occurring during Metal Alloy Solidification: Part 2 - Microscopic Considerations”, Int. J. Heat Mass Transfer, **38**, 1285-1296

Nikrityuk, P. A. Eckert K. & Grundmann R. (2004)

“Electromagnetically for Forced Swirling Flow during Solidification of a binary Metal alloy”, Journal of Computational and Applied Mechanics, **5(2)**, 337-352

Ohanka, I. (1986)

“Mathematical analysis of solute redistribution during solidification with diffusion in solid phase”, Trans. ISIJ, **26**, 1045-1051

Ohnaka I. & Matsumoto, M. (1987)

Tetsu-to-Hagané (J. Iron Steel Inst. Jpn.), Vol 73, 1987, p 1698

Okada K.; Ozoe, H. (1992)

“Experimental heat transfer rates of natural convection of molten gallium suppressed under an external magnetic field in either the X, Y, or Z direction”, J. Heat Transfer, **114 (1)**, 107-114

Patankar S.V. (1980)

“Numerical heat transfer and fluid flow” (McGraw-Hill, New York 1980)

Piazza, I. Di; Ciofalo, M. (2002):

“MHD free convection in a liquid-metal filled cubic enclosure: I. Differential heating”, Inter. J. of Heat and Mass Transfer, **45**, 1477–1492

Piwonka T.S. & Flemings M.C. (1966)

“Pore formation in solidification”, Trans. Metall. Soc., 236:1157–1165,

Poirier, D. (1987)

“Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys”, Metall. Trans. B, 18B, 245-255

Poirier, D.R., Heinrich J.C. & Felicelli S.D. (1997)

“Simulation of Transport Phenomena in Directionally Solidified Castings,” in Proceedings of the Julian Szekely Memorial Symposium on Materials Processing, H.Y. Sohn, J.W. Evans and D. Apelian, eds., The Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, PA, 1997, pp. 393-410.

Prakash C. & Voller V. (1989)

“On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary solid-liquid phase change”, Numerical Heat Transfer B, **15**, 171-189

Prakash, C., Samrnonds, N. & Singhal, A.K. (1987)

“A fixed grid numerical methodology for phase change problems involving a moving heat source”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **30**, 2690-2694

Prescott, P.J.; Incropera, F.P. & Bennon W.D. (1991)

I. J. Heat Mass Tran. Vol. 34 (1991), p. 2351.

Prescott, P.J. & Incropera, F.P. (1992)

“The Effects of Undercooling and Recalescence on Transport Phenomena during Solidification of Binary Metal Alloys” In *Transport Phenomena in Materials Processing and Manufacturing*, ASME HTD-Vol. 196, pp. 31- 39

Prescott, P.J. & Incropera, F.P. (1993)

“Magnetically Damped Convection During Solidification of a Binary Metal Alloy”, *ASME Transactions, J. Heat Transfer* **115**, 302-310

Prescott, P.J. & Incropera, F.P. (1994)

“Convective Transport Phenomena and Macrosegregation during Solidification of a Binary Metal Alloy - I. Numerical Predictions”, *ASME Transactions, J. Heat Transfer*, **116**, 735-741

Prescott, P.J. & F.P. Incropera, (1995)

“The Effect of Turbulence on Solidification of a Binary Metal Alloy with Electromagnetic Stirring”, *ASME Transactions, J. Heat Transfer*, **117**, 716-724

Prescott, P.J. & Incropera, F.P. (1996a)

“Convective Heat and Mass Transfer in Alloy Solidification”, in *Advances in heat Transport*, **28**, 231-338

Prescott P.J. & Incropera, F.P. (1996b)

“Convection heat and mass transfer in alloy solidification”, In Dimous Poulidakos, editor, *Advances in Heat Transfer*, **28**, 231–338

Prescott, P.J., Incropera, F.P., & Bennon, W.D. (1991)

“Modeling of dendritic solidification systems: reassessment of the continuum momentum equation”, *Int. J Heat Mass Transfer*, **34**, 2351-2359

Prescott, P.J., Incropera, F.P. & Gaskell, D.R. (1994)

“Convective Transport and Macrosegregation during Solidification of a Binary Metal Alloy - II. Experiments and Comparisons with Numerical Predictions”, *ASME Transactions, J. Heat Transfer*, **116**, 742-749

Rappaz, M. (1989)

“Modeling of microstructure formation in solidification processes”, *International Materials Review*, **34**, 93-123

Rappaz, M. & Thévoz, Ph. (1987a)

“Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth”, *Acta Met.*, **35**, 1487-1497

Rappaz, M. & Thévoz, Ph. (1987b)

“Solute diffusion model for equiaxed dendritic growth: analytical solution”, *Acta Met.*, **35**, 2929-2933

Rappaz M. & Voller, V. (1990)

“Modeling of micro-macroseggregation in solidification processes”, *Met. Trans.* **21A**, 749-753

Ridder S.D., Kou S. & Mehrabian R. (1981)

“Effect of fluid flow on macroseggregation in axi-symmetric ingots”, *Metall. Trans. B*, **12B**, 435–447

Roux M.P. (2005),

« *Modélisation de la solidification Colonnaire et Équiaxe de Mélanges Binaires convection* », thèse de Doctorat de l’Université de Paris 6

Sampath R. & Zabaras, N. (2001)

“Numerical Study of Convection in the Directional Solidification of a Binary Alloy Driven by the Combined Action of Buoyancy, Surface Tension, and Electromagnetic Forces”, *Journal of Computational Physics* **168**, 384–411

Sheibani, H.; Dost, S.; Sakai, S.; Lent, B. (2003)

“Growth of Bulk Single Crystals Under Applied Magnetic Field By Liquid Phase Electroepitaxy”, *J. Crystal Growth*, **258(3-4)**, 283-295

Scheidegger, A.E. (1974)

“The physics of flow through porous media, chapter Hydraulic radius theories”, pages 135–144. University of Toronto Press, 3rd edition, 1974.

Scheil, E. & Metallkd. Z. (1942)

Vol 34, 1942, p 70

Sheu T.W.H., Rani H.P., Tan, T.-C., & Tsai, S.F. (2007)

“Multiple states, topology and bifurcations of natural convection in a cubical cavity”, *Computers & Fluids*

Schneider M.C. & Beckermann, C. (1995a)

“Formation of Macroseggregation by Multicomponent Thermosolutal Convection during the Solidification of Steel”, *Metall. and Mater. Trans. A*, **26A**, 2373-2388

Schneider M.C. & Beckermann, C. (1995b)

“Simulation of Micro-/Macroseggregation during the solidification of a low-alloy Steel”, *ISIJ International*, **35(6)**, 665-672

Schneider M.C. & Beckermann, C. (1995c)

“A numerical study of the combined effects of microseggregation, mushy zone permeability and flow, caused by volume contraction and thermosolutal convection, on microseggregation and eutectic formation in binary alloy solidification”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **38**, 3455-3473

Schneider, M.C., Gu, J.P., Beckermann, C., Boettinger, W.J. et Kattner, U.R. (1997)

“Modeling of Micro- and Macrosegregation and Freckle Formation in Single-Crystal Nickel-Base Superalloy Directional Solidification”, Metall. and Materials Transactions, **28A**, 1517-1531

Sezai, I. & Moharnad, A.A. (1999)

“Three-dimensional double-diffusive convection in a porous cubic enclosure due to opposing gradients of temperature and concentration,” J. Fluid Mech., **262**, 111-139

Singh, A. K. & Basu, B., (1995)

“Mathematical modeling of macrosegregation of iron carbon alloy: role of double diffusive convection”, Metallurgical and Materials Transactions, **26B**, 1069-1081

Szekely J. & Jassal, A. S. (1978)

“An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system”, Metall. Trans. B, **9B**, 389-398

Swaminathan C.R. & Voller V. R. (1992)

“A general enthalpy method for modelling solidification processes”, Metallurgical and Materials Transactions B, **23B**, 651-663

Tan F.L. (2005)

“An experimental study on channels formation during solidification of aqueous ammonium chloride”, Applied Thermal Engineering 25 (2005) 2169–2192

Tezduyar, T.E. (1992)

“Stabilized Finite Element Formulations for Incompressible Flow Computations”, Advances in Applied Mechanics, 28, 1-44

Tezduyar, T.E., Mittal S., & Shih, R. (1991)

“Time-accurate incompressible flow computations with quadrilateral velocity-pressure elements”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 87, 363-384

Thess, A., Votyakov, E., Knaepen, B. & Zikanov, O. (2007)

“Theory of the Lorentz force flowmeter”, New Journal of Physics **9** (2007) 299, pages 1-27

Thévoz, Ph., Rappaz M. & Desbiolles J.-L. (1990)

« 3-MOS: a general fem code for the prediction of microstructures in castings”, Light Metals, ed. Ch. M. Bickert (TMS Publ., Warrendale, PA, 1990), p. 975

Thompson M.E. & Szekely, J. (1988)

“Mathematical and physical modelling of double-diffusive convection of aqueous solutions crystallizing at a vertical wall”, J. Fluid Mech. 187 (1988) 409-433

Touihri, R.; Ben Hadid, H.; Henry, D. (1999)

“On the onset of convective instabilities in cylindrical cavities heated from below: I- Pure thermal case”, *Phys. Fluids*, **11**, 2078

Trivedi R. & Kurz, W. (1986)

“Morphological Stability of a Planar Interface under Rapid Solidification Conditions”, *Acta Metallurgica*, **34(8)**, 1663-1670

Utech H.P. & Flemings M.C. (1966)

J. Appl. Phys., **37**, (1966), 2021

Vannier, I., Combeau H., & Lesoult, G. (1993)

Mater. Sci. Eng., **1993**, *A172*, 317-321

Vizman, D., Eichler, S., Friedrich, J. & Müller, G. (2004)

“Three-dimensional modeling of melt flow and interface shape in the industrial liquid-encapsulated Czochralski growth of GaAs”, *Journal of Crystal Growth*, **266**, 396–403

Vizman, D., Eichler, S., Friedrich, J. & Müller, G. (2001a)

“Comparison of the predictions from 3D numerical simulation with temperature distributions measured in Si Czochralski melts under the influence of different magnetic fields”, *Journal-of-Crystal-Growth*. vol.230, no.1-2; p.73-80

Vizman, D., Eichler, S., Friedrich, J. & Müller, G. (2001b)

Journal of Crystal Growth, Volume 233, Issue 4, December 2001, Pages 687-698

Vizman, D., Fischer, B., Friedrich, J. & Müller, G. (2000a)

Advanced Computational Methods in Heat Transfer VI, (2000) 137-146.

Vizman, D., Fischer, B., Friedrich, J. & Müller, G. (2000b)

“3D numerical simulation of melt flow in the presence of a rotating magnetic field”, *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow* **10**, 366

Voller, V.R. & Prakash, C., (1987)

“A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase change problems”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **30**, 1709-1719

Voller V.R., Brent, A.D. & Prakash C. (1989)

“The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **32(9)**, 1719–1731

Volz, M.P., Walker, J.S., Schweizer, M., Cobb, S.D. & Szofran, F.R. (2005)

“*Bridgman Growth of Germanium crystals in a Rotating Magnetic Field*”, Journal of Crystal Growth **282** (2005) 305–312

Wang C.Y., & Beckermann, C. (1993)

“*A unified solute diffusion model for columnar and equiaxed dendritic alloy solidification*”, Materials Science and Engineering, **A171**, 199-211

Wang C.Y., & Beckermann, C. (1996a)

“*Equiaxed Dendritic Solidification with Convection Part I. Multiscale/Multiphase Modeling*”, Metallurgical and Materials Transactions A, **27A**, 2755-2764

Watning D.A (1997)

“*Effects of static axial magnetic fields on directional solidification of HgCdTe*”, Thèse de PhD, MIT

Whitaker, S. (1969)

“*Advances in theory of fluid motion in porous media*”, Industrial and Eng. Chem., **61(12)**, 14-28

Worster, M.G. (1986)

“*Solidification of an alloy from a cooled boundary*”, J. Fluid Mech., **167**, 481-501

Worster, M.G. (1991)

“*Natural convection in a mushy layer*”, J. Fluid Mech., **224**, 335–359

Worster M.G. (1997)

“*Convection in Mushy Layers*”, Annu. Rev. Fluid Mech., **29**, 91–122

Yang G.Z. & Zabaras, N. (1998)

“*The Adjoint Method for an Inverse Design Problem in the Directional Solidification of Binary Alloys*”, Journal of Computational physics **140**, 432–452

Yildiz, E.; Dost, S. (2007)

“*The Combined Effect of Rotating and Static Magnetic Fields in Liquid Phase Diffusion Growth of SiGe*”, J. Crystal Growth, **303(1)**, 279-283

Yildiz, E., Dost, S., Yildiz, M. (2006)

“*A numerical simulation study for the effect of magnetic fields in liquid phase diffusion growth of SiGe single crystals*”, Journal of Crystal Growth **291**, 497–511

Yilzid, M. (2005)

“*A Combined Experimental and Modeling Study for the Growth of SixGe_{1-x} Single Crystals by Liquid Phase Diffusion (LPD)*”, PhD thesis University of Victoria

Yu P.Y. & Cardona, M. (1996)

“*Fundamentals of semiconductors*”, Springer

Zabaras N. & Samanta, D. (2004)

"A stabilized volume-averaging finite element method for flow in porous media and binary alloy solidification processes", Int. J. Numer. Meth. In Engng., 60 (5), 1-38

Zaidat, K. (2005)

« Influence d'un champ magnétique glissant sur la solidification dirigée des alliages métalliques binaires »,
Thèse de Docteur de L'INPG