



HAL
open science

Modélisation numérique de la solidification et de la ségrégation des impuretés lors de la croissance du silicium photovoltaïque à l'aide d'une méthode originale de maillage glissant

Virgile Tavernier

► **To cite this version:**

Virgile Tavernier. Modélisation numérique de la solidification et de la ségrégation des impuretés lors de la croissance du silicium photovoltaïque à l'aide d'une méthode originale de maillage glissant. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université de Lyon, 2018. Français. NNT : . tel-02094440v1

HAL Id: tel-02094440

<https://hal.science/tel-02094440v1>

Submitted on 9 Apr 2019 (v1), last revised 17 Jul 2019 (v2)

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

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



INSA

N°d'ordre NNT : 2018LYSEI120

THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LYON
opérée au sein de
I'INSA Lyon

Ecole Doctorale N° 162
Mécanique, Energétique, Génie civil et Acoustique (MEGA)

Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Soutenue publiquement le 19/12/2018, par :
Virgile TAVERNIER

**Modélisation numérique de la solidification
et de la ségrégation des impuretés lors de la
croissance du silicium photovoltaïque à
l'aide d'une méthode originale
de maillage glissant**

Devant le jury composé de :

Duffar, Thierry
Kaddeche, Slim
Mokhtari, Faïza
Stelian, Carmen
Botton, Valéry
Albaric, Mickael
Millet, Séverine

Professeur, Grenoble INP
Professeur, INSAT, Tunis (Tunisie)
Professeure, USTHB, Alger (Algérie)
Docteure HDR
Professeur, INSA Lyon, LMFA
Ingénieur de recherche, CEA-INES
Maître de Conférences, UCBL Lyon I, LMFA

Président
Rapporteur
Rapporteuse
Examinatrice
Directeur de thèse
Co-encadrant
Co-encadrante

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

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
CHIMIE	<u>CHIMIE DE LYON</u> http://www.edchimie-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage secretariat@edchimie-lyon.fr INSA : R. GOURDON	M. Stéphane DANIELE Institut de recherches sur la catalyse et l'environnement de Lyon IRCELYON-UMR 5256 Équipe CDFA 2 Avenue Albert EINSTEIN 69 626 Villeurbanne CEDEX directeur@edchimie-lyon.fr
E.E.A.	<u>ÉLECTRONIQUE,</u> <u>ÉLECTROTECHNIQUE,</u> <u>AUTOMATIQUE</u> http://edeea.ec-lyon.fr Sec. : M.C. HAVGOUDOUKIAN ecole-doctorale.eea@ec-lyon.fr	M. Gérard SCORLETTI École Centrale de Lyon 36 Avenue Guy DE COLLONGUE 69 134 Écully Tél : 04.72.18.60.97 Fax 04.78.43.37.17 gerard.scorletti@ec-lyon.fr
E2M2	<u>ÉVOLUTION, ÉCOSYSTÈME,</u> <u>MICROBIOLOGIE, MODÉLISATION</u> http://e2m2.universite-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : H. CHARLES secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr	M. Philippe NORMAND UMR 5557 Lab. d'Ecologie Microbienne Université Claude Bernard Lyon 1 Bâtiment Mendel 43, boulevard du 11 Novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX philippe.normand@univ-lyon1.fr
EDISS	<u>INTERDISCIPLINAIRE</u> <u>SCIENCES-SANTÉ</u> http://www.ediss-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : M. LAGARDE secretariat.ediss@univ-lyon1.fr	Mme Emmanuelle CANET-SOULAS INSERM U1060, CarMeN lab, Univ. Lyon 1 Bâtiment IMBL 11 Avenue Jean CAPELLE INSA de Lyon 69 621 Villeurbanne Tél : 04.72.68.49.09 Fax : 04.72.68.49.16 emmanuelle.canet@univ-lyon1.fr
INFOMATHS	<u>INFORMATIQUE ET</u> <u>MATHÉMATIQUES</u> http://edinfomaths.universite-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage Tél : 04.72.43.80.46 Fax : 04.72.43.16.87 infomaths@univ-lyon1.fr	M. Luca ZAMBONI Bât. Braconnier 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.26.23.45.52 zamboni@maths.univ-lyon1.fr
Matériaux	<u>MATÉRIAUX DE LYON</u> http://ed34.universite-lyon.fr Sec. : Marion COMBE Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.87.12 Bât. Direction ed.materiaux@insa-lyon.fr	M. Jean-Yves BUFFIÈRE INSA de Lyon MATEIS - Bât. Saint-Exupéry 7 Avenue Jean CAPELLE 69 621 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.85.28 jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr
MEGA	<u>MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE,</u> <u>GÉNIE CIVIL, ACOUSTIQUE</u> http://edmega.universite-lyon.fr Sec. : Marion COMBE Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.87.12 Bât. Direction mega@insa-lyon.fr	M. Jocelyn BONJOUR INSA de Lyon Laboratoire CETHIL Bâtiment Sadi-Carnot 9, rue de la Physique 69 621 Villeurbanne CEDEX jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr
ScSo	<u>ScSo*</u> http://ed483.univ-lyon2.fr Sec. : Viviane POLSINELLI Brigitte DUBOIS INSA : J.Y. TOUSSAINT Tél : 04.78.69.72.76 viviane.polsinelli@univ-lyon2.fr	M. Christian MONTES Université Lyon 2 86 Rue Pasteur 69 365 Lyon CEDEX 07 christian.montes@univ-lyon2.fr

*ScSo : Histoire, Géographie, Aménagement, Urbanisme, Archéologie, Science politique, Sociologie, Anthropologie

« Essentially, all models are wrong, but some are useful »

George E. P. Box, 1978

« Il n'y a que COMSOL qui m'aïlle »

Pierrick Merino, 2013

Remerciements

J'ai passé presque dix années sur le campus de LyonTech – La Doua, depuis ma rentrée en premier cycle de l'INSA, en 2009, jusqu'à l'écriture de ces lignes, en 2019. Dix ans. Dix belles années qui m'ont forgées et durant lesquelles je n'ai jamais regretté les choix qui m'ont conduit ici, aujourd'hui. Bien sûr, c'est un chemin que je n'ai pas parcouru seul ; et je souhaite remercier toutes celles et ceux qui m'ont accompagné ces dernières années, durant lesquelles j'ai travaillé à cette thèse.

Pour m'avoir accompagné et guidé au quotidien durant cette thèse, je souhaite tout d'abord remercier mes encadrants. Je remercie donc grandement Séverine Millet, pour sa patience, pour sa bienveillance, et pour son soutien. Je la remercie également pour avoir plongé de nombreuses fois avec moi, sans hésiter, dans les méandres de mes lignes de codes et de mes simulations numériques. Je remercie également grandement Valéry Botton, pour son humanité, pour sa disponibilité et pour ses encouragements. Je le remercie aussi pour avoir su garder un certain recul vis-à-vis de mon travail, indispensable pour me relancer quand je me focalisais trop sur les détails. Je les remercie tous les deux pour m'avoir fait progresser, scientifiquement et humainement, et pour m'avoir fait confiance quand, moi-même, je n'y croyais plus.

Je souhaite également remercier Daniel Henry, pour son humilité, pour sa rigueur, et pour ses interventions toujours très pertinentes. Mes avancées significatives ont souvent été liées, directement ou indirectement, à une de ses questions ou une de ses remarques.

Je remercie aussi Mickael Albaric pour son encadrement, efficace et cordial, depuis le CEA-INES en Savoie. Sa vision sur les perspectives et sur les applications de mes travaux m'a été précieuse jusqu'au jour de ma soutenance.

Je remercie évidemment Faïza Mokhtari et Slim Kaddeche pour avoir accepté d'être mes rapporteurs, pour l'enthousiasme qu'ils ont manifesté à la lecture de ces travaux, et pour leurs retours chaleureux suite à ma soutenance. Je remercie également Thierry Duffar et Carmen Stelian, qui ont aussi accepté de faire partie de mon jury, pour l'intérêt qu'ils ont porté à cette étude, pour leurs retours francs et précis, et pour les informations complémentaires qu'ils ont apportées lors de nos discussions.

Je remercie les différentes parties sans qui ces travaux n'auraient pas pu être financés : la Région Auvergne-Rhône-Alpes, à travers l'ARC-Énergies, l'Institut Carnot Ingénierie@Lyon, ainsi que le PHC Maghreb.

Je souhaite encore remercier tous les membres du LMFA, et plus particulièrement Simon Dagois-Bohy, Sophie Miralles et Nicolas Rivière, pour leurs conseils avisés, et Emmanuel Mignot, pour sa franchise et son énergie, ainsi que pour m'avoir supporté tout ce temps dans le bureau du fond du couloir. Je souhaite également remercier Nadira Matar, pour tout le soutien logistique et pour la bonne humeur qu'elle apporte au laboratoire.

Pour la bonne ambiance du laboratoire, pour les discussions passionnantes et pour tous les bons moments partagés ensemble, je souhaite aussi remercier chaleureusement les doctorants et les doctorantes du LMFA : Nouhayla, Tom, Clément, Idir, Sébastien, Abdessamed, Djibrilla, Armando, Hossein, Sarah, Gabriel, Marc, Gaby, Brahim, et toutes celles et ceux que j'ai croisé au détour d'un couloir et que je n'ai pas nommé ici. Ce fut un vrai plaisir de travailler à leurs côtés, et je souhaite du courage pour la fin de leurs thèses à celles et ceux qui n'ont pas encore soutenu, et du bonheur à toutes et à tous pour la suite.

J'ai également des remerciements pour mes compagnons de galère et de pique-nique : Charlotte, Pierrick, Mathilde, Clément, et Sophie. J'espère que ces moments de convivialité pourront se poursuivre encore longtemps, thèse ou non !

Je remercie encore Arnaud Sandel et Jean-Philippe Ferrière, pour cette expérience d'enseignement exceptionnelle avec eux au sein de la Lanière K. Ces trois années en tant qu'enseignant m'ont non seulement donné une respiration stable et régulière dans cette course effrénée, mais ont aussi attisé en moi une flamme vive, que je n'entends pas laisser s'éteindre si vite.

Je remercie ma famille, à qui je dois d'être arrivé jusque-là aujourd'hui, et qui m'a donné (et qui me donne encore !) la confiance, l'amour, et le bonheur qui font de moi la personne que je suis.

Je remercie Davyd, sans qui l'INSA ne serait pas ce qu'elle a été pour moi. Grâce à lui et au théâtre, nous avons formé un groupe à l'amitié profonde et sincère, avec des liens solides, de ceux que l'on tisse et dont on se trame.

Je remercie mes amis, pour m'avoir tenu au cœur et aux poumons tout au long de ce marathon. Il suffit parfois d'un rien, d'un sourire fugace ; et c'est déjà précieux.

Je remercie bien sûr Pauline, pour son amour et son soutien. Elle m'a tant donné pour que je puisse écrire cet ouvrage, qu'elle ne lira pourtant – bien qu'elle m'assure le contraire – jamais !

Et enfin, s'il est possible de remercier un lieu : je remercie ces vieilles et fidèles planches de la scène de la Rotonde, qui savent bien tout ce que je leur dois.

La Région

Auvergne-Rhône-Alpes



Thèse réalisée au

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique
LMFA - UMR CNRS 5509
INSA Lyon - Campus LyonTech La Doua
Bâtiment Joseph Jacquard (1er étage)
20 Avenue Albert Einstein
69621 VILLEURBANNE Cedex (France)

Sous la direction de

Valéry BOTTON
Séverine MILLET
Mickael ALBARIC

valery.botton@insa-lyon.fr
severine.millet@univ-lyon1.fr
mickael.albaric@cea.fr

Financement

Allocation doctorale de recherche de la Région Rhône-Alpes



Résumé

Les panneaux photovoltaïques ont pris ces dernières années une place importante dans le secteur de l'énergie. Les performances de ces panneaux dépendent notamment de la qualité et de l'homogénéité du silicium utilisé et des impuretés qu'il contient. Pour obtenir du silicium photovoltaïque, on peut utiliser un procédé de solidification dirigée afin d'obtenir un lingot de silicium de grade photovoltaïque à partir de silicium de grade métallurgique. Cette approche reste aujourd'hui difficile à simuler efficacement en raison de l'aspect multi-échelle du procédé et du suivi de l'interface mobile avec des transferts de masse et de chaleur à l'interface solide/liquide. Cette thèse présente la mise en œuvre d'une méthode originale de maillage glissant proposée pour réaliser un suivi adaptatif de l'interface mobile, afin d'améliorer l'efficacité des simulations. Dans un premier temps, la modélisation de la solidification dirigée d'un corps pur avec un tel maillage glissant est validée à l'aide d'une solution analytique dans une configuration diffusivo de référence. L'impact de la méthode proposée est ensuite étudié dans une configuration de type Bridgman vertical en présence de convection naturelle dans la phase liquide. Dans un second temps, on s'intéresse à la ségrégation des impuretés dans cette même configuration. Pour cela, on propose une modélisation spécifique du rejet d'impuretés à l'interface, et on étudie l'impact sur les simulations de la méthode de maillage glissant proposée. Les résultats et les gains de performance pour les simulations sont discutés en faisant varier des paramètres de calcul et par comparaison avec des données de la littérature.

Mots clés : *Simulation, Solidification, Ségrégation, Maillage glissant, Silicium photovoltaïque*

Abstract

In recent years, photovoltaic panels took a key role in the energy sector. The efficiency of these panels depends notably on the quality of the processed silicon ingots and on their homogeneity regarding the impurities they include. In order to process photovoltaic silicon, one can use a directional solidification process to obtain a solar grade silicon ingot from a metallurgical grade silicon feedstock. This approach is still nowadays hard to simulate with efficiency because of the multi-scales aspects of the process and because of the front tracking of the interface, where some heat and mass transfer occurs. This thesis presents the implementation of an original moving mesh method, proposed in order to perform an adaptive front tracking of the moving interface. The aim is to improve the efficiency of the numerical simulations. In a first time, the directional solidification model of a pure substance with such a moving mesh is validated against an analytical solution based on a purely diffusive reference configuration. The influence of the proposed method is then studied on a vertical Bridgman configuration with natural convection in the liquid phase. In a second time, the segregation of impurities is considered in the same configuration. For this study, a specific model for the rejection of impurities is proposed at the solid/liquid interface, and the influence of the proposed moving mesh method on the results is as well explored. Finally, the results and the performance improvements for the numerical simulations are discussed through variations of the calculation parameters and through comparisons against data from the literature.

Keywords: *Simulation, Solidification, Segregation, Moving Mesh, Photovoltaic silicon*

Table des matières

Résumé.....	11
Table des matières	13
Table des variables.....	15
Chapitre I. Introduction : état de l’art.....	19
A. Le silicium photovoltaïque.....	21
B. Procédés de solidification	23
C. Phénomènes physiques mis en jeu.....	24
1) Morphologie de l’interface.....	24
2) Diagramme des phases.....	24
3) Régimes de ségrégation	28
4) Régimes d’écoulement.....	29
5) Autres phénomènes physiques	29
D. Simulations numériques.....	30
E. Positionnement des travaux présentés	33
Chapitre II. Modélisation thermique et hydrodynamique	35
A. Mise en équations	37
1) Fraction solide	37
2) Équations de Navier-Stokes	38
3) Équation de l’énergie	39
4) Terme de Boussinesq.....	39
5) Terme de Darcy	39
6) Paramètres thermo-physiques.....	40
7) Équations pour un domaine solide (creuset)	41
B. <i>Overset Mesh</i>	41
C. Le cas de Stefan.....	44
1) Formulation du cas de Stefan	44
2) Modélisation du cas de Stefan.....	47
D. Le cas de Stelian.....	49
E. Suivi du front et effet de prédiction.....	52
F. Critères de convergence.....	54

Table des matières

Chapitre III. Résultats pour les cas de validation en thermique et hydrodynamique	57
A. Résultats obtenus pour le cas de Stefan	59
B. Résultats obtenus pour le cas de Stelian	64
Chapitre IV. Modélisation de la ségrégation	77
A. Équation de transport d'espèces	79
B. Rejet de soluté à l'interface.....	80
1) Méthode enthalpique.....	81
2) Cas d'une simulation avec maillage fixe	84
3) Cas d'une simulation avec maillage mobile.....	87
C. Post-traitement des données dans la phase solide	92
Chapitre V. Validation de la ségrégation	95
A. Résultats pour les cas de validation de la ségrégation	98
B. Pistes de développements pour améliorer la conservation du soluté.....	107
Conclusion.....	113
Bibliographie	117

Table des variables

Les différentes variables utilisées dans ce manuscrit sont présentées et récapitulées dans le Tableau 0-1 ci-dessous :

Nom de la variable	Description	Unité
T	Température	K
T^*	Température normalisée	
T_h	Température imposée (chaude)	K
T_c	Température imposée (froide)	K
$T_{liquidus}$	Température du liquidus	K
$T_{solidus}$	Température du solidus	K
T_l	Température dans le liquide	K
T_s	Température dans le solide	K
α	Fraction solide (volumique)	
t	Temps	s
ρ	Masse volumique	kg.m ⁻³
p	Pression	Pa
H	Enthalpie totale	J.kg ⁻¹
λ	Conductivité thermique	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
C_p	Capacité thermique	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹
D_{th}	Diffusivité thermique	m ² .s ⁻¹
St	Nombre de Stefan	
ϕ	Fraction massique en impuretés	
C_l	Concentration massique en impuretés de la phase liquide	kg.m ⁻³
C_s	Concentration massique en impuretés de la phase solide	kg.m ⁻³
$\langle C \rangle$	Concentration massique moyenne en impuretés	kg.m ⁻³
C_0	Concentration massique initiale en impuretés	kg.m ⁻³
C_l/C_0	Concentration normalisée de la phase liquide	
C_s/C_0	Concentration normalisée de la phase solide	
$\langle C \rangle/C_0$	Concentration moyenne normalisée	
D	Diffusivité des impuretés	m ² .s ⁻¹
S	Terme source volumique en impuretés	kg.m ⁻³ .s ⁻¹
G_{C_l}	Gradient de concentration de la phase liquide	kg.m ⁻⁴
α_{begin}	Fraction solide en début d'itération temporelle	
C_{old_int}	Concentration de la phase liquide à l'interface évaluée à la fin de l'itération temporelle précédente	kg.m ⁻³

Table des variables

F_{int}	Fonction filtre	
d	Déplacement du maillage entre deux itérations temporelles	m
$\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$	Coordonnées spatiales	m
\vec{v}	Vitesse	m.s ⁻¹
\vec{v}_g	Vitesse de grille	m.s ⁻¹
\vec{V}_{int}	Vitesse de l'interface	m
\vec{n}	Vecteur normal à l'interface	
\vec{f}_g	Terme de Boussinesq	
\vec{f}_D	Terme de Darcy	
\vec{T}	Tenseur des contraintes visqueuses	
x_{int}^{min}	Abscisse minimum sur le front de solidification	
x_{int}^{moy}	Abscisse moyenne sur le front de solidification	
N_{int}	Nombre de points issus de la discrétisation du front (isosurface)	

Indices et exposants

l	Indice utilisé pour désigner la phase liquide
s	Indice utilisé pour désigner la phase solide
cr	Indice utilisé pour désigner le creuset
i, j, n	Indices utilisés pour les itérations
*	Exposant utilisé pour les valeurs interpolées
int	Indice utilisé pour les valeurs à l'interface

Tableau 0-1 : Table des variables

Les différents paramètres physiques utilisés dans ce manuscrit sont présentés et récapitulés dans le Tableau 0-2 ci-dessous :

Paramètre	Description	Unités	Cas de Stefan (Silicium)	Cas de Stelian (GaInSb)
ρ_l	Masse volumique de la phase liquide	kg.m ⁻³	2560	6060
μ	Viscosité dynamique	Pa.s	7,510 ⁻⁴	2,2.10 ⁻³
β	Coefficient d'expansion thermique	K ⁻¹	---	1.10 ⁻⁴
h_{fusion}	Chaleur latente de fusion	J.kg ⁻¹	1,805.10 ⁶	3,13531.10 ⁵
λ_l	Conductivité thermique de la phase liquide	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	56,5	7,8
λ_s	Conductivité thermique de la phase solide	W.m ⁻¹ .K ⁻¹	56,5	17,1
Cp_l	Capacité thermique de la phase liquide	J.kg ⁻¹ .K ⁻¹	1032	300

Table des variables

Cp_s	Capacité thermique de la phase solide	$J.kg^{-1}.K^{-1}$	1032	330
ρ_{cr}	Masse volumique du creuset	$kg.m^{-3}$	---	1900
λ_{cr}	Conductivité thermique du creuset	$W.m^{-1}.K^{-1}$	---	37
Cp_{cr}	Capacité thermique du creuset	$J.kg^{-1}.K^{-1}$	---	$1,85.10^3$
T_f	Température de fusion	K	1687	983
ε	Écart à T_f	K	0,001	0,5
T_{h_0}	Température initiale supérieure à T_f	K	1737	1170
T_{c_0}	Température initiale inférieure à T_f	K	1637	930
GT_l	Gradient thermique dans la phase liquide	$K.m^{-1}$	---	4473,1
GT_s	Gradient thermique dans la phase solide	$K.m^{-1}$	---	6516,4
D_l	Diffusivité des impuretés dans la phase liquide	$m^2.s^{-1}$	---	$1,2.10^{-8}$
D_s	Diffusivité des impuretés dans la phase solide	$m^2.s^{-1}$	---	$1,2.10^{-11}$
k	Coefficient de partage		---	0,2
ϕ_0	Fraction massique initiale en impuretés		---	0,01
h	Hauteur du creuset	m	0,18	5.10^{-2}
R_{int}	Rayon intérieur du creuset	m	0,012	5.10^{-3}
R_{ext}	Rayon extérieur du creuset	m	---	6.10^{-3}
V_t	Vitesse de tirage	$m.s^{-1}$	---	1.10^{-6}
Δt	Pas de temps	s	0,01	1
L	Taille de maille	m	3.10^{-4}	25.10^{-5}
$L/2$	Taille de maille divisée par deux	m	$1,5.10^{-4}$	$12,5.10^{-5}$
$L/4$	Taille de maille divisée par quatre	m	$7,5.10^{-5}$	$6,25.10^{-5}$
$L/8$	Taille de maille divisée par huit	m	$3,75.10^{-5}$	---
\vec{g}	Vecteur gravité	$m.s^{-2}$	---	9,81
Res_{int}	Critère sur l'avancée de l'interface	m	1.10^{-9}	2.10^{-8}
Res	Critère sur les résidus des équations		1.10^{-8}	1.10^{-8}
$Niter_{min}$	Nombre d'itérations numériques minimum		10	10
$Niter_{max}$	Nombre d'itérations numériques maximum		1000	20

Tableau 0-2 : Table des paramètres

Chapitre I.

Introduction : état de l'art

Le contexte dans lequel s'inscrivent ces travaux de thèse est présenté dans cette partie. Je rappellerai dans un premier temps comment est obtenu le silicium photovoltaïque, je présenterai ensuite différents procédés de solidification que l'on peut rencontrer, et les différents phénomènes physiques à prendre en compte dans ces procédés. Je présenterai ensuite les pratiques actuelles de la communauté scientifique pour simuler numériquement ces procédés de solidification, et je positionnerai enfin cette thèse et ses apports par rapport à ces pratiques et à l'état de l'art.

A. Le silicium photovoltaïque

La première cellule photovoltaïque en matériau semi-conducteur est attribuée à Charles Fritts en 1883. Depuis cette découverte, la technologie a progressé, avec des applications dans le domaine de l'énergie et de l'industrie spatiale notamment, jusqu'à prendre une place d'importance ces dernières années dans le contexte économique et dans le secteur de l'énergie. Le secteur industriel cherche donc à réduire les coûts de production des cellules photovoltaïques tout en réduisant son impact sur l'environnement, et à augmenter le rendement des panneaux photovoltaïques.

Ces panneaux permettent d'obtenir de l'énergie électrique à partir de la lumière du soleil. Ils sont composés de plusieurs cellules photovoltaïques, qui émettent chacune des électrons sous l'effet de la lumière grâce à un phénomène photoélectrique. Ces cellules sont fabriquées à partir de matériaux semi-conducteurs, le plus généralement en silicium. Le silicium est un matériau très présent dans la croûte terrestre : on en trouve par exemple dans le sable ou dans le quartz. Le silicium utilisé dans l'industrie provient initialement de la silice (dioxyde de silicium SiO_2), transformé en silicium de grade métallurgique par un procédé de carbothermie. Le silicium de grade métallurgique est pur à 98% ou 99%, ce qui n'est pas suffisant pour la fabrication des panneaux photovoltaïques. En effet, pour être de grade solaire, le silicium doit avoir une pureté de 7n (99,99999%, soit 7 fois le chiffre 9). Pour obtenir du silicium de grade solaire à partir de silicium de grade métallurgique, il faut passer par une étape de purification. Deux voies sont possibles pour purifier le silicium : la voie chimique et la voie métallurgique.

La voie chimique permet d'obtenir du silicium de grade électronique de pureté comprise entre 9n et 12n, grâce à un procédé de purification en phase gazeuse, consistant notamment en une chloration du silicium suivie d'une distillation. Cette voie produit un silicium d'une pureté supérieure à la pureté du grade solaire. Or, comme les propriétés semi-conductrices du silicium (et par conséquent le rendement des cellules) dépendent des dopants qu'il contient, il faut réintroduire par la suite des dopants dans ce silicium de grade électronique dans le but de fabriquer des cellules photovoltaïques. Par ailleurs, les procédés chimiques employés ont un impact environnemental important. C'est pourquoi des méthodes de purification alternatives ont vu le jour.

La voie métallurgique permet d'éliminer en grande partie les impuretés métalliques présentes dans le silicium, afin d'obtenir un grade solaire de pureté 7n. Pour cela, on utilise le procédé de solidification dirigée, réalisée en atmosphère neutre et contrôlée, qui peut être répété plusieurs fois si nécessaire. Durant cette solidification dirigée, les impuretés se concentrent en haut du lingot grâce au phénomène de ségrégation (voir partie I.C). Il suffit alors de supprimer la partie supérieure du lingot avant d'effectuer les découpes pour la fabrication des cellules. Certaines impuretés ne ségrègent pas assez pour pouvoir être éliminées efficacement avec cette méthode : c'est le cas du bore et du phosphore. Pour les éliminer, on utilise une évaporation sous vide pour le phosphore, et une oxydation par des gaz réactifs, avec une torche à plasma, pour le bore. Le procédé de solidification dirigée, utilisé pour la purification, permet aussi de réaliser la cristallisation du silicium, afin d'obtenir un lingot solidifié avec une ou plusieurs orientations cristallines [Delannoy, 2012 ; Chatelain, 2016].

Le silicium ainsi obtenu peut être monocristallin ou polycristallin, en fonction des conditions de la solidification et en fonction du type de procédé employé. Le rendement des cellules photovoltaïques dépend du type de silicium employé : le silicium polycristallin permet à l'heure actuelle d'obtenir jusqu'à 20% de rendement, tandis que le silicium monocristallin permet d'atteindre jusqu'à 25% de rendement. Le silicium monocristallin permet donc d'obtenir de meilleurs rendements,

mais il coûte plus cher à produire que le silicium polycristallin. Ce dernier peut aussi être produit en plus grande quantité, ce qui contribue à faire baisser son coût.



Figure I-1 : Four ECM PV600 utilisé pour la cristallisation de lingots de silicium de grandes dimensions (Source ECM-Greentech). Le creuset de taille G6 (environ $1\text{m} \times 1\text{m} \times 34\text{cm}$ pour un lingot de 800kg) permet de solidifier le lingot en un cycle de l'ordre de 70 à 80 heures.

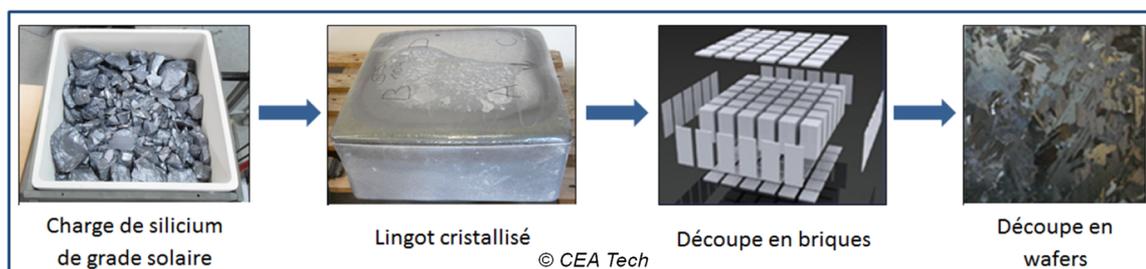


Figure I-2 : Étapes pour la fabrication des cellules photovoltaïques (Source CEA Tech). De potentielles étapes de purification entre la charge de grade solaire et l'obtention du lingot cristallisé ne sont pas représentées.

La Figure I-1 présente un four de solidification dirigée typique utilisé pour de la production à l'échelle industrielle. Le lingot de silicium est visible au centre de l'image, le four étant représenté en position ouverte (la partie inférieure du four est abaissée). Ce lingot est obtenu par solidification à partir d'une charge de silicium de grade solaire, elle-même obtenue après plusieurs étapes de purification du silicium de grade métallurgique par changement(s) de phase (ces étapes ne sont pas représentées sur la Figure I-2). Pour fabriquer les cellules photovoltaïques, on découpe et on se débarrasse généralement des bords du lingot, comme illustré sur la Figure I-2 : ces derniers sont en effet plus pollués en raison des échanges de matière avec les parois du creuset qui peuvent survenir au cours de la solidification. On se débarrasse également de la partie haute du lingot, dans laquelle se concentrent les impuretés à la fin de solidification. Le lingot est alors découpé en briques, qui sont elles-mêmes coupées en tranches fines à l'aide d'un fil diamant enroulé autour de bobines cylindriques. Ces tranches de silicium appelées « wafers » (environ une dizaine de centimètres de côté et de quelques centaines de micromètres d'épaisseur) sont ensuite traitées chimiquement afin de leur donner une surface active. Cette surface prend d'ailleurs à cette occasion un aspect bleu caractéristique

des panneaux solaires. Les cellules photovoltaïques ainsi obtenues sont ensuite montées par module de plusieurs unités afin de former un panneau fonctionnel.

B. Procédés de solidification

Divers procédés de solidification de matériaux sont actuellement utilisés à des fins industrielles et étudiés expérimentalement. On s'intéresse plus particulièrement aux procédés de solidification dirigée, qui permettent, en contrôlant les conditions thermiques au cours de la solidification, d'avoir un contrôle assez fin sur la croissance du solide formé. Il existe plusieurs procédés de solidification dirigée, qui sont utilisés dans des buts différents. On a, d'une part, les tirages de type Bridgman, auxquels on s'intéressera plus en détail par la suite : cette technique met en œuvre un creuset et un élément chauffant appliquant un gradient de température contrôlé sur le creuset. Deux possibilités existent : dans le cas d'un creuset mobile, le creuset est lentement translaté lors du tirage, de manière à refroidir progressivement le creuset d'un bout à l'autre, tandis que dans le cas d'un creuset fixe, c'est l'élément chauffant qui est déplacé. Dans un cas comme dans l'autre, la solidification est contrôlée par la vitesse de translation d'un élément par rapport à l'autre, appelée vitesse de tirage. Cette technique permet d'obtenir des lingots monocristallins ou polycristallins en fonction des conditions du tirage. Les fours Bridgman ont généralement une géométrie axisymétrique, mais il existe des fours permettant d'obtenir des lingots rectangulaires de grandes dimensions, comme ceux qui sont localisés à l'INES en Savoie. Il existe également d'autres procédés de tirage, comme le procédé Czochralski ou le procédé Kyropoulos ; qui sont plus adaptés à l'obtention de monocristaux. Le procédé Czochralski a d'ailleurs été étudié et des propositions pour améliorer la géométrie du creuset ont déjà été publiées [Mokhtari et al., 2006 ; Mokhtari et al., 2009]. Pour ces procédés, un germe monocristallin est plongé à la surface du bain de matériau liquide contenu dans un creuset. Ce germe est ensuite tiré lentement vers le haut au fur et à mesure que le liquide se solidifie sur le germe, tandis que le creuset tourne lentement tout au long du processus.

Ces procédés de solidification ont des applications industrielles : la production de silicium pour l'industrie photovoltaïque, mais aussi la production de cristaux de silicium destinés à l'industrie micro-électronique, ou la production de cristaux de saphir pour des optiques destinées à des lasers ou pour de la verrerie de luxe (de tels cristaux sont par exemple produits à l'Institut Lumière Matière à l'Université de Lyon). De nombreux matériaux peuvent être utilisés dans ces procédés de solidification, comme le saphir [Ghezal et al., 2012 ; Zhang et al., 2013 ; Stelian and Duffar, 2017], ou les alliages à base de gallium et d'antimoine (GaSb, GaInSb) [Barat et al., 1999 ; Stelian et al., 2004 ; Mitric et al., 2006], ou les alliages à base de mercure et de tellure (HgCdTe) [Hyun Kim and Brown, 1991], ou encore le silicium. Quelques soient les matériaux utilisés dans ces procédés, il est nécessaire de bien contrôler la vitesse de tirage et la thermique afin de garantir la stabilité de l'interface. Si l'on s'intéresse plus particulièrement au silicium destiné à l'industrie photovoltaïque, plusieurs configurations cristallines peuvent être intéressantes. Pour obtenir du silicium monocristallin, le procédé Czochralski est le plus adapté. Le procédé Bridgman est plus utilisé pour obtenir du silicium polycristallin [Hisamatsu et al., 2009 ; Bellmann et al., 2010]. Pour obtenir du silicium de type monolike, on utilise le procédé Bridgman avec un ou plusieurs germes monocristallins dans le creuset, afin de réaliser une reprise sur germe et d'obtenir un cristal avec un ou quelques orientations cristallines seulement [Black et al., 2012].

Comme on le verra dans la partie suivante, les phénomènes convectifs ont une forte influence sur le transport des impuretés dans la phase liquide et sur leur répartition finale dans le lingot (on parle de ségrégation des impuretés). Afin d'améliorer la convection dans le bain liquide, plusieurs techniques sont possibles : on peut simplement exploiter la convection naturelle, comme le présente Kaddeche dans un four Bridgman vertical [Kaddeche et al., 1996], ou introduire des dispositifs spécifiques de brassage, qui peuvent être mécaniques, comme l'a présenté Chatelain [Chatelain, 2016], ou magnétiques [Stelian et al., 2004 ; Stelian et al., 2005 ; Mitric et al., 2006]. D'autres solutions peuvent encore être envisagées, comme un brassage par jet d'ultrasons, actuellement en cours de développement à l'INES en Savoie suite aux travaux de Moudjed [Moudjed et al., 2014a ; Moudjed et al., 2014b]. On peut aussi citer des travaux de Bellmann et Meese [Bellmann and Meese, 2011] sur les

effets de la rotation du creuset pour modifier la ségrégation radiale. Pour étudier la ségrégation au cours de la solidification, et pour étudier l'influence des différents phénomènes physiques sur celle-ci, plusieurs configurations expérimentales ont été créées et étudiées. Parmi les dispositifs expérimentaux existants, on pourra notamment citer le four VB2 à Grenoble (parfois appelé dans la littérature « the Grenoble furnace »), un four Bridgman vertical axisymétrique pour lequel les conditions thermiques sont plutôt bien connues. Les résultats expérimentaux obtenus grâce à ce four, comme les données obtenues par Barat [Barat et al., 1999], peuvent donc être considérées comme de bonnes références.

C. Phénomènes physiques mis en jeu

Le silicium photovoltaïque peut être assimilé, avec les impuretés qu'il contient, à un alliage métallique faiblement concentré à faible nombre de Prandtl. Pour un tel matériau, dans la phase liquide, les effets liés à la conduction thermique sont suffisamment rapides pour que le champ de température soit peu influencé par les vitesses de l'écoulement présent dans le fluide. Autrement dit, les transferts de chaleur par conduction sont prépondérants par rapport aux transferts de chaleur par convection. Lors d'une solidification dirigée d'un tel alliage réalisée grâce au déplacement de gradients thermiques à une certaine vitesse, appelée vitesse de tirage, l'interface solide/liquide progresse sous l'influence du champ thermique.

1) Morphologie de l'interface

La morphologie de l'interface varie en fonction des différents régimes de solidification, déterminés en fonction de la vitesse de tirage imposée [Boutet, 1999]. Lorsque la vitesse de tirage est lente, le front de solidification est lisse et bien défini : on parle de solidification en régime de front plan. On pourra noter que ce régime de solidification est adapté à l'obtention de monocristaux, pour lesquels l'interface doit rester stable au cours du tirage. Au-delà d'une vitesse critique, le front de solidification se déstabilise pour former un front cellulaire, avec des parties du front en saillies appelées « cellules » et d'autres parties en creux, plus étroites, appelées « sillons ». Pour des vitesses de tirage croissantes, le front de solidification change encore de morphologie et devient dendritique : l'espacement entre les cellules s'accroît, la longueur des cellules augmente et des branches secondaires apparaissent. Par conséquent, dans ce cas, le front de solidification n'est plus lisse. Des cas de solidification en régime dendritique ont été étudiés par exemple par Voller, avec des simulations numériques par méthode enthalpique [Voller, 2008]. Le cas de solidification en régime de front plan, qui nous intéresse plus particulièrement dans le cadre de cette thèse, a été étudié dans différentes configurations et avec différentes approches et méthodes numériques qui seront présentées par la suite (voir partie I.D).

2) Diagramme des phases

Lors de la solidification, d'autres phénomènes ont lieu à l'interface solide/liquide : il y a d'une part un transfert de chaleur à l'interface, lié au rejet de chaleur latente lors du changement d'état du matériau, et d'autre part un transfert de masse à l'interface en lien avec la ségrégation des impuretés dans le matériau. En effet, les impuretés ne sont pas solubles de la même façon dans la phase solide et dans la phase liquide. Dans cette étude, on considèrera que les impuretés sont plus solubles dans la phase liquide que dans la phase solide. Par conséquent, au cours du procédé de solidification, la concentration en impuretés dans une partie solide nouvellement formée est plus faible que la concentration en impuretés dans le liquide avant solidification : le surplus d'impuretés ainsi formé est alors rejeté, à l'interface solide/liquide, vers la phase liquide. La correspondance à l'interface entre les concentrations des phases solide et liquide est caractérisée par le diagramme des phases.

Le diagramme des phases permet de lier la concentration C_l dans le liquide et la concentration C_s dans le solide, grâce aux courbes du liquidus et du solidus. Dans cette étude, les concentrations en

impuretés peuvent être considérées comme étant suffisamment faibles pour respecter l'hypothèse des alliages faiblement concentrés. Avec cette hypothèse, les concentrations considérées étant très faibles, les courbes du liquidus et du solidus peuvent être assimilées à des droites, dont les équations sont :

$$T_{liquidus} = T_{f_0} - m_l C, \quad (I-1)$$

$$T_{solidus} = T_{f_0} - m_s C, \quad (I-2)$$

avec $T_{liquidus}$ et $T_{solidus}$ respectivement les températures du liquidus et du solidus, et m_l et m_s respectivement les pentes du liquidus et du solidus. T_{f_0} désigne la température de fusion du corps pur. La correspondance à l'interface entre les concentrations dans le solide et dans le liquide suit alors une loi de proportionnalité, déterminée par le rapport des pentes du liquidus et du solidus. On peut donc transcrire le diagramme des phases par une simple équation liant C_s et C_l , de la manière suivante :

$$C_s = \frac{m_l}{m_s} C_l = k C_l, \quad (I-3)$$

avec k , le coefficient de partage, aussi appelé le coefficient de séparation, considéré comme une constante égale au rapport des pentes du liquidus et du solidus. Pour des impuretés de type métallique (comme le fer, l'aluminium ou le phosphore) dans le cas du silicium, le coefficient de partage k est très inférieur à 1 [Cablea, 2015] : dans ce cas, à l'interface, le solide étant moins concentré que le liquide, le rejet a donc bien lieu de la phase solide vers la phase liquide. De plus, en considérant que la température de fusion dépend de la composition de l'alliage, le diagramme des phases permet également de déterminer la température à l'interface solide/liquide avec les courbes du liquidus et du solidus (voir l'exemple détaillé de la Figure I-3 à la Figure I-7).

Afin d'illustrer plus en détail ce phénomène de rejet de soluté au cours d'une solidification dirigée en régime de front plan, on considère un cas monodimensionnel avec un barreau semi-infini d'alliage métallique faiblement concentré en impuretés, initialement à l'état liquide et de concentration initiale C_0 , et soumis à un gradient thermique constant qui se déplace à une vitesse de tirage V_t constante. La vitesse de tirage est considérée suffisamment faible pour que l'équilibre thermodynamique soit respecté à chaque instant. Cette configuration correspond à un tirage Bridgman réalisé en microgravité, en régime purement diffusif, dans le cadre de l'expérience spatiale MEPHISTO [Boutet, 1999 ;Tavernier et al., 2017].

L'état initial est représenté sur la Figure I-3. Dans le cas des alliages faiblement concentrés, le diagramme des phases peut être simplifié et les courbes du liquidus et du solidus sont approximées par des droites, comme représenté sur la figure. Suite à la mise en mouvement du gradient thermique pour débiter le tirage, une phase solide apparaît, comme illustré sur la Figure I-4. Le diagramme de phase permet de lier la concentration dans la phase solide et dans la phase liquide à l'interface, grâce au coefficient de partage k (inférieur à 1). Le premier solide formé est donc à la concentration $k.C_0$. La phase solide ainsi formée étant moins concentrée que la phase liquide, les impuretés excédentaires sont rejetées dans la phase liquide au niveau de l'interface, initiant ainsi l'apparition d'un pic de concentration : on parle alors de couche limite solutale. À l'interface, la phase liquide est donc de plus en plus concentrée, formant un solide également de plus en plus concentré au cours du tirage. Ce processus se poursuit jusqu'à ce que soit atteint un régime stationnaire (voir Figure I-5), pour lequel on observe un équilibre entre le rejet de soluté de la phase solide vers la phase liquide et l'évacuation par diffusion du pic de soluté dans le reste de la phase liquide. On peut noter que la température T_{int} à l'interface solide/liquide évolue au cours du temps, en accord avec le diagramme des phases : pour le premier solide formé, elle est égale à la température du liquidus de l'alliage à C_0 , notée T_l . La température de l'interface diminue ensuite progressivement au cours du temps, pour atteindre lors du régime stationnaire la température du solidus de l'alliage à C_0 , notée T_s .

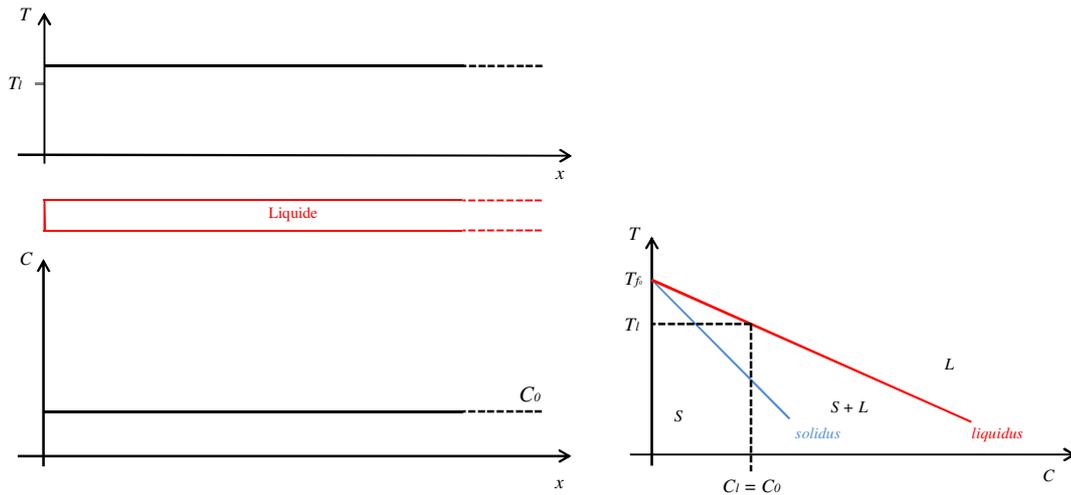


Figure I-3 : Configuration à l'état initial. La température imposée sur le barreau est supérieure à la température du liquidus de l'alliage à C_0 , notée T_l . On note T_{f_0} la température de fusion du corps pur.

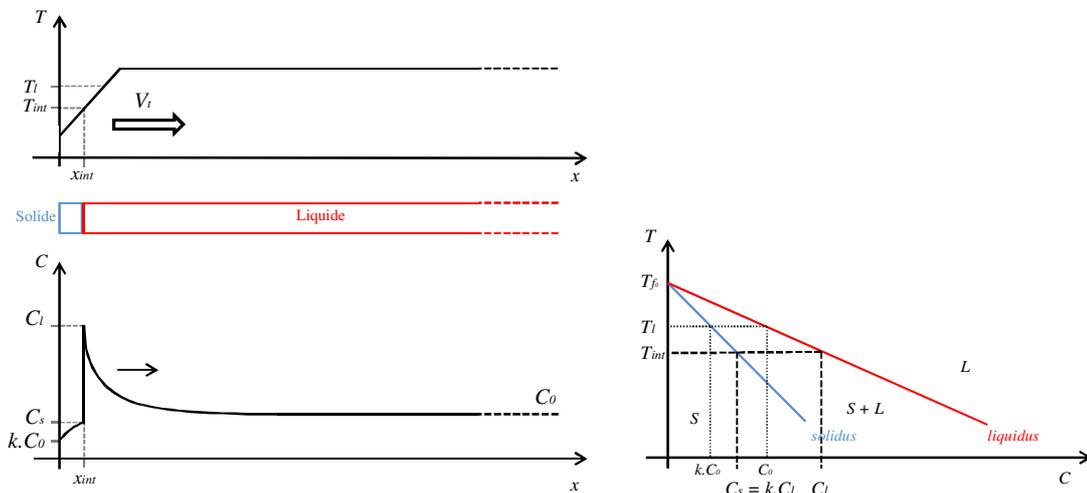


Figure I-4 : Transitoire initial suite à la mise en mouvement du gradient thermique. Une phase solide apparaît à gauche du barreau tandis qu'un pic d'impuretés se forme à l'interface dans la phase liquide. En raison de l'enrichissement en impuretés à l'interface, la température à l'interface diminue progressivement en accord avec le diagramme des phases.

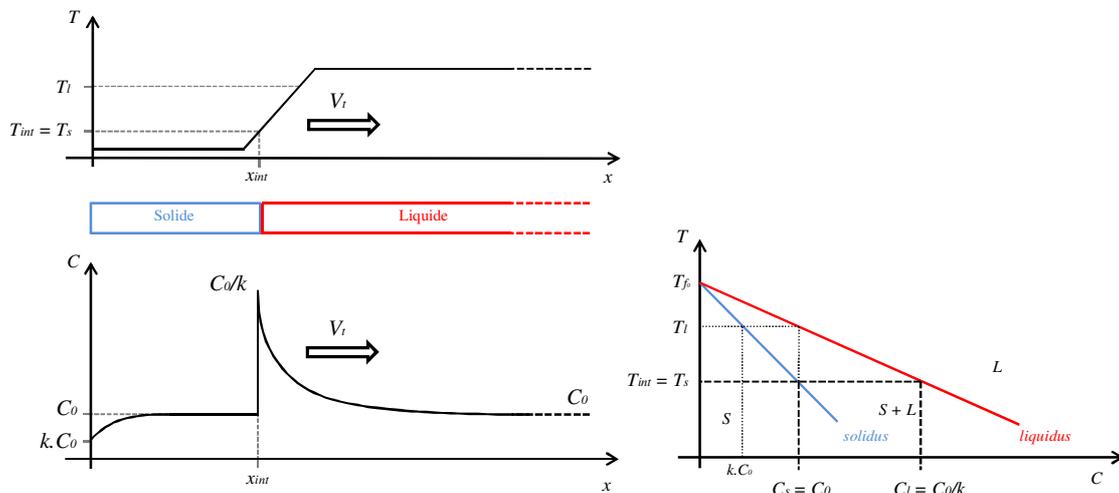


Figure I-5 : Régime stationnaire pour lequel il y a équilibre entre le rejet de soluté de la phase solide vers la phase liquide à l'interface et l'évacuation du soluté par diffusion dans le reste de la phase

liquide. En accord avec le diagramme des phases, le solide formé est à concentration C_0 et le pic de concentration a une amplitude de C_0/k .

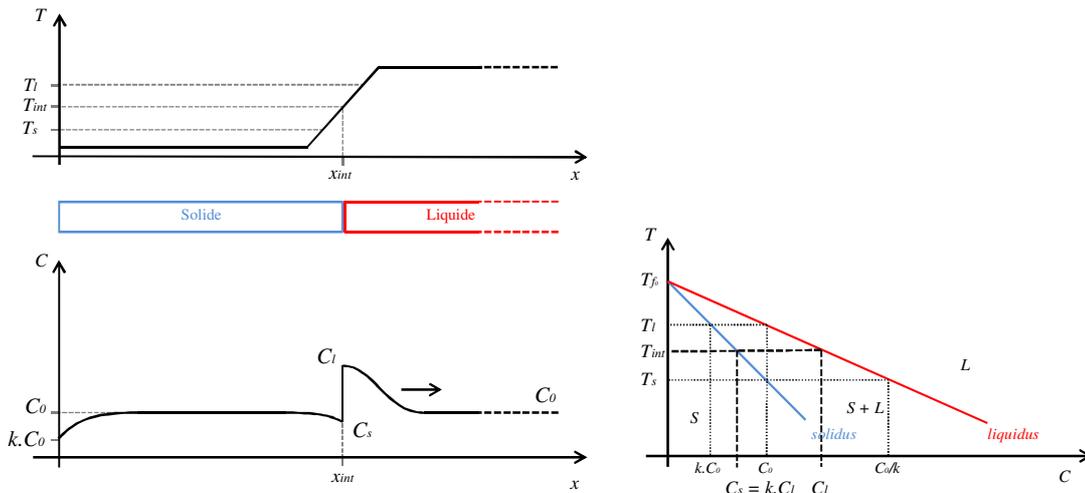


Figure I-6 : Transitoire de réhomogénéisation suite à l'arrêt du tirage (arrêt du déplacement du gradient thermique). Le pic de concentration décroît, évacué par diffusion dans la phase liquide, et la température à l'interface augmente progressivement en accord avec le diagramme des phases.

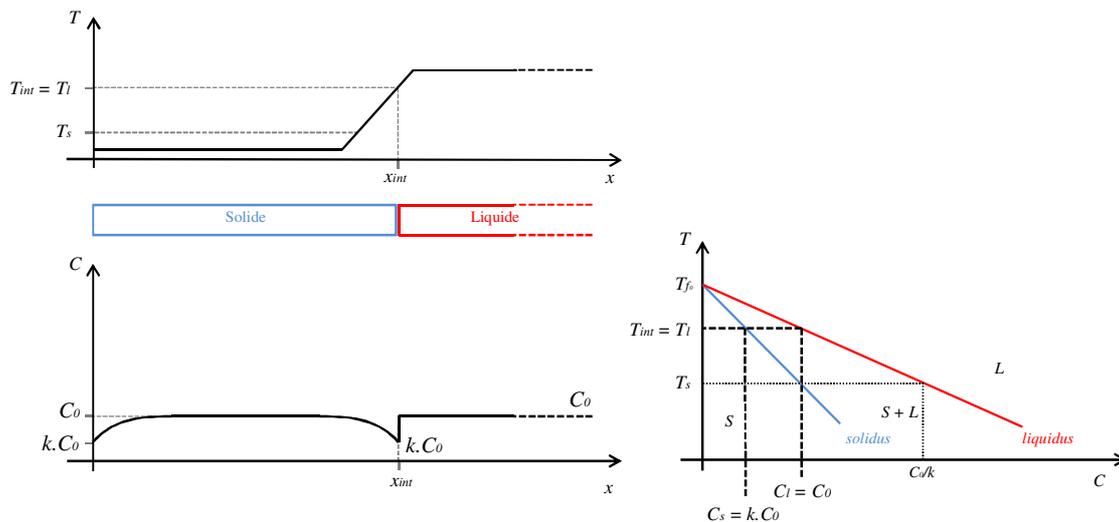


Figure I-7 : Configuration à l'état final. On a solidifié une partie du barreau par solidification dirigée. Les transitoires au début et à la fin du processus ont un effet sur le profil de concentration obtenu finalement dans la phase solide.

La Figure I-6 représente le transitoire de réhomogénéisation qui a lieu suite à l'arrêt du tirage. Lorsque le déplacement du gradient thermique est arrêté, la couche limite solutale disparaît progressivement et la concentration à l'interface diminue par diffusion dans la phase liquide. Comme la température T_{int} à l'interface augmente à nouveau de $T_{int} = T_s$ à $T_{int} = T_l$, en accord avec le diagramme de phase, l'interface solide/liquide avance encore au cours de ce transitoire pour se recaler dans le gradient thermique imposé sur le barreau. La Figure I-7 représente la configuration obtenue à l'état final, lorsque l'interface est à nouveau immobile.

Cet exemple détaille ainsi, à l'aide du diagramme de phase, le mécanisme qui conduit à l'apparition du rejet de soluté à l'interface. On notera que dans l'exemple présenté, le barreau est semi-infini. Les impuretés rejetées dans le liquide n'ont donc globalement pas modifié la concentration dans la phase liquide, comme représenté sur la Figure I-7. Dans le cas d'un barreau de longueur finie, il est

évident que la concentration globale dans la phase liquide augmenterait progressivement au cours du tirage, afin de respecter la conservation de matière dans l'ensemble du barreau.

3) Régimes de ségrégation

La présence ou l'absence de convection dans la phase liquide conduit également à des phénomènes importants pour comprendre la forme du profil de concentration obtenu lors de la solidification dirigée. En effet, l'épaisseur de la couche limite solutale dépend du processus d'évacuation du pic de concentration dans la phase liquide. Dans l'exemple précédent, le régime est purement diffusif. L'épaisseur caractéristique de la couche limite solutale en régime purement diffusif, notée δ_D et définie sur la Figure I-8, dépend du coefficient de diffusion des impuretés dans la phase liquide et de la vitesse de tirage, comme l'a défini Wilson [Wilson, 1978] d'après les travaux de Wagner [Wagner, 1954] (en régime stationnaire, on a en particulier $\delta_D = D_l/V_t$). Tiller a également calculé l'équation régissant la forme du profil de concentration en régime stationnaire purement diffusif dans la phase liquide [Tiller et al., 1953], et a proposé une solution approchée du profil de concentration attendu dans la phase solide lors du transitoire initial. Smith a par la suite proposé une solution exacte pour le transitoire initial [Smith et al., 1955].

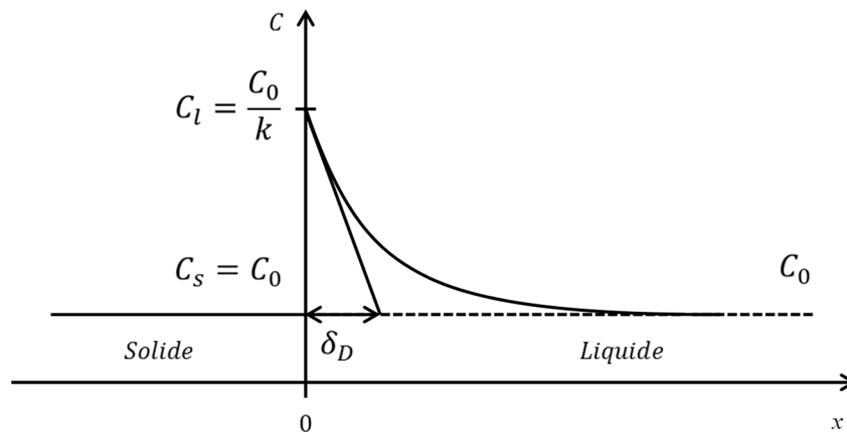


Figure I-8 : Profil de concentration typique en régime stationnaire purement diffusif. À l'interface solide/liquide, on a un saut de concentration de C_s à C_l qui forme un pic de concentration à l'interface dans la phase liquide. On note δ_D l'épaisseur caractéristique de la couche limite solutale en régime diffusif pur, comme représenté sur la figure.

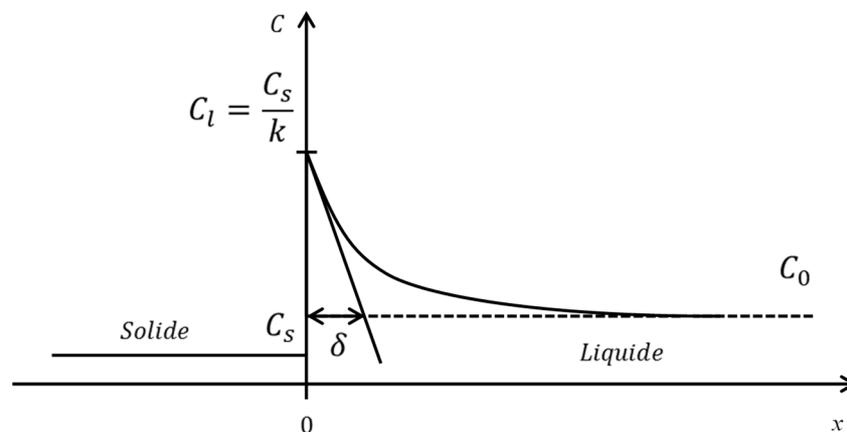


Figure I-9 : Profil de concentration typique en régime stationnaire convecto-diffusif. À l'interface solide/liquide, on a un saut de concentration de C_s à C_l qui forme un pic de concentration à l'interface dans la phase liquide. Par rapport au cas purement diffusif, l'amplitude de ce pic de concentration est

moins élevée. On note δ l'épaisseur caractéristique de la couche limite solutale en régime convecto-diffusif, comme représenté sur la figure.

En présence de convection dans la phase liquide, le pic de concentration est évacué plus efficacement dans le reste de la phase liquide. Dans ce cas, un écoulement se forme généralement près de l'interface et permet d'améliorer le transport des espèces, ce qui entraîne une diminution de l'épaisseur caractéristique de la couche limite solutale ainsi qu'une diminution de l'amplitude du pic de concentration. La Figure I-9 illustre le profil de concentration à l'interface obtenu pour un régime convecto-diffusif avec une très faible convection. Par rapport à la Figure I-8, qui décrit le cas en régime purement diffusif, ce cas correspond à la prise en compte de la convection naturelle résiduelle lors de la solidification en microgravité. L'impact de la convection résiduelle sur la solidification dirigée en microgravité a été étudié plus en détail grâce au dispositif expérimental MEPHISTO notamment [Favier and Rouzaud, 1986 ; Favier et al., 1994 ; Iwan et al., 1997 ; Garandet et al., 2000 ; Garandet et al., 2001], et une méthode pour prendre en compte cette convection résiduelle sous la forme d'une diffusivité effective a été proposée [Garandet et al., 1997].

Le phénomène de convection dans la phase liquide lors de la solidification peut être plus ou moins intense en fonction de son origine : convection résiduelle, comme mentionné ci-avant, convection naturelle ou convection forcée. La convection naturelle, due au champ de gravité terrestre et à la variation de la densité du matériau en fonction de la température, crée un écoulement dans la phase liquide. Cet écoulement peut être encore plus intense en régime de convection forcée (différentes techniques de brassage ont été présentées en partie I.B). Sous l'effet de cet écoulement, les impuretés sont transportées et homogénéisées par convection dans le reste de la phase liquide : l'amplitude du pic de concentration à l'interface est alors diminuée en accord avec l'intensité de la convection. Le profil de concentration obtenu dans un cas idéal purement convectif, dans une cavité fermée monodimensionnelle, est connu grâce à la loi de Scheil-Gulliver [Kurz and Fisher, 1986]. Cette loi permet plus précisément de calculer le profil de concentration dans le solide formé en fonction de la fraction de la cavité qui a été solidifiée, en considérant que les impuretés rejetées à l'interface sont instantanément mélangées de manière parfaitement homogène dans la phase liquide (concentration uniforme dans le liquide). En réalité, en présence de convection, le profil de concentration obtenu ne peut être décrit simplement par un de ces deux régimes idéaux (purement diffusif ou purement convectif). Le profil de concentration en régime convecto-diffusif aura donc une forme comprise entre ces deux régimes théoriques.

4) Régimes d'écoulement

On peut mentionner un autre phénomène lié à l'écoulement dans la phase liquide : en fonction des conditions de solidification (vitesses dans le fluide, dimensions du creuset, matériau considéré), le régime d'écoulement peut être laminaire ou turbulent. Dans le cas d'un régime turbulent, on a une couche limite hydrodynamique avec une sous-couche visqueuse au niveau des parois et en particulier au niveau de l'interface solide/liquide. L'effet de la turbulence sur les procédés de solidification est encore un sujet d'étude actuel [Derby, 2016] et la prise en compte de la couche limite turbulente pour la modélisation de la ségrégation a été proposée dans d'autres études, dans des conditions de brassage par champ magnétique notamment [Delannoy and Zaidat, 2012].

5) Autres phénomènes physiques

De plus, en fonction de la configuration étudiée, d'autres phénomènes physiques peuvent être considérés pour rendre compte de la complexité du processus de solidification. On pourra notamment citer l'effet solutal : dans le cas des alliages binaires, par exemple, la température de fusion du matériau varie en fonction de la concentration. On pourra également citer l'effet de la convection solutale, qui a déjà été étudié seul dans une configuration Bridgman horizontal [Haddad et al., 2001] : dans le champ de gravité terrestre, une distribution inhomogène des impuretés va induire un mouvement convectif du fluide, en lien avec la valeur du coefficient d'expansion solutale. Ce terme

est analogue au coefficient d'expansion thermique qui induit la convection naturelle. Les effets de la convection thermosolutale, qui combine la prise en compte de la convection naturelle et de la convection solutale décrite ci-avant, ont été étudiés en configuration Bridgman vertical [Stelian and Duffar, 2004]. On pourra également mentionner l'effet Soret, qui prend en compte la migration des impuretés sous l'influence d'un gradient thermique. Enfin, les fours Bridgman pouvant être considérés, du point de vue du fluide, comme une cavité dont les dimensions varient au cours du tirage, d'autres phénomènes peuvent apparaître, comme des instabilités et des bifurcations dans de l'écoulement [Sonda et al., 2005].

D. Simulations numériques

La simulation numérique des procédés de solidification dirigée reste un champ de recherche ouvert et un domaine d'actualité. En effet, on trouve encore récemment des publications proposant des modélisations de solidification en configuration Bridgman 2D axisymétrique [Battaglioli et al., 2017]. Ces dernières années, plusieurs benchmarks ont également été proposés à la communauté [Bellet et al., 2009 ; Carozzani et al., 2013] afin de pouvoir comparer les pratiques et les performances de différentes approches numériques et logiciels de calcul, ce qui montre bien que les différentes pratiques restent variées et qu'aucune méthode n'est actuellement réellement prépondérante par rapport aux autres. Dans cette partie, on présentera les différentes approches utilisées aujourd'hui pour la solidification des alliages faiblement concentrés en front plan.

L'une des difficultés liées à la simulation du processus de solidification dirigée vient du fait qu'il s'agit d'un problème multi-échelle aussi bien en espace qu'en temps. En effet, les échelles liées aux couches limites hydrodynamiques, solutales et thermiques sont très différentes, allant notamment de l'ordre du micromètre pour la ségrégation solutale à l'ordre du mètre pour la thermique. Par ailleurs, les échelles de temps liées aux phénomènes convectifs sont de l'ordre de la seconde, tandis que les cycles thermiques pilotant les tirages sont souvent de l'ordre de plusieurs heures. La simulation de configurations industrielles reste donc aujourd'hui, pour ces raisons, un challenge.

Comme on l'a décrit dans partie précédente, l'interface solide/liquide est une zone cruciale pour les simulations, afin de définir les rejets de chaleur et de soluté au cours de la solidification. Actuellement, deux approches numériques différentes sont généralement utilisées par la communauté, distinguées par la manière qu'elles ont de définir et de traiter l'interface solide/liquide et la définition de ces rejets de chaleur et de soluté.

La première méthode utilisée est une méthode multi-domaine. Pour les modèles de ce type, la phase solide et la phase liquide sont chacune associées à un domaine de calcul distinct, avec un maillage distinct. Les proportions de ces domaines peuvent changer, généralement grâce à des méthodes de maillages déformables, qui permettent d'ajuster les deux domaines de calcul en fonction du déplacement de l'interface. De cette manière, l'interface solide/liquide est parfaitement définie et maillée. Les rejets de chaleur et de soluté sont donc définis sous forme de condition aux limites de Stefan [Bianchi et al., 2004] qui permet d'imposer des flux sur l'interface solide/liquide. Ce type de méthode a par exemple été étudiée par Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003] dans une configuration de four Bridgman vertical, avec une méthode éléments finis avec le logiciel FIDAP permettant de déformer le maillage au cours du calcul. Ces travaux, portant également sur l'étude de la ségrégation des alliages faiblement concentrés, seront plus particulièrement étudiés dans le cadre de cette thèse. On pourra également citer les travaux réalisés à Grenoble [Cablea, 2015] pour développer un module de solidification avec une méthode de maillage déformable avec le logiciel FLUENT, appliquée à des simulations de type Bridgman sous champ magnétique.

La deuxième méthode utilisée est une méthode enthalpique. Pour les modèles de ce type, les différentes phases en présence coexistent au sein du même domaine de calcul. On a donc un seul domaine, avec un seul maillage ; dans chaque maille, on distingue les différentes phases grâce au calcul de la fraction volumique de chaque phase. Avec cette approche, l'interface solide/liquide n'est pas donc explicitement matérialisée : la transition d'une phase à l'autre passe par une zone de coexistence des phases. On parle alors d'interface diffuse sur une zone appelée « Mushy zone ». Cette

méthode enthalpique peut être appliquée de deux façons au problème de solidification : avec un modèle multiphase ou avec un modèle VOF.

Dans un modèle multiphase, la phase solide et la phase liquide sont vues comme deux phases distinctes et décrivant chacune un matériau distinct. Elles coexistent au sein d'un seul domaine de calcul, mais un système complet des équations (Navier-Stokes, transport d'espèces, etc) est résolu pour chacune des phases. Dans la phase solide, une contrainte permettant d'imposer des vitesses nulles est généralement ajoutée. Cette méthode est notamment décrite par Bennon et Incropera [Bennon and Incropera, 1987].

Contrairement à cette approche multiphase, pour laquelle chaque phase est traitée séparément, la méthode VOF (Volume of Fluid) suppose que les phases en présence partagent les mêmes champs de température, de vitesse et de pression, qui sont calculés pour une phase « équivalente », composée à proportion de la fraction volumique de chacune des différentes phases. Ces phases coexistent dans un seul domaine de calcul, l'interface est donc, comme pour l'approche multiphase, une interface diffuse. Les développements permettant de formaliser le passage des équations multiphases aux équations VOF ont été publiés par Voller [Voller et al., 1989].

Il est à noter que plusieurs codes commerciaux volumes finis avec la méthode VOF proposent un module de solidification pré-implémenté : en utilisant ce module pour un cas de solidification, on applique en réalité la méthode VOF à une seule et unique phase. Cette phase unique définit le matériau qui peut être aussi bien sous forme solide que liquide. L'état du matériau est déterminé grâce au champ de fraction solide, obtenu avec le champ de température. Les vitesses dans la partie solide sont annulées, généralement, avec un modèle de Darcy. Pour résumer, dans le cas de la solidification, on a d'une part la méthode multiphase, qui utilise un seul domaine de calcul et qui traite les phases solides et liquides comme deux phases (i.e. matériaux) distinctes, et d'autre part la méthode VOF, qui utilise également un seul domaine de calcul mais qui traite les phases solides et liquides comme une seule et unique phase (i.e. matériau), dans laquelle coexiste les deux états solides et liquides. Il faut donc prendre garde à l'ambiguïté du terme « phase », qui désigne parfois seulement l'état de la matière, et parfois seulement le milieu considéré.

Pour ces méthodes enthalpiques, l'interface n'est pas explicitement définie, il n'est donc pas possible d'y appliquer des conditions aux limites. Ces méthodes peuvent toutefois être utilisées pour traiter des cas de ségrégation en adaptant les équations de transport d'espèces, comme présenté par exemple pour des alliages binaires dans une modélisation en volumes finis [Boussaa, 2014] ou dans un appel à benchmark [Bellet et al., 2009]. On peut aussi introduire un terme source volumique localisé au niveau de l'interface afin de modéliser ces rejets à l'interface, comme proposé dans une thèse en cours à Grenoble [Lance, 2014] ou comme dans le cadre de cette thèse.

Les formulations de ces méthodes enthalpiques, qui peuvent varier en fonction de l'implémentation et des équations choisies, ont été étudiées en détail et assez exhaustivement dans une étude récente [König-Haagen et al., 2017]. Par ailleurs, des comparaisons des méthodes VOF et multi-domaines ont été réalisées en 2D et en 3D [Avnaim et al., 2016]. Il ressort de cette étude que les modèles 3D donnent de meilleurs résultats que les modèles 2D, que les deux approches donnent des résultats corrects pour les champs de température et pour la résolution de la solidification. En revanche, le champ de vitesse est mieux décrit avec l'approche multi-domaine : en effet, avec l'approche VOF, le champ de vitesse est impacté par l'amortissement des vitesses dans la phase solide et dans la zone de transition de phase. Toutefois, même si cet amortissement impacte le champ de vitesse loin de l'interface, les comparaisons restent plutôt acceptables. Par ailleurs, l'approche multi-domaine est plus coûteuse en temps de calcul et reste plus complexe à mettre en œuvre.

Ces différentes méthodes ont donc toutes des avantages et des inconvénients intrinsèques, sans que la communauté ne se soit accordée, à l'heure actuelle, sur une méthode à préférer. Pour les méthodes multi-domaines à maillage déformable, on a les avantages suivants : on peut appliquer une condition aux limites en flux sur l'interface, on peut améliorer le raffinement local du maillage près de l'interface avec des maillages de couches limites, il n'y a pas de zone de transition solide/liquide et les champs de vitesse obtenus sont donc meilleurs. Toutefois, le maillage déformable demande un coût de calcul important, avec nécessité de remailler le domaine à chaque itération temporelle, et les calculs peuvent se révéler instables et délicats à faire converger si la déformation de l'interface est trop importante ou pas assez progressive. Pour les méthodes enthalpiques, le maillage doit être construit de manière plus dense sur l'ensemble du domaine, et l'interface diffuse empêche d'une part de définir

une condition aux limites sur l'interface, ce qui rend le problème de ségrégation plus difficile à intégrer dans les modèles, et d'autre part influence le champ des vitesses à cause de l'amortissement des vitesses dans l'épaisseur de la zone de transition. En revanche, ces méthodes sont directement présentes dans la majorité des codes volumes finis, et des modules de solidification permettant d'arrêter les vitesses dans la phase solide sont souvent pré-implémentés (modélisation de la « Mushy Zone »). Dans le cadre de cette thèse, on développera une modélisation volumes finis à l'aide de la méthode VOF, appliquée à une seule phase ; deux états, liquide ou solide, seront possibles au sein de cette phase, grâce au module de solidification du logiciel Star-CCM+.

En plus des différentes approches de modélisation présentées, plusieurs logiciels existent sur le marché. Chaque logiciel de calcul a ses propres spécificités. Pour présenter une liste non exhaustive de ces logiciels, on pourra citer des travaux représentatifs de leur utilisation. Par exemple, le logiciel volumes finis FLUENT a été utilisé à Grenoble [Cablea, 2015] pour développer et améliorer un module spécifique de maillage déformable, validé sur le cas académique de Stefan, pour étudier le four VB2 avec prise en compte de la turbulence et du brassage par champ magnétique. Des logiciels éléments finis peuvent également être utilisés, comme FIDAP ou COMSOL, utilisés par Stelian, notamment en configuration 2D axisymétrique avec une méthode de maillage déformable afin d'étudier la ségrégation en présence de convection naturelle et solutale et sous brassage magnétique, avec une comparaison à des données expérimentales. Des logiciels plus spécifiques à la solidification existent : on pourra citer CGSIM, logiciel éléments finis 2D axisymétrique permettant de modéliser le fonctionnement complet d'un four Bridgman, et le logiciel Crysmas, utilisé pour produire les publications de Derby [Gasperino et al., 2009 ; Stelian et al., 2009 ; Zhang et al., 2013]. En revanche, ces deux derniers logiciels sont des logiciels « boîte noire » ne donnant que peu la main aux utilisateurs. On pourra encore citer le logiciel libre OpenFoam, utilisé dans le cadre d'une thèse en cours à Grenoble [Lance, 2014] pour étudier l'implémentation de la ségrégation, montrant que ce problème reste bien d'actualité. D'autres approches de modélisation moins répandues ont aussi été étudiées, avec des approches par différences finies ou par méthodes spectrales, avec des formulations en vorticités-fonction de courant [Kaddeche et al., 2015], ou encore avec des méthodes sans maillage (« Meshless ») [Kosec and Šarler, 2014]. En particulier, une approche de modélisation de la ségrégation par fonction de paroi a été imaginée [Garandet et al., 2012a ; Garandet et al., 2012b ; Chatelain et al., 2015 ; Chatelain, 2016 ; Chatelain et al., 2017] pour éviter de mailler trop finement le domaine près de l'interface en calculant la couche limite solutale à partir du cisaillement à la paroi.

Ces codes de calculs peuvent être utilisés pour des simulations de type industrielles, c'est-à-dire des simulations 3D, avec la description du four complet, la prise en compte du rayonnement, des atmosphères contrôlées, etc [Delannoy et al., 2007 ; Bellmann et al., 2013]. Mais ces simulations, de par leur complexité et de par leur coût, restent assez rares. Les simulations réalisées dans la littérature semblent plus souvent s'intéresser à l'étude de configurations plus simples, comme par exemple les simulations de la solidification et de la ségrégation en cavité fermée d'un alliage faiblement concentré à faible nombre de Prandtl en présence de convection naturelle, en configuration Bridgman vertical (gravité perpendiculaire au front de solidification) [Motakef, 1990] ou en configuration Bridgman horizontal (gravité perpendiculaire à la direction du tirage) avec une surface libre [Kaddeche et al., 1994].

Par ailleurs, on a identifié l'existence de la méthode des maillages chimères, introduite par Cougherty et présentée comme une méthode multi-maillage appliquée à un cas en différences finies [Cougherty and J. L. Steger, 1985]. Cette méthode permet de définir plusieurs maillages au sein d'un même calcul et permet notamment de les déplacer facilement les uns par rapport aux autres. Cette technologie, appelée désormais « Overset Mesh », a été développée au fil des ans pour des applications de la NASA notamment [Chan, 2009], et est actuellement implémentée dans le code volumes finis Star-CCM+. Cette technologie est plutôt destinée, à l'origine, à améliorer la construction du maillage autour de solides à la géométrie complexe, ou autour d'obstacles ou solides mouvants. Elle est utilisée, à l'heure actuelle, dans le domaine de l'aéronautique [Bourasseau, 2015]. Toutefois, cette méthode n'a pas encore été, à notre connaissance, proposée pour des applications de suivi de front dans le domaine de la solidification dirigée. Cette technologie peut offrir des avantages en terme

de coût de calcul et de coût de génération de maillage tout en permettant de réaliser un suivi de l'interface, c'est pourquoi cette technologie mérite de retenir notre attention et d'être étudiée.

E. Positionnement des travaux présentés

Au vu de cette revue de la littérature à propos des phénomènes physiques qui jouent un rôle dans le processus de solidification dirigée et à propos des différentes approches de simulation numériques qui sont utilisées par la communauté pour les simuler, on peut conclure que ce domaine d'étude est riche et qu'il est encore très actuel. En effet, de nombreux phénomènes physiques pertinents pour la solidification et la ségrégation ont été étudiés et mis en évidence. Ils ont été étudiés de manière parfois indépendante et parfois couplées, dans des configurations variées. Certaines de ces études ont entre une vingtaine et une trentaine d'années, tandis que d'autres sont encore très récentes. À travers toutes ces réalisations, il apparaît que les simulations 3D complètes de type industrielles de procédés de solidification restent un challenge aujourd'hui, avec des coûts et des temps de calculs très élevés, voire prohibitifs, en raison de l'aspect multi-échelles du problème et de la complexité des phénomènes qui entrent en jeu en fonction de la configuration étudiée. Par ailleurs, même les simulations réalisées sur des configurations plus modestes, en 3D, 2D ou 2D axisymétriques, demandent des ressources importantes. Pour donner un ordre de grandeur, une simulation numérique 3D réalisée sur le dispositif AFRODITE [Boussaa, 2014] a nécessité un temps de calcul de l'ordre de trois mois. On peut légitimement penser que les phénomènes physiques présentés seront encore étudiés à l'avenir, dans des configurations qui n'ont pas encore été traitées ou en considérant des couplages de phénomènes qui n'ont pas encore été étudiés. On peut donc envisager que de nombreuses simulations de solidification dirigées seront encore réalisées dans les années à venir.

Par ailleurs, il ressort également de cette revue de la littérature qu'il n'existe pas encore de réel consensus sur les approches numériques pour la modélisation de la solidification dirigée. En effet, deux approches sont majoritairement utilisées, les méthodes à maillage déformable et les méthodes enthalpiques. Ces approches ont toutes deux des avantages et des inconvénients intrinsèques, sans que l'une des deux approches n'ait vraiment pris le pas sur l'autre dans les pratiques. Il reste donc pertinent et nécessaire d'envisager d'améliorer l'une ou l'autre de ces approches, afin de répondre au besoin de performance et d'optimisation, nécessaire dans le but de réduire les coûts de calcul des simulations à venir.

D'autre part, bien qu'elle ait déjà été étudiée dans plusieurs publications, l'intégration des phénomènes de ségrégation des impuretés dans les modèles de solidification dirigée reste difficile et peut nécessiter, dans le cas des méthodes enthalpiques, de proposer une implémentation avec un terme source volumique de rejet à l'interface.

La technologie « Overset Mesh », ou technologie des maillages chimères, est proposée dans le logiciel Star-CCM+, principalement afin de pouvoir construire des maillages de meilleure qualité autour d'obstacles ou de solides mouvants. Cette technologie n'a pas été initialement prévue pour s'intégrer dans les modèles de solidification. Toutefois, cette approche permettrait de créer, grâce à des maillages glissants, un suivi adaptatif du front de solidification tout en raffinant le maillage uniquement dans la zone de suivi du front. Cette approche, combinée avec une méthode enthalpique, devrait pouvoir ainsi permettre de s'affranchir d'un des principaux désavantages de cette dernière : l'obligation d'utiliser un maillage dense dans tout le domaine de calcul. Cette approche par « Overset Mesh » est inhabituelle et originale, mais les améliorations potentielles qu'elle laisse entrevoir justifient de la prendre en compte et de l'étudier.

Ces travaux auront donc pour objectif de proposer une application originale de méthode de maillage glissant pour améliorer la modélisation par méthode enthalpique de la solidification d'une part, et de la ségrégation d'autre part. Pour répondre à ces objectifs, on va donc présenter dans un premier temps la modélisation de la thermique et de l'hydrodynamique ainsi que la méthode de suivi de front par maillage glissant utilisées pour simuler la solidification (Chapitre II). Afin de valider les résultats obtenus grâce à cette nouvelle approche, on choisira et reproduira ensuite un cas de référence

en régime purement diffusif, puis un cas en régime de convection naturelle proposé dans la littérature. La comparaison des résultats permettra de déterminer la validité du modèle et de quantifier l'impact de la méthode de maillage glissant proposée sur les performances du modèle de solidification (Chapitre III). Dans un second temps, on présentera l'introduction de la modélisation de la ségrégation des impuretés dans ce modèle, et on proposera une expression décrivant le rejet de soluté à l'interface sous forme de terme source volumique (Chapitre IV). Enfin, les résultats obtenus en ségrégation seront étudiés, avec et sans maillage glissant, pour discuter de la validité du modèle et du terme source proposé (Chapitre V).

On pourra noter qu'on ne s'intéressera pas particulièrement, dans ces travaux, à l'étude ou à la prise en compte de certains mécanismes physiques identifiés dans la littérature, pointus et pour certains encore mal connus, et qui sont parfois pertinents pour le procédé de solidification. En effet, dans la démarche de validation et de qualification des performances de l'approche proposée, on s'intéressera plutôt à reproduire fidèlement les configurations choisies pour réaliser nos comparaisons.

Chapitre II.
Modélisation thermique et
hydrodynamique

Cette partie présente les caractéristiques des modèles choisis pour simuler des cas de solidification dirigée. Le premier modèle présenté correspond au cas de Stefan [Bianchi et al., 2004], qui est un cas académique de solidification d'un corps pur en régime purement diffusif. Ce modèle diffusif, c'est-à-dire sans convection, est étudié afin de pouvoir valider le modèle de thermique et de solidification par comparaison avec la solution analytique. Ce cas sera étudié avec du silicium.

Le second modèle présenté correspond à un cas de tirage dans un four Bridgman vertical. Une telle configuration correspond à un creuset vertical axisymétrique contenant le matériau. Les parois sont soumises à un gradient thermique vertical. L'évolution de ce gradient au cours du temps, correspondant à un refroidissement progressif du bas vers le haut, entraîne le processus de solidification dirigée. Ce modèle met en jeu le couplage entre la thermique et l'hydrodynamique, par l'apparition de la convection naturelle. Ainsi, la position de l'interface solide/liquide est contrainte à se déplacer de bas en haut par l'évolution du gradient de température imposé sur le four.

Le cas du four Bridgman vertical a été étudié numériquement par Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003] en comparaison avec des données expérimentales, me permettant ainsi d'avoir un cas de référence pour ce modèle. Dans ses simulations, Stelian utilise le matériau GaInSb [Stelian et al., 2003]. Le modèle présenté dans cette partie utilisera donc également du GaInSb au lieu du silicium, afin de pouvoir effectuer des comparaisons avec le modèle de référence. Les travaux de Stelian ont été choisis comme référence car ils proposent aussi des calculs avec ségrégation, eux-mêmes validés par comparaison à des expériences. Néanmoins, l'introduction d'un champ de concentration et du problème de ségrégation fera l'objet du Chapitre IV.

J'ai développé ces modèles à l'aide du logiciel Star-CCM+ version 11.02.010-R8 (version double précision). Ce logiciel, développé par la société CD-adapco, est un logiciel de simulation numérique de mécanique des fluides, avec des composantes multiphysiques. Ce logiciel permet ainsi de réaliser des simulations grâce à la méthode des volumes finis.

A. Mise en équations

1) Fraction solide

Cette modélisation s'appuie sur une approche enthalpique (méthode VOF), ne distinguant pas a priori les domaines solides et liquides. Ainsi, les simulations sont réalisées sur un seul domaine de calcul où cohabitent les deux phases, solide et liquide. Ces deux phases sont régies par les mêmes équations, et sont distinguées par la valeur de la fraction solide. Cette fraction solide α (en volume) est définie en fonction de la température normalisée notée T^* , elle-même donnée par l'expression :

$$T^* = \frac{T - T_{solidus}}{T_{liquidus} - T_{solidus}}, \quad (II-1)$$

avec T la température, et avec $T_{liquidus}$ et $T_{solidus}$ respectivement les températures du liquidus et du solidus. Dans le cas des alliages faiblement concentrés, on peut considérer que ces températures sont égales à la température de fusion, notée T_f . En revanche, pour éviter les singularités numériques lors des calculs, on considèrera que $T_{liquidus}$ et $T_{solidus}$ sont définis tels que :

$$T_{liquidus} = T_f + \varepsilon, \quad (II-2)$$

$$T_{solidus} = T_f - \varepsilon, \quad (II-3)$$

avec ε l'écart à la température de fusion, qu'il faudra choisir suffisamment faible pour limiter la taille de la zone de transition solide/liquide tout en évitant les artefacts numériques (pour cela, il est recommandé que la zone de transition ait une épaisseur au moins égale à une taille de maille).

La fraction solide α (en volume) est donnée sous forme d'une fonction définie par morceaux par l'expression suivante [CD-adapco and Siemens, 2016] :

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{si } T^* < 0 \\ 1 - T^* & \text{si } 0 \leq T^* \leq 1 \\ 0 & \text{si } 1 < T^* \end{cases} \quad (II-4)$$

Ainsi, la fraction solide α varie linéairement avec la température T . En particulier, on constate que lorsque la température est égale à la température de fusion T_f , en remplaçant les équations (II-2) et (II-3) dans l'expression (II-1), la température normalisée T^* égale 0,5 et la fraction solide α est par conséquent aussi égale à 0,5.

Ainsi, la fraction solide α permet d'identifier l'état du matériau, solide ou liquide. Le matériau est à l'état solide si la fraction solide α est égale à 1. Le matériau est donc à l'état liquide si la fraction solide α est égale à zéro. Lors de la simulation, lorsque la fraction solide α est comprise entre 0 et 1 dans une maille, ce modèle donne une coexistence des états solide et liquide au sein de la même maille, à proportion de la fraction solide. On parle alors de zone de transition, qui peut être assimilée à une zone pâteuse vue comme un milieu poreux, par analogie avec le cas d'alliages métalliques concentrés présentant un front dendritique. Dans le cas des études présentées ici, le front de solidification est lisse, c'est-à-dire non dendritique. Je chercherai donc à réduire l'épaisseur de la zone pâteuse, grâce au paramètre ε , afin de reproduire au mieux cette propriété du front de solidification. Pour le post-traitement des résultats, je considérerai que la délimitation entre les phases solide et liquide est définie par l'isosurface de fraction solide $\alpha = 0,5$. Cette hypothèse revient donc à considérer l'épaisseur de la zone pâteuse au cours des calculs pour éviter les divergences numériques, tout en considérant son épaisseur nulle lors du post-traitement des résultats.

2) Équations de Navier-Stokes

Selon la documentation du logiciel Star-CCM+ [CD-adapco and Siemens, 2016], les équations discrétisées et implémentées numériquement dans ce logiciel sont les équations de Navier-Stokes écrites sous forme conservative. Ces équations sont donc écrites sous la forme suivante [Versteeg, 1995], avec l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho(\vec{v} - \vec{v}_g)) = 0, \quad (II-5)$$

avec ρ la masse volumique, \vec{v} la vitesse dans le fluide et \vec{v}_g la vitesse de grille liée à un éventuel déplacement du maillage.

Dans le cadre de cette étude, on peut néanmoins considérer que les fluides sont incompressibles (hypothèse de densité constante). La masse volumique ρ est donc considérée constante : on choisira alors d'utiliser la valeur ρ_l , la masse volumique de la phase liquide, pour l'ensemble du domaine.

On a également l'équation de bilan de quantité de mouvement sous forme conservative :

$$\frac{\partial(\rho\vec{v})}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho\vec{v} \otimes (\vec{v} - \vec{v}_g)) = -\vec{\nabla}p + \vec{v} \cdot \vec{\bar{T}} + \vec{f}_g + \vec{f}_D, \quad (II-6)$$

avec \otimes le symbole du produit dyadique, p la pression, \vec{f}_g le terme de poussée d'Archimède dans l'approximation de Boussinesq et \vec{f}_D le terme de Darcy. Pour un écoulement laminaire, le tenseur des contraintes visqueuses, noté $\vec{\bar{T}}$, est égal à :

$$\bar{\vec{T}} = \mu \left[(\vec{\nabla} \vec{v}) + (\vec{\nabla} \vec{v})^T - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \bar{\vec{I}} \right], \quad (II-7)$$

avec $\bar{\vec{I}}$ le tenseur unité et μ la viscosité dynamique du matériau, qui est constante (voir partie II.A.6).

3) Équation de l'énergie

L'équation de l'énergie s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial(\rho H - p)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho H(\vec{v} - \vec{v}_g) + \vec{v}_g p) = \vec{\nabla} \cdot (\lambda \vec{\nabla} T) + \vec{\nabla} \cdot (\bar{\vec{T}} \cdot \vec{v}) + (\vec{f}_g + \vec{f}_D) \cdot \vec{v}, \quad (II-8)$$

avec ρ la masse volumique, ici égale à ρ_l la masse volumique de la phase liquide, H l'enthalpie totale, p la pression, \vec{v} la vitesse dans le fluide, \vec{v}_g la vitesse de grille, λ la conductivité thermique, T la température, $\bar{\vec{T}}$ le tenseur des contraintes visqueuses, \vec{f}_g le terme de Boussinesq et \vec{f}_D le terme de Darcy. Afin de modéliser le changement de phase solide/liquide, le rejet de chaleur latente est intégré à cette équation d'énergie dans l'expression de l'enthalpie totale H , qui est alors égale à :

$$H = Cp.T + (1 - \alpha)h_{fusion} + \frac{\|\vec{v}\|^2}{2}, \quad (II-9)$$

avec Cp la capacité thermique et h_{fusion} la chaleur latente de fusion du matériau. La modélisation du changement de phase fait ainsi intervenir la fraction solide, notée α .

4) Terme de Boussinesq

Le terme de Boussinesq permet d'intégrer l'hypothèse de densité constante (fluide incompressible) dans les équations tout en conservant l'effet de convection naturelle. En effet, la convection naturelle est normalement due à la variation de la densité en fonction de la température. Cette variation de densité, considérée dans le champ de pesanteur, entraîne la convection naturelle. Afin de modéliser cet effet sans complexifier les autres termes des équations, la densité est considérée constante et le terme de Boussinesq, décrit ci-après [CD-adapco and Siemens, 2016], ajoute un champ de force volumique lié aux efforts de gravité :

$$\vec{f}_g = \begin{cases} \vec{0} & \text{si } \alpha = 1 \\ -\rho\beta(T - T_f)\vec{g} & \text{si } 0 \leq \alpha < 1 \end{cases}, \quad (II-10)$$

avec ρ la masse volumique, ici égale à ρ_l la masse volumique de la phase liquide, β le coefficient de dilatation thermique du liquide, T la température, T_f la température de fusion et \vec{g} le vecteur gravité. L'expression du terme de Boussinesq dépend également de la fraction solide α . En effet, pour le cas $\alpha = 1$ correspondant à une phase complètement solidifiée, le terme de Boussinesq est égal à zéro afin d'éviter d'appliquer le champ de force sur la phase solide.

5) Terme de Darcy

Afin de compléter ce modèle, il faut introduire un terme qui permet d'annuler ou de réduire très fortement les vitesses dans la phase solide. C'est la fonction du terme de Darcy, qui s'exprime de la manière suivante :

$$\vec{f}_D = -\frac{\mu}{K} \vec{v}, \quad (II-11)$$

avec K la perméabilité du milieu. Cette perméabilité varie en fonction de la fraction solide, selon la définition par défaut dans le logiciel de simulation : la loi de Carman-Kozeny [CD-adapco and Siemens, 2016]. L'évolution de la résistance visqueuse μ/K en fonction de la fraction solide est tracée en Figure II-1 ci-dessous.

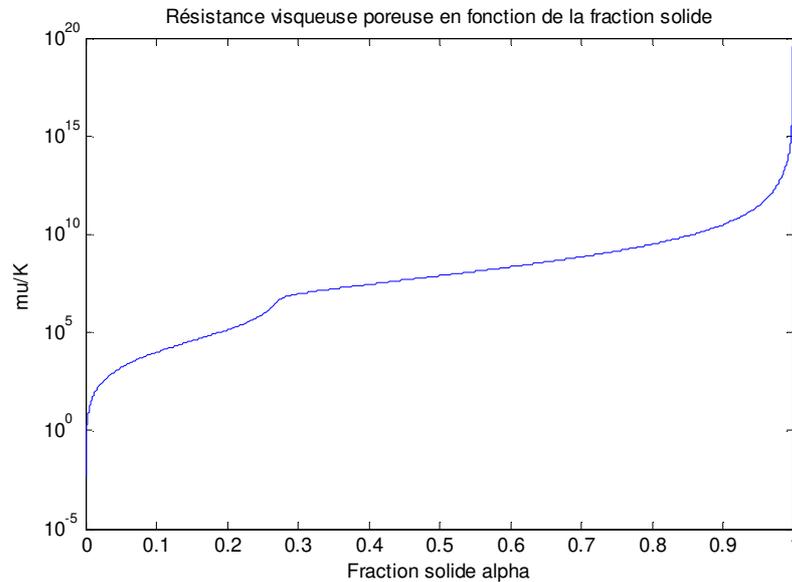


Figure II-1 : Évolution de la résistance visqueuse μ/K introduite dans le terme de Darcy en fonction de la fraction solide α . L'échelle de l'axe des ordonnées est logarithmique. Pour $\alpha = 0$, la résistance visqueuse μ/K tend vers zéro.

La valeur de la résistance visqueuse augmente donc avec la proportion de matériau solide présent dans une maille. De cette manière, dans les mailles « solidifiées », ce terme de Darcy amortit les vitesses présentes afin de les faire tendre vers zéro. Par défaut, pour améliorer la convergence, la valeur maximale de la résistance visqueuse est en réalité limitée par une valeur seuil, qui peut être modifiée dans les paramètres de la simulation. Dans les mailles « complètement liquides », ce terme tend vers zéro, ramenant ainsi le système d'équation au cas d'une phase liquide. Cependant, il faut noter que si le terme de Darcy permet de réduire drastiquement la valeur des vitesses présentes dans la phase solide, ce terme ne peut pas imposer parfaitement une vitesse nulle. En effet, ce terme, agissant comme un amortissement visqueux très élevé, freine l'écoulement mais ne peut pas le figer complètement. On observe donc un faible écoulement résiduel dans la phase solide. Le logiciel Star-CCM+ donne normalement une méthode numérique (option « Flowstop ») permettant de figer les vitesses de la partie solide à zéro, afin de supprimer cet écoulement résiduel. Cependant, cette méthode numérique n'est pas compatible avec les méthodes de maillage glissant [CD-adapco and Siemens, 2016], qui seront présentées par la suite. Pour cette raison, nous avons dû nous limiter à l'implémentation du terme de Darcy présenté à l'équation (II-11), qui permet de réduire néanmoins très significativement l'écoulement dans la phase solide.

6) Paramètres thermo-physiques

Dans ce modèle, les valeurs de la masse volumique ρ et de la viscosité dynamique μ sont considérées comme des constantes. En revanche, la conductivité thermique λ et la capacité thermique massique C_p sont considérées comme des fonctions linéaires de la température dans la zone de transition, selon les définitions suivantes :

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_s & \text{si } T < T_{solidus} \\ \lambda_s - T_{solidus} \frac{\lambda_l - \lambda_s}{T_{liquidus} - T_{solidus}} & \text{si } T_{solidus} \leq T \leq T_{liquidus} , \\ \lambda_l & \text{si } T_{liquidus} < T \end{cases} \quad (II-12)$$

$$Cp = \begin{cases} Cp_s & \text{si } T < T_{solidus} \\ Cp_s - T_{solidus} \frac{Cp_l - Cp_s}{T_{liquidus} - T_{solidus}} & \text{si } T_{solidus} \leq T \leq T_{liquidus}, \\ Cp_l & \text{si } T_{liquidus} < T \end{cases} \quad (II-13)$$

avec λ_s et λ_l respectivement les conductivités thermiques de la phase solide et de la phase liquide, et Cp_s et Cp_l respectivement les capacités thermiques massiques de la phase solide et de la phase liquide.

7) Équations pour un domaine solide (creuset)

Dans le cas où une partie du domaine considéré est un solide simple sans modélisation de la solidification, comme ce sera le cas pour le creuset (voir la partie II.D), les équations précédemment présentées ne sont pas appliquées à cette partie. Dans ce cas, seule la modélisation de la conduction thermique est considérée, sans changement d'état, ni modélisation de la ségrégation. On a alors uniquement l'équation de la chaleur :

$$\rho_{cr} Cp_{cr} \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\lambda_{cr} \vec{\nabla} T), \quad (II-14)$$

avec ρ_{cr} la masse volumique du creuset, Cp_{cr} la capacité thermique massique du creuset et λ_{cr} la conductivité thermique du creuset. Ces paramètres thermo-physiques sont considérés comme des constantes pour le solide considéré. Cette partie solide du domaine sera liée au reste du domaine par une interface permettant d'assurer la continuité des champs de température et des flux de chaleur.

B. Overset Mesh

Avant de décrire précisément les caractéristiques des modèles utilisés, nous présentons ici une fonctionnalité spécifique du logiciel de simulation utilisé : Star-CCM+.

L'*Overset Mesh* est une fonctionnalité pré-implémentée dans le logiciel, permettant de faciliter la mise en place de maillages glissants. Cette méthode, parfois connue sous le nom de « maillage chimère » [Bourasseau, 2015], permet de définir une zone maillée appelée *Overset Mesh*, qui correspond généralement à une zone digne d'intérêt et dans laquelle le maillage a été travaillé. Le maillage de cette zone *Overset Mesh* peut être mobile : on parle alors de maillage glissant. Ce maillage glissant se superpose à un maillage d'arrière-plan, qui reste fixe. Ces deux maillages peuvent être définis indépendamment, avec différentes tailles de mailles, différents types de mailles, etc. Cette fonctionnalité autorise également les recouvrements multiples (plusieurs *Overset Mesh* pouvant se superposer les uns sur les autres), mais pour cette étude, nous ne considérerons qu'un seul maillage glissant et qu'un seul maillage fixe.

Cette fonctionnalité est basée sur le principe suivant : si le maillage *Overset Mesh* est superposé sur le maillage d'arrière-plan, le calcul est effectué dans le maillage *Overset Mesh*. Les mailles d'arrière-plan ainsi recouvertes sont alors désactivées, tandis que le reste du maillage d'arrière-plan est actif dans le reste du domaine. Ce principe est illustré sur la Figure II-2 suivante [CD-adapco, 2016]. Sur cette figure, deux maillages sont représentés : le maillage d'arrière-plan, représenté ici comme le maillage inférieur, et le maillage *Overset Mesh*, représenté ici comme le maillage supérieur. Le maillage *Overset Mesh* recouvre une partie du maillage d'arrière-plan. Le calcul est donc réalisé dans les cellules actives, représentées en jaune. Les cellules représentées en rouge sont recouvertes par des cellules actives de l'autre maillage, ce sont donc des cellules désactivées.

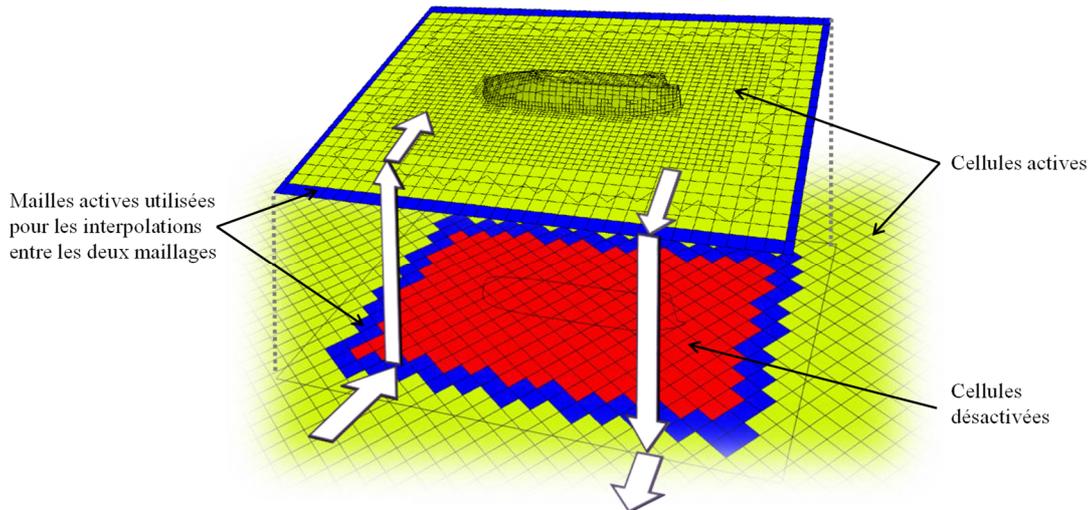


Figure II-2 : Illustration du principe de l'Overset Mesh [CD-adapco, 2016]. Le maillage supérieur représente l'Overset Mesh, qui recouvre le maillage inférieur correspondant au maillage d'arrière-plan. Les mailles jaunes sont les cellules actives. Les mailles rouges représentent les cellules du maillage d'arrière-plan qui sont désactivées car recouvertes par l'Overset Mesh. Les mailles bleues sont les cellules actives utilisées pour les interpolations entre les deux maillages.

Comme illustré sur la Figure II-2 par les flèches blanches allant d'un maillage à l'autre, des interpolations sont réalisées entre les deux maillages afin d'assurer la continuité des champs calculés d'un maillage à l'autre. Les cellules bleues représentées sur les deux maillages, de part et d'autre des zones de transition entre les maillages, sont les mailles entre lesquelles sont réalisées les interpolations des champs. La Figure II-3 illustre plus précisément la méthode implémentée pour réaliser ces interpolations dans les zones de recouvrement [Schreck et al., 2013]. Sur cette figure, le maillage d'arrière-plan est représenté en bleu et le maillage *Overset Mesh* est représenté en rouge. Deux interpolations distinctes sont représentées sur la même figure : une à gauche de l'image (détermination du champ sur le maillage *Overset Mesh* grâce aux valeurs du maillage d'arrière-plan) et une à droite de l'image (détermination du champ sur le maillage d'arrière-plan grâce aux valeurs du maillage *Overset Mesh*). Le point C représente le centre de la cellule considérée. Les points N_1 , N_2 et N_3 sont les centres des plus proches cellules du même maillage. Les champs calculés au point C sont donc liés aux champs calculés aux points N_1 , N_2 et N_3 , ainsi qu'à un quatrième point, représenté par un cercle évidé sur la Figure II-3, correspondant à une maille fictive. Les points N_4 , N_5 , et N_6 sont les centres des cellules de l'autre maillage les plus proches de cette maille fictive. Les interpolations sont ainsi réalisées entre les points N_4 , N_5 , et N_6 , et représentées par les triangles verts sur la figure, afin de déterminer les champs dans la maille fictive. Les deux maillages sont ainsi couplés dans ces zones de recouvrement, assurant la continuité des champs entre les maillages.

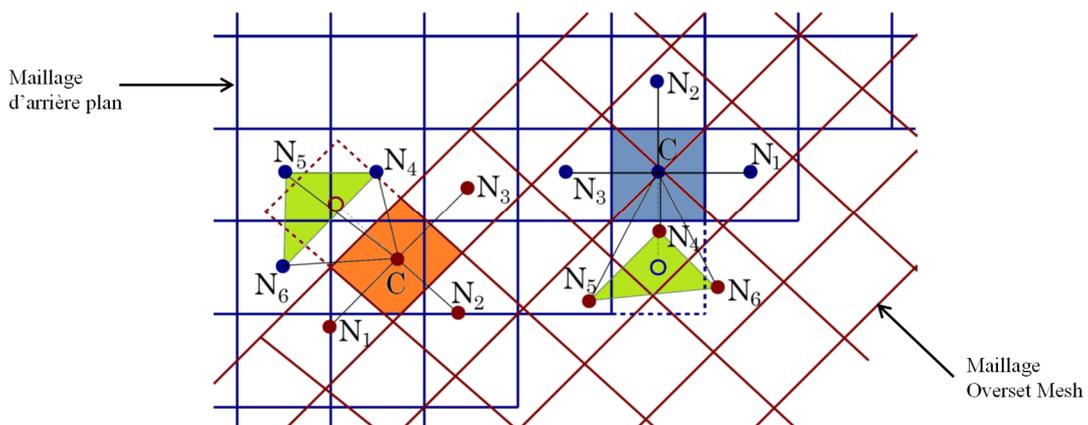


Figure II-3 : Illustration du principe d'interpolation implémenté dans la méthode *Overset Mesh* [Schreck et al., 2013]. Le maillage *Overset Mesh* est représenté en rouge, le maillage d'arrière-plan

est représenté en bleu. Le champ est calculé dans une maille en son centre C grâce aux centres des mailles adjacentes N_1 , N_2 et N_3 et grâce à une maille fictive (dont le centre est représenté par un cercle évidé). Le champ dans cette maille fictive est interpolé depuis l'autre maillage, grâce aux centres des mailles N_4 , N_5 , et N_6 les plus proches de la maille fictive. Les interpolations sont figurées par les triangles verts entre les points N_4 , N_5 , et N_6 .

Avec la version 11.02 utilisée pour le logiciel Star-CCM+ [CD-adapco and Siemens, 2016], les interpolations proposées dans cette méthode sont linéaires. On pourra noter que le logiciel est capable d'identifier l'état des mailles (recouvertes ou non) et de modifier en conséquence le statut des cellules (active ou non) de manière dynamique au cours du calcul. Si le maillage *Overset Mesh* est un maillage animé d'un mouvement de translation (maillage glissant), le maillage d'arrière-plan sera donc simplement activé ou désactivé localement en fonction de la position du maillage glissant. Ce dernier point est important : il n'est pas nécessaire, comme dans d'autres méthodes de maillage adaptatif [Cablea, 2015] de reconstruire et recalculer le maillage en fonction de son avancée. La mise en place d'un maillage glissant avec cette méthode d'*Overset Mesh* va donc permettre de créer une zone de suivi de l'interface mobile solide/liquide. Cette zone mobile et raffinée pourra ainsi se déplacer à chaque pas de temps pour suivre la position de l'interface, sans nécessiter une nouvelle génération du maillage à chaque changement de position. En effet, ces étapes de génération du maillage étant habituellement assez chères en termes de coût de calcul, le fait de pouvoir les éviter à chaque pas de temps, lors du déplacement du maillage mobile, est un réel avantage pour le temps de calcul de la simulation.

Cette méthode d'*Overset Mesh* est habituellement utilisée pour créer et raffiner un maillage autour d'un objet ou d'un obstacle en particulier, comme indiqué dans la documentation de cette fonctionnalité [CD-adapco and Siemens, 2016]. Cette méthode permet notamment de gérer plus simplement des déplacements complexes de maillages ou d'objets dans les simulations. En revanche, cette fonctionnalité n'était a priori pas prévue pour réaliser un suivi de front de solidification : combiner la méthode *Overset Mesh* avec un maillage mobile pour réaliser une sorte de raffinement adaptatif autour de l'interface solide/liquide est ainsi une approche originale. Cette méthode présente deux avantages principaux : elle permet d'introduire dans le modèle un comportement de prédiction-correction sur la position de l'interface (détaillé en partie II.E) qui permet de converger plus rapidement à chaque itération temporelle, tout en permettant de limiter le nombre de mailles et la taille de la zone raffinée, tout en évitant les reconstructions du maillage, grâce au suivi de front par maillage glissant.

Néanmoins, il existe quelques limitations à l'utilisation de cette fonctionnalité, dues à l'implémentation de la méthode dans le logiciel [CD-adapco and Siemens, 2016]. Il faut donc tenir compte de ces restrictions afin de garantir la validité du modèle numérique :

- La définition du modèle impose de choisir la même physique (système d'équations résolues, paramètres des matériaux, etc) dans les deux maillages.
- La conservation de la masse n'est pas strictement imposée dans le traitement de la zone de raccordement. Selon la documentation, cette erreur n'affecte pas la solution avant la troisième ou la quatrième décimale significative.
- Dans la zone de raccordement entre les maillages, les tailles de mailles de l'un et de l'autre doivent être proches : les erreurs liées aux interpolations seront alors du même ordre de grandeur que les erreurs liées à la discrétisation. Il faut généralement compter une épaisseur de quelques mailles (4 ou 5) pour que le raccordement puisse être correctement réalisé.
- Il est préférable de placer la zone de raccordement dans des zones où les variables n'ont pas de trop fortes variations (ceci est un corollaire du point précédent).
- Cette méthode impose une condition pour les simulations transitoires avec maillage glissant. Le déplacement maximal durant un pas de temps ne doit alors pas dépasser la taille de la plus petite maille dans la zone de recouvrement dans le cas du schéma temporel de premier ordre. Dans le cas du schéma temporel de second ordre, il s'agit de ne pas dépasser la moitié de la taille de la plus petite maille. Cette condition impose de choisir

judicieusement la valeur du pas de temps, connaissant l'ordre de grandeur de la vitesse de l'interface (qui sera aussi la vitesse de déplacement du maillage glissant).

On pourra également noter qu'une fonctionnalité du logiciel, appelée « Flowstop », permet dans certains cas de compléter l'action du terme de Darcy, exprimé en (II-11), en imposant strictement la valeur zéro pour les vitesses résiduelles dans la partie solide. Cette fonctionnalité de « Flowstop » n'est cependant compatible qu'avec les modèles pour lesquels les mailles conservent toutes un volume constant. Or, dans le cas de la méthode *Overset Mesh*, le changement d'état des cellules (activées/désactivées) semble être considéré comme une variation de volume du point de vue du logiciel. En effet, l'option « Flowstop » ne fonctionne plus correctement dans ce cas, et introduit alors des valeurs de vitesses erronées dans la zone de recouvrement. La fonction « Flowstop » est donc incompatible avec la méthode de maillage glissant *Overset Mesh*. Les vitesses seront donc freinées dans la partie solide par le terme de Darcy uniquement, ce qui pourra conduire à la possible observation d'un faible écoulement résiduel dans la partie solidifiée.

Après avoir présenté les équations utilisées pour modéliser la thermique et le changement de phase, et les spécificités du logiciel utilisé, la partie suivante présente les modèles pour deux configurations, qui seront dénommées ainsi : le cas de Stefan et le cas de Stelian.

C. Le cas de Stefan

Ce premier modèle vise à reproduire le cas de Stefan [Bianchi et al., 2004], qui présente la solidification d'un corps pur dans un milieu semi-infini, en régime diffusif pur. Il s'agit donc d'un cas de référence académique, fréquemment utilisé à des fins de validation. Dans la formulation de ce problème, qui a une solution analytique pour la thermique, les domaines solides et liquides sont considérés comme deux domaines distincts. Je présenterai donc la formulation analytique de ce modèle, puis je présenterai le modèle mis en place avec le logiciel Star-CCM+, utilisant la formulation enthalpique et les équations présentées dans la partie précédente. La validation de la thermique du modèle enthalpique présenté pourra donc être discutée grâce à la comparaison avec la solution analytique. En effet, bien que la formulation du système d'équations diffère entre la formulation enthalpique et la formulation analytique [Bianchi et al., 2004], il s'agit bien de reproduire le même phénomène physique. La simulation devrait donc être capable de reproduire correctement la solution analytique.

1) Formulation du cas de Stefan

On considère donc ici un cas académique de solidification en régime purement diffusif d'un corps pur dans un milieu semi-infini, avec une interface non diffuse, en régime transitoire. L'interface est donc définie par la surface isotherme correspondant à la température de fusion. Il s'agit ainsi de résoudre l'équation de la chaleur dans deux domaines distincts, le domaine liquide et le domaine solide, avec des conditions de flux et de température sur l'interface. La position de l'interface elle-même est une inconnue du problème.

On considère donc la géométrie suivante, présentée sur la Figure II-4 : un massif liquide semi-infini 2D est donné à une température initiale uniforme T_{h_0} supérieure à la température de fusion T_f . À un instant initial $t = 0$, la température à l'origine $T(x = 0, t)$ est portée à une température T_{c_0} inférieure à la température de fusion T_f . On est donc en présence d'un choc thermique, qui permet le développement d'une couche solide qui se développe dans le massif dans la direction \vec{x} à partir de l'origine. Afin de simplifier le problème, il est posé avec quelques hypothèses simplificatrices :

- les champs de température ne dépendent que de x et de t ,
- les propriétés physiques des deux domaines sont identiques,
- il n'y a aucune source interne de chaleur,

- le liquide est au repos (pas de gravité) et le solide est immobile dans le repère choisi, ce qui correspond à un régime purement diffusif.
- L'interface, non diffuse, est parfaitement plane en raison de la symétrie de la configuration.

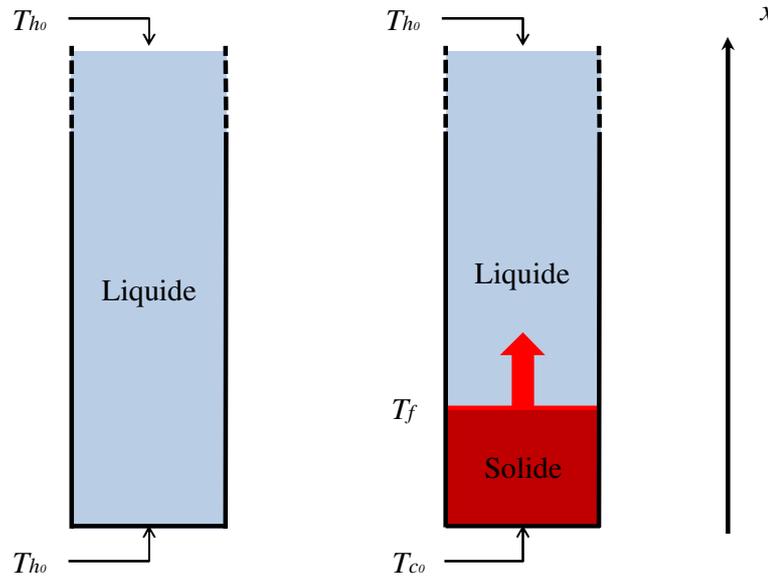


Figure II-4 : Présentation de la géométrie du cas de Stefan. À gauche, le massif semi-infini liquide à l'état initial, uniformément soumis à une température T_{h_0} supérieure à T_f . À l'instant $t = 0$, une température T_{c_0} inférieure à T_f est appliquée à l'extrémité du massif. Une couche de solide se développe donc au cours du temps, comme illustré à droite pour un instant t .

Le massif est donc formé de deux domaines, la zone liquide et la zone solide, séparés par le front de solidification plan localisé au cours du temps à l'abscisse x_{int} . Les deux domaines ayant par hypothèse les mêmes propriétés physiques, on prendra arbitrairement les valeurs des paramètres de la phase liquide. Ceci conduit à l'expression de la diffusivité thermique D_{th} suivante :

$$D_{th} = \frac{\lambda_l}{\rho_l C p_l}, \quad (II-15)$$

avec λ_l la conductivité thermique dans la zone liquide, ρ_l et $C p_l$ respectivement la masse volumique et la capacité thermique de la phase liquide. On a alors l'équation de la chaleur dans le liquide :

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = D_{th} \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \quad \text{pour } x_{int} < x, \quad (II-16)$$

avec T_l la température dans la zone liquide. La position de l'interface x_{int} est une variable au cours du temps. On a également l'équation de la chaleur dans le solide :

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = D_{th} \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad \text{pour } 0 < x < x_{int}, \quad (II-17)$$

avec T_s la température dans la zone solide. Les conditions aux limites données pour ces équations sont les suivantes :

$$T_s(x = 0, t) = T_{c_0}, \quad (II-18)$$

$$T_l(x = +\infty, t) = T_{h_0}, \quad (II-19)$$

$$T_s(x = x_{int}, t) = T_l(x = x_{int}, t) = T_f. \quad (II-20)$$

Au front de solidification, il y a également un dégagement de chaleur latente. Ce rejet à l'interface est donné par l'équation de bilan à l'interface :

$$-\rho_l \frac{dx_{int}}{dt} h_{fusion} = \lambda_l \left(\frac{\partial T_l}{\partial x} \right)_{x=x_{int}} - \lambda_s \left(\frac{\partial T_s}{\partial x} \right)_{x=x_{int}}, \quad (II-21)$$

avec h_{fusion} la chaleur latente de fusion, λ_l la conductivité thermique dans la zone liquide et λ_s la conductivité thermique dans la zone solide (qui est égale à λ_l , conformément à l'hypothèse simplificatrice de ce problème). Cette équation régit la position de l'interface au cours du temps. Pour rappel, la condition initiale donne le massif semi-infini à une température initiale uniforme T_{h_0} supérieure à la température de fusion T_f , soit :

$$T_l(x, t = 0) = T_{h_0}. \quad (II-22)$$

D'après la littérature [Bianchi et al., 2004], on peut obtenir la solution analytique à un tel problème en faisant l'analogie avec le cas d'un choc thermique simple. Les solutions analytiques à ce problème, en tenant compte des conditions aux limites, sont donc données par les expressions suivantes :

$$T_s(x, t) = T_{c_0} + \frac{T_f - T_{c_0}}{erf(\gamma)} \cdot erf\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{th}t}}\right), \quad (II-23)$$

$$T_l(x, t) = T_{h_0} + \frac{T_f - T_{h_0}}{erfc(\gamma)} \cdot erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{th}t}}\right), \quad (II-24)$$

avec erf et $erfc$ les fonctions d'erreur de Gauss et d'erreur complémentaire de Gauss, et avec γ une constante à déterminer. La position du front de solidification est donnée au cours du temps par l'expression suivante :

$$x_{int}(t) = 2\gamma\sqrt{D_{th}t}. \quad (II-25)$$

En introduisant les équations (II-23) et (II-24) dans l'équation (II-21), on obtient une équation algébrique implicite permettant d'obtenir la valeur de la constante γ :

$$\frac{St}{erf(\gamma)} - \frac{T_{h_0} - T_f}{T_f - T_{c_0}} \cdot \frac{St}{erfc(\gamma)} - \sqrt{\pi} \gamma e^{\gamma^2} = 0, \quad (II-26)$$

avec St le nombre adimensionnel de Stefan, défini de la manière suivante :

$$St = \frac{c_{p_l}(T_f - T_{c_0})}{h_{fusion}}. \quad (II-27)$$

Bianchi [Bianchi et al., 2004] propose une solution approchée avec des développements limités pour obtenir une valeur approchée de la constante γ , pour un faible nombre de Stefan. Néanmoins, il est aisé de calculer numériquement la valeur de la constante γ , solution de l'équation (II-26). Nous avons choisi pour cela un outil numérique : le logiciel MATLAB. Avec les paramètres matériaux du silicium (donnés dans le Tableau 0-2), on peut ainsi obtenir la valeur de γ pour ce modèle :

$$\gamma = 0,110324. \quad (II-28)$$

Une fois que cette valeur est déterminée en fonction des paramètres du problème, on a ainsi, grâce à l'expression (II-25), la position du front de solidification au cours du temps de manière analytique. On a également, grâce aux expressions (II-23) et (II-24), les champs de température dans la partie solide et dans la partie liquide analytiquement. Ces expressions analytiques seront utilisées pour réaliser une comparaison avec les résultats des simulations numériques issues du logiciel Star-CCM+, afin de valider la simulation de la thermique et l'avancée du front de solidification.

2) Modélisation du cas de Stefan

On utilise le logiciel Star-CCM+ pour mettre en place un modèle permettant d'obtenir une comparaison avec la formulation du cas de Stefan présentée ci-dessus. Le modèle est 2D, instationnaire, avec une cavité allongée et fermée, de dimensions h en hauteur et R_{int} en largeur, qui sera choisie suffisamment longue pour que les conditions aux limites puissent être considérées comme étant placées à l'infini (voir Figure II-5). On utilise du silicium pour les paramètres matériaux. Le domaine est initialisé en totalité avec du silicium liquide. La partie liquide et la partie solide sont définies dans ce modèle par la méthode enthalpique présentée en II.A, elles ne forment ainsi qu'un seul et même domaine de calcul. Afin de valider l'approche numérique proposée dans cette étude, ce modèle intègre également la méthode de maillage glissant *Overset Mesh*. On relèvera, entre autres, la position du front de solidification au cours du temps, afin de la comparer à la solution analytique (II-25) mentionnée dans la partie précédente.

On applique, dès $t = 0$, une température constante T_{h_0} supérieure à la température de fusion T_f en haut de la cavité, à l'abscisse $x = h$. On applique une température constante T_{c_0} inférieure à la température de fusion T_f , à l'abscisse $x = 0$. Les deux parois formant le côté de la cavité sont des parois adiabatiques. Le domaine de calcul est initialisé avec une température à l'instant $t = 0$ uniforme et égale à T_{h_0} . Il n'y a pas de vitesse de tirage définie pour ce modèle : en effet, c'est l'application brusque de la température T_{c_0} en bas de la cavité qui va provoquer la solidification du silicium. La vitesse d'avancée du front de solidification est donc variable au cours du temps. Dans ce modèle, on ne définit pas de gravité : la solidification a lieu en régime purement diffusif.

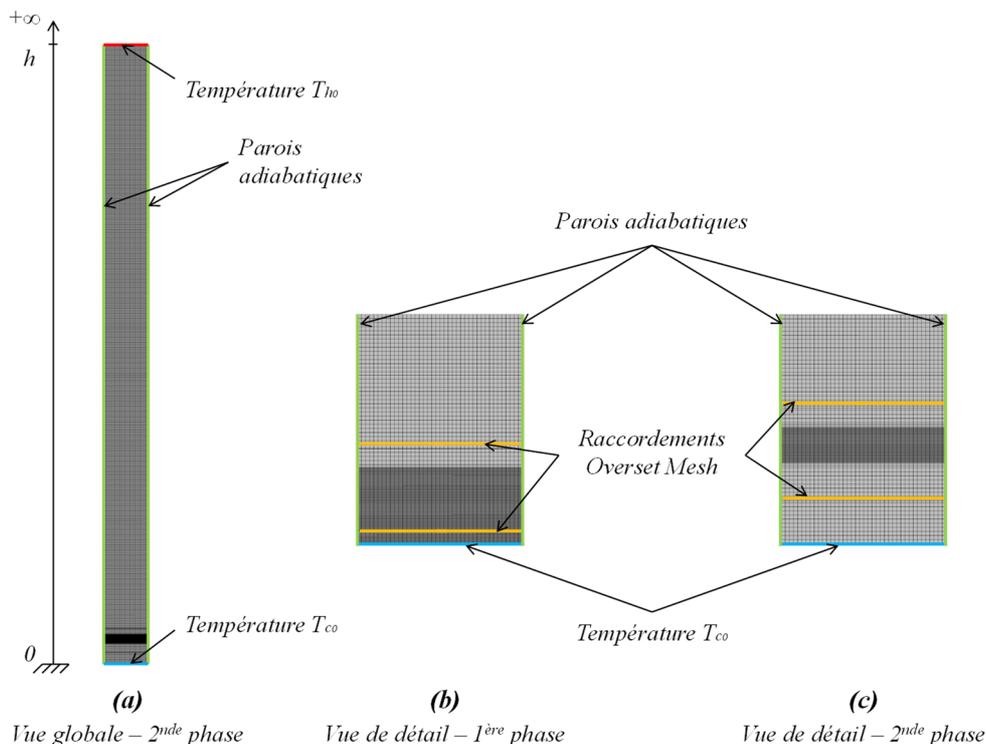


Figure II-5 : Géométrie du modèle et application des conditions aux limites. La figure (a) présente la maillage de la cavité complète, utilisé au cours de la majorité du calcul (2nde phase du calcul). La

figure (b) présente en détail un extrait de la cavité, avec le maillage utilisé pour initialiser le calcul (1^{ère} phase du calcul). La figure (c), qui est une vue de détail de la figure (a), présente le même extrait de la cavité, avec le maillage utilisé au cours de la majorité du calcul (2^{nde} phase du calcul).

Dans cette configuration, le front de solidification apparaît en premier lieu à la paroi froide de la cavité, puis progresse dans le milieu. La méthode du maillage glissant utilisée pour raffiner les mailles dans la zone où se trouve l'interface doit donc être adaptée. En effet, comme présenté sur la Figure II-5, les bords du maillage glissant doivent avoir des mailles de tailles similaires aux mailles du maillage fixe, afin de réaliser un raccord de bonne qualité entre les deux maillages. Ce maillage glissant, qui peut suivre l'interface lors de son avancée, ne peut donc être utilisé que lorsque le front de solidification est situé dans la zone raffinée. On sépare donc ce calcul en deux phases : une première étape correspondant aux premiers instants de la simulation, durant lesquels le front évolue de la paroi jusqu'à la zone permettant de réaliser le suivi du front (Figure II-5 (a)), et une seconde étape correspondant au reste de la simulation, durant laquelle le front est suivi par la méthode du maillage glissant (Figure II-5 (b)). Durant la première étape, le maillage glissant demeure immobile. Toute la partie basse de la cavité est maillée finement, afin que le front puisse être correctement défini à tout instant au cours de son avancée depuis la paroi jusqu'à la zone de suivi. Ensuite, lorsque le front de solidification a rejoint la zone prévue, le calcul est mis en pause. Un nouveau maillage est généré, permettant au maillage glissant de se déplacer et de réaliser correctement le suivi du front. Le reste du calcul est alors effectué durant la seconde étape, grâce au déplacement du maillage glissant. Les maillages correspondant à ces deux phases de calculs successives sont représentés sur la Figure II-5.

On applique sur les bords en haut et en bas de la zone glissante des conditions de raccordement *Overset Mesh*, afin d'assurer la continuité du calcul entre les deux maillages. Sur les bords à gauche et à droite, on applique des conditions de parois adiabatiques, comme pour le maillage fixe. Pour éviter un effet d'entraînement du liquide par la paroi mobile glissante, il faut ajouter, sur les parois latérales, une condition de vitesse tangentielle à la paroi, opposée à la vitesse d'avancée du maillage. Ainsi, le maillage est mobile, mais son déplacement n'a pas d'influence sur la physique du phénomène étudié.

Le maillage utilisé est régulier. Les mailles sont carrées, de côté L (pour ce modèle, comme indiqué dans le Tableau 0-2, on a $L = 300 \mu m$). Pour la zone raffinée du maillage glissant, ainsi que pour le maillage utilisé pour la première phase du calcul, on utilise des mailles rectangulaires de côtés L et $L/8$, afin d'augmenter la résolution spatiale dans la direction de l'avancée du front de solidification. Pour effectuer le passage des mailles carrées à ces mailles anisotropes de côtés L et $L/8$, quelques mailles anisotropes de côtés L et $L/2$ et de côtés L et $L/4$ sont introduites, afin de réaliser un raffinement progressif. Grâce à ce maillage, la zone où les deux phases cohabitent est très localisée, dans une épaisseur maximale de deux mailles. Pour résoudre les équations instationnaires, le solveur du logiciel utilise un schéma numérique implicite au premier ordre en temps, avec un pas de temps choisi, noté Δt . Pour ce modèle, la valeur par défaut du paramètre ε est conservée ($\varepsilon = 0,001 K$).

Cette cavité pourra être considérée comme un massif semi-infini tant que l'interface solide/liquide est assez loin de l'extrémité de la cavité. Tant que le bord supérieur de la cavité sera suffisamment loin du front de solidification, la comparaison entre ce modèle et le cas théorique de Stefan est pertinente, même si la géométrie utilisée n'est pas tout à fait identique. Il faut donc déterminer le temps de simulation critique, en dessous duquel la condition aux limites supérieure pourra être considérée comme étant suffisamment éloignée du front, et au-delà duquel l'influence de cette condition aux limites ne sera plus négligeable. Afin de garantir que la condition aux limites ne perturbe pas la solution calculée à un temps donné pour la thermique, on étudie l'évolution analytique de la température au cours du temps, à l'abscisse $x = h$. Tant que cette température n'évolue pas significativement, on peut considérer que l'abscisse $x = h$ est à l'infini du point de vue des effets thermiques. À partir de l'instant où la température à l'abscisse $x = h$ commence à évoluer, c'est que la couche limite thermique issue du développement du front de solidification s'est suffisamment propagée pour que l'abscisse $x = h$ ne puisse plus être considérée à l'infini du point de vue des effets thermiques. On calcule donc l'écart $Err(t)$ entre la température à l'infini et la température à l'abscisse $x = h$ au cours du temps de la manière suivante :

$$Err(t) = T_{h_0} - T_l(x = h, t), \quad (II-29)$$

avec $T_l(x = h, t)$ donné analytiquement grâce à l'équation (II-24). On considèrera que le modèle est représentatif de la configuration de Stefan tant que l'écart $Err(t)$ entre la température à l'infini et la température à l'abscisse $x = h$ reste inférieur à 0,001 K, ce qui est un critère extrêmement rigoureux. Pour déterminer le temps de simulation critique correspondant, on utilise donc la table suivante, obtenue pour $h = 18 \text{ cm}$.

Temps de simulation t	Condition à l'infini T_{h_0}	Température analytique T_l	Écart $Err(t)$
0 s	1737 K	1737,0000 K	0
10 s	1737 K	1737,0000 K	$-1,8370.10^{-16}$
20 s	1737 K	1737,0000 K	$-4,3043.10^{-8}$
30 s	1737 K	1737,0000 K	$-2,8740.10^{-5}$
40 s	1737 K	1736,9992 K	$-7,7088.10^{-4}$
50 s	1737 K	1736,9943 K	-0,0057
60 s	1737 K	1736,9783 K	-0,0217

Tableau II-1 : Table des écarts entre la température à l'infini et la température T_l à l'abscisse $x = h$, calculée analytiquement à l'aide de l'expression (II-29), en fonction du temps. Cette table est calculée pour du silicium et une hauteur h de 18 cm.

Le Tableau II-1 indique que pour une simulation allant jusqu'à $t = 40 \text{ s}$, l'écart $Err(t)$ reste inférieur à 0,001 K. Au-delà de $t = 40 \text{ s}$, la diffusion de la chaleur commence à avoir de l'influence au bord de la cavité, qui ne peut plus, par conséquent, être considérée à l'infini. Le temps critique à ne pas dépasser pour réaliser les comparaisons entre le modèle présenté ci-dessus et le cas de Stefan, avec les paramètres choisis pour ce modèle, est donc déterminé. Bien que les méthodes de résolution mises en œuvre dans ce modèle et dans la formulation analytique du cas de Stefan diffèrent, il s'agit bien de la reproduction du même phénomène physique, dans des conditions similaires : la comparaison de ces deux approches, qui sera présentée dans une partie suivante, permettra de valider le modèle présenté avec la méthode de maillage glissant. Elle donnera aussi une estimation des gains en performance et en coût de calcul que l'on peut espérer grâce à l'utilisation de cette méthode.

D. Le cas de Stelian

Le modèle numérique présenté dans cette partie s'appuie sur les travaux de Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003]. Dans ces travaux, Stelian réalise une simulation numérique d'un four Bridgman vertical ("Four de Grenoble") afin de comparer ses résultats à des données expérimentales. Le modèle présenté est un modèle 2D axisymétrique représentant la croissance cristalline d'un alliage GaInSb (Gallium-Indium-Antimoine) faiblement concentré en Indium. Le voisinage du creuset en nitrure de bore n'est pas simulé dans ce modèle, son action est traduite par les conditions aux limites appliquées sur les bords du domaine. Un gradient thermique axial constant (proche des conditions thermiques réelles) est appliqué et déplacé dans le four, afin de réaliser la solidification dirigée de l'alliage. Dans ce modèle, Stelian résout la thermique avec le suivi du front, ainsi que la ségrégation, de manière instationnaire. La partie solide et la partie liquide sont définies comme deux domaines de calcul distincts avec une méthode de maillage adaptatif (déformable). Les calculs ont été réalisés dans un premier temps avec le logiciel FIDAP (qui n'est plus commercialisé aujourd'hui), pour un cas de comparaison expérience/numérique avec une vitesse de tirage de $7 \mu\text{m/s}$. Pour cette vitesse de tirage élevée, un effet d'amortissement solutal de la convection a été observé. Les dernières données communiquées ont été obtenues avec le logiciel COMSOL Multiphysics, pour une vitesse de tirage de $1 \mu\text{m/s}$, qui est plus favorable pour la validation des modèles présentés dans cette étude.

Afin de valider l'approche numérique que je propose dans cette étude, avec notamment la méthode *Overset Mesh* de maillage glissant, je vais chercher à reproduire le modèle de Stelian afin de pouvoir comparer mes résultats avec ses données numériques et expérimentales.

Le creuset est assimilé à un cylindre creux de hauteur h , de rayon intérieur R_{int} et de rayon extérieur R_{ext} , entourant une cavité dans laquelle est placée une charge à solidifier. Le modèle étant axisymétrique, le creuset et la cavité sont modélisés par deux domaines rectangulaires distincts, en deux dimensions, de hauteur et de largeur correspondantes. La cavité dans laquelle est placée la charge en GaInSb à solidifier est donc rectangulaire, de dimension h et R_{int} . Le creuset, enveloppe solide en nitrure de bore, est accolée à un bord de la cavité.

Comme indiqué sur la Figure II-6, une condition de symétrie axiale est appliquée sur l'axe central de la géométrie. Une condition aux limites adiabatique est appliquée sur le bord extérieur du creuset. Le bord intérieur entre la partie solide et la charge à solidifier est une interface entre deux domaines de calcul distincts, assurant une continuité du champ de température et des flux de chaleur. Des conditions aux limites en température sont imposées aux bords supérieurs et inférieurs : on applique la température T_h (chaude) au bord supérieur, et la température T_c (froide) au bord inférieur, calculées selon les expressions (II-30) et (II-31) données plus loin.

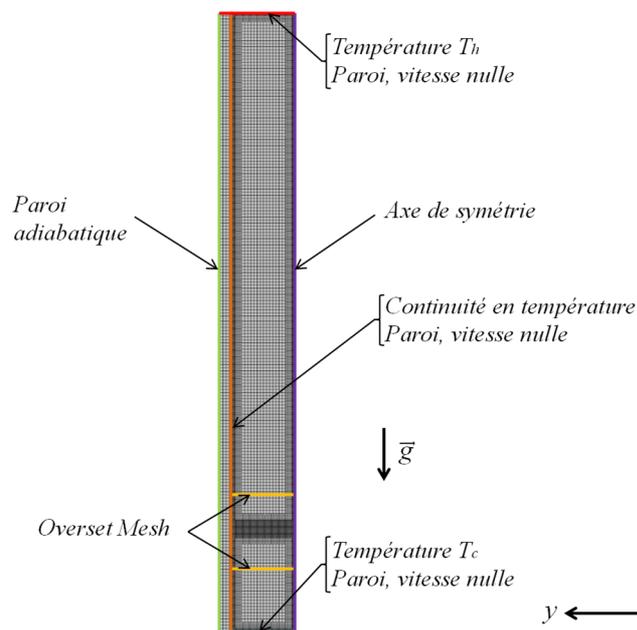


Figure II-6 : Géométrie du modèle et application des conditions aux limites. La cavité et le creuset sont deux domaines rectangulaires accolés et distincts. Le modèle est axisymétrique. Une condition aux limites adiabatique est appliquée sur un bord extérieur du creuset. Une condition de continuité en température et en flux de chaleur est appliquée sur le bord commun aux deux domaines. Sur ce bord, une condition de vitesse nulle est également appliquée, ainsi que sur les bords supérieurs et inférieurs.

En haut et en bas, on applique également des conditions de températures imposées. Le vecteur \vec{g} représente la gravité.

Sur les bords supérieurs et inférieurs, ainsi que sur le bord commun à la cavité et au creuset, on applique des conditions de vitesse nulle à la paroi. Le vecteur gravité \vec{g} , introduit dans le terme de Boussinesq par l'équation (II-10), est dirigé vers le bas.

Pour initialiser le calcul, on applique une condition initiale en température et en vitesse, correspondant à l'instant $t = 0$. En accord avec le protocole présenté par Stelian [Stelian et al., 2003], les champs utilisés pour la condition initiale sont issus d'une simulation stationnaire préalablement réalisée sur la même géométrie, avec des conditions aux limites analogues. D'un point de vue physique, cela revient à considérer qu'avant de réaliser le tirage pour la solidification dirigée, les conditions imposées par le four restent constantes suffisamment longtemps pour que le système atteigne un état stationnaire. Les températures imposées en haut et en bas sont respectivement choisies plus grande et plus petite que la température de fusion : de cette manière, pour cet état stationnaire, l'interface solide/liquide existe. Sa position est alors déterminée par la résolution de ce problème stationnaire, et le maillage glissant est alors positionné de manière à couvrir la zone de l'interface.

Par ailleurs, le calcul de la condition initiale permet aussi d'obtenir le profil de température le long de l'axe de symétrie du système. Hors de la zone de l'interface, où a lieu le rejet de la chaleur latente, on peut observer que le profil de température est quasiment linéaire aussi bien dans la partie liquide que dans la partie solide, comme illustré en Figure II-7. Les gradients axiaux thermiques dans la partie liquide et dans la partie solide, respectivement GT_l et GT_s , seront donc déduits de ce calcul dans les zones proches des bords en haut et en bas.

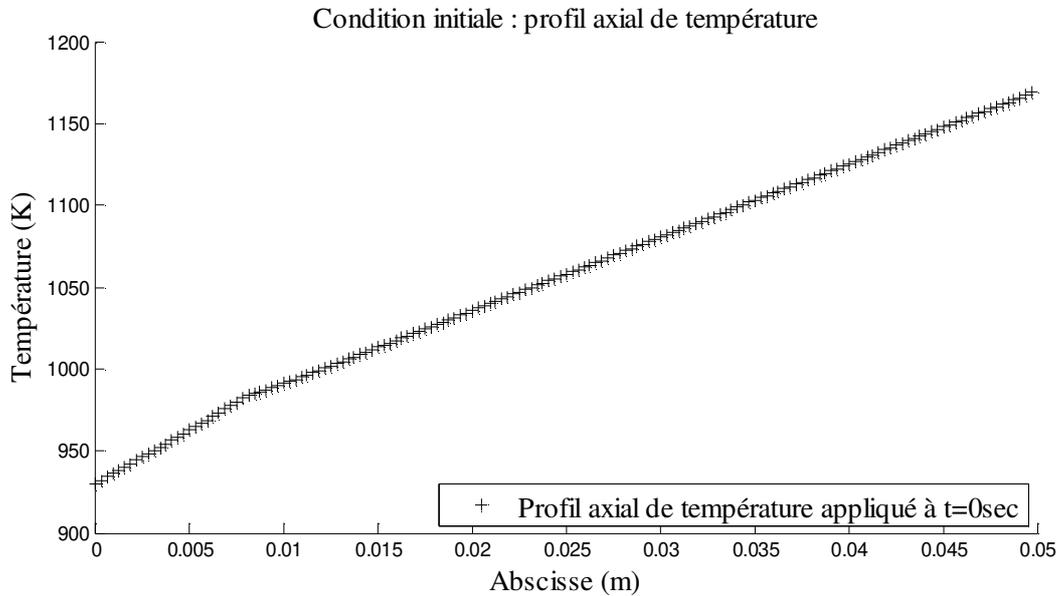


Figure II-7 : Profil axial de température, tracé le long de l'axe de symétrie du système, et appliqué à l'instant $t = 0$ s comme condition initiale. Ce profil est issu d'une simulation stationnaire. Loin de l'interface solide/liquide (repérée par le changement de pente du profil), le profil de température est quasi-linéaire : on peut facilement en déduire les gradients axiaux thermiques GT_l et GT_s aux bords, respectivement dans la partie liquide (à droite de la figure) et dans la partie solide (à gauche).

Ces gradients sont utilisés pour déterminer les conditions aux limites en température appliquées au cours de la simulation instationnaire. En effet, les températures appliquées sont calculées en fonction du temps de la manière suivante :

$$T_h(t) = T_{h_0} - GT_l \cdot V_t \cdot t, \quad (II-30)$$

$$T_c(t) = T_{c_0} - GT_s \cdot V_t \cdot t, \quad (II-31)$$

avec T_{h_0} la température initiale au bord supérieur, T_{c_0} la température initiale au bord inférieur, GT_l et GT_s respectivement les gradients thermiques axiaux dans la partie liquide et dans la partie solide, V_t la vitesse de tirage imposée par le four, et t le temps. D'un point de vue physique, ces conditions aux limites traduisent la translation relative du creuset par rapport au gradient thermique que le four lui applique. En accord avec le protocole présenté par Stelian [Stelian et al., 2003], la vitesse de tirage et les gradients thermiques ressentis dans les parties liquides et solides sont constants au cours du temps. Les températures imposées aux bords décroissent donc de manière proportionnelle au temps écoulé.

Les domaines de calculs sont maillés avec des éléments structurés carrés de taille L (pour ce modèle, comme indiqué dans le Tableau 0-2, on a $L = 250 \mu m$). Certaines zones de ces domaines sont raffinées afin d'obtenir une meilleure résolution pour les calculs : les bords de la cavité et le bord commun aux deux domaines, ainsi que la zone proche de l'interface solide/liquide, sont maillés avec des éléments similaires de taille $L/4$. Des mailles de taille $L/2$ assurent le passage des mailles de taille L aux mailles de taille $L/4$. Le domaine associé à la cavité contenant la charge à solidifier est en

réalité décomposé en deux maillages, comme représenté sur la Figure II-8 : un maillage fixe et un maillage glissant. Le maillage fixe n'est pas particulièrement raffiné au centre de la cavité, tandis que le maillage glissant a une zone maillée finement, qui permettra d'avoir une bonne résolution de calcul au voisinage de l'interface. La position de ce maillage glissant sera ajustée au cours du calcul afin de suivre la position de l'interface solide/liquide.

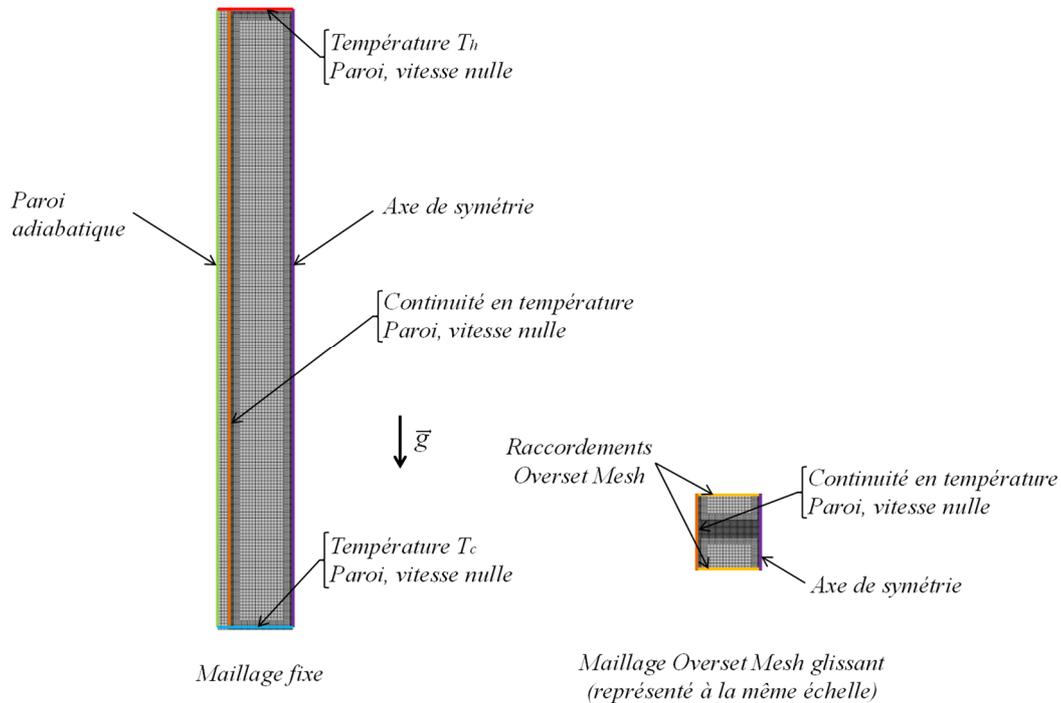


Figure II-8 : Décomposition du maillage de la cavité en un maillage fixe (à gauche) et en un maillage glissant (à la même échelle, à droite). Des zones de raccordement *Overset Mesh* sont définies entre le maillage d'arrière-plan et le maillage mobile afin d'assurer la continuité des champs d'un maillage à l'autre. La configuration finale est représentée en Figure II-6. Le vecteur \vec{g} représente la gravité.

Afin de réaliser le calcul sur ces deux maillages comme s'il s'agissait d'un seul domaine de calcul, des conditions aux limites de raccordement *Overset Mesh* sont appliquées sur les bords supérieurs et inférieurs du maillage glissant. Comme indiqué en partie II.B, ce type de condition aux limites permet d'assurer la continuité des champs entre les deux maillages grâce à des interpolations. Les autres bords du maillage glissant coïncident parfaitement avec les bords du maillage fixe, tout au long du calcul. Les conditions aux limites appliquées sur ces bords sont donc identiques à celles appliquées sur les bords du maillage fixe.

Pour réaliser la simulation et résoudre les équations en régime instationnaire, le solveur du logiciel est paramétré avec un pas de temps, noté Δt . Le solveur instationnaire du logiciel utilise un schéma numérique implicite au premier ordre en temps pour réaliser la simulation. Enfin, la valeur du paramètre ε est choisie en accord avec la taille des mailles dans la zone prévue pour l'interface solide/liquide, soit $\varepsilon = 0,5 K$ (voir Équations (II-2) et (II-3)).

E. Suivi du front et effet de prédiction

Au cours du calcul, on cherche à identifier précisément la position de l'interface solide/liquide, afin de pouvoir suivre son avancée tout au long de la simulation. Pour cela, on utilise l'isosurface de température de fusion, comme présenté ci-après. On présentera également dans cette partie d'autres quantités qui sont calculées tout au long de la simulation, afin d'établir des critères de convergence sur l'avancée de l'interface et de déplacer le maillage glissant pour assurer le suivi du front. On verra aussi comment cette translation du maillage, qui assure le suivi de l'interface, permet d'obtenir un effet de prédiction très bénéfique pour les performances de ce modèle, en termes de coût de calcul.

Le modèle utilise une approche enthalpique pour définir l'interface solide/liquide. Selon cette méthode, l'interface est diffuse : c'est l'évolution de la fraction solide α qui permet de faire la transition entre l'état solide et l'état liquide. Dans le cadre de notre travail, cependant, l'interface solide/liquide est lisse. Afin de localiser cette interface plus précisément dans la zone où $0 < \alpha < 1$, on définit l'isosurface de température T_f , la température de fusion. Cette isosurface, évaluée grâce aux données de la simulation, est disponible à tout instant du calcul, et représente le front de solidification. D'après la formulation de l'équation (II-4), l'isosurface de température T_f est équivalente à l'isosurface de fraction solide $\alpha = 0,5$. C'est pourquoi, dans ce modèle, le front de solidification est repéré par l'isosurface de température de fusion, tout au long du calcul (voir Figure II-9).

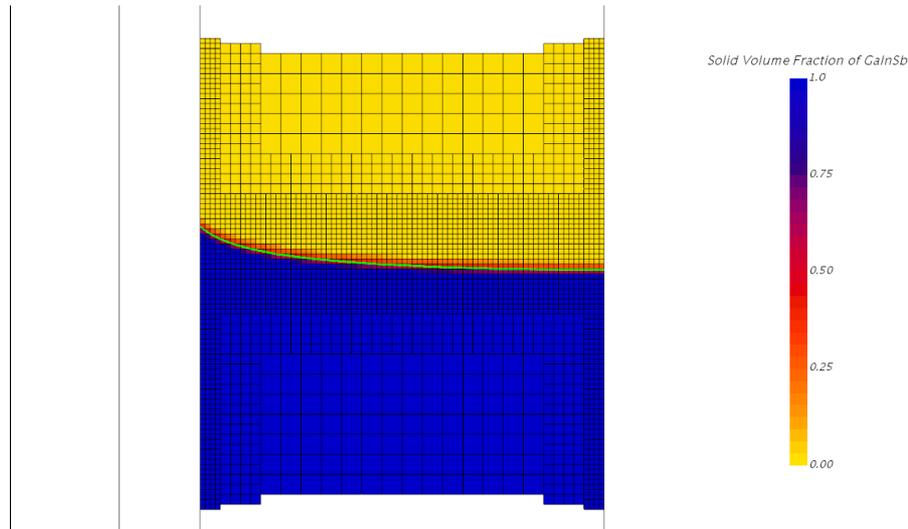


Figure II-9 : Représentation de l'interface solide/liquide au cours du calcul pour le cas de Stelian, dans la zone raffinée pour le suivi du front. La phase liquide est au-dessus, la phase solide au-dessous. L'interface est diffuse et localisée sur une épaisseur de quelques mailles. L'isosurface représentant le front lisse est tracée en vert, dans la zone pâteuse.

Au cours du calcul, on cherche à évaluer l'avancée de l'interface dans la direction du tirage. L'interface solide/liquide étant lisse (c'est-à-dire non dendritique) mais courbée, on va repérer le point le plus bas de l'interface. Pour localiser ce point, on recherche au cours du calcul, parmi les points composant l'isosurface, celui dont l'abscisse est la plus faible suivant \vec{x} . L'identification de cette valeur minimum permet de connaître la position extrême basse du front de solidification, notée x_{int}^{min} . Afin d'assurer la qualité du suivi du front, il faut s'assurer que l'interface ne dépasse pas de la zone maillée finement. Cette zone glisse pour suivre le front avec une avancée contrôlée, de distance d , à chaque début d'itération temporelle. Il faut donc estimer l'avancée de l'interface au cours d'un pas de temps, pour déplacer le maillage glissant d'une distance d correspondante. En considérant les conditions de tirage à vitesse constante, on peut estimer que l'avancée de l'interface variera peu d'une itération temporelle à l'autre. Ainsi, on estime la distance d comme étant l'avancée de l'interface à l'itération temporelle précédente. Plus précisément, on estime la distance d comme étant la distance parcourue, au pas de temps précédent, par la position extrême basse du front, identifiée par x_{int}^{min} . Une description plus détaillée de l'évaluation de la distance d est fournie sur la Figure IV-6.

Il faut bien noter que cette étape, impliquant l'évaluation de la distance d et le déplacement du maillage glissant, est cruciale pour l'amélioration des performances du calcul. En effet, comme expliqué plus en détail dans la partie IV.B, les champs portés par les mailles du maillage glissant sont translatés lors du déplacement du maillage. En l'occurrence, les champs de température et de fraction solide, notamment, sont déplacés de la distance d lors de l'étape de translation du maillage. Cela implique alors que le front de solidification, repéré comme une isosurface de température, est

également translaté. Le tirage étant réalisé à vitesse constante, on peut supposer que la vitesse d'avancée de l'interface varie très peu d'une itération à l'autre. La translation de l'interface en fonction de son avancée au pas de temps précédent l'amène donc à une position très proche de sa position attendue. Les itérations numériques réalisées ensuite assurent le calcul correct des champs. Cependant, on réduit ainsi le nombre d'itérations numériques nécessaires pour converger vers le résultat, l'interface étant déjà proche de sa position finale. Cette étape permet donc d'assurer le suivi du front en conservant un maillage fin sur une zone limitée et localisée sur l'interface à tout instant, tout en permettant de réaliser une prédiction sur la nouvelle position de l'interface. On verra par la suite que cette prédiction permet ainsi d'obtenir un gain non négligeable en termes de temps de calcul.

On peut aussi évaluer à chaque instant la moyenne des abscisses suivant \vec{x} avec tous les points composant l'isosurface. Cette valeur, notée x_{int}^{moy} , permet d'avoir un indicateur scalaire permettant de détecter un mouvement de l'interface. En effet, si un ou plusieurs points de l'isosurface bougent au cours des itérations numériques, la variation d'abscisses du ou des points concernés implique une variation de la valeur moyenne des abscisses de l'isosurface. Cette quantité x_{int}^{moy} sera utilisée pour définir les critères de convergence du calcul, dans la partie suivante.

F. Critères de convergence

Le solveur résout les équations du problème de manière numérique, en approchant au mieux la solution à une erreur numérique près. Cette erreur peut être contrôlée, par exemple en imposant un certain nombre d'itérations de calcul par itération temporelle pour la réduire, ou encore en imposant un seuil ou un critère prédéterminé que l'erreur numérique doit vérifier pour passer à l'itération temporelle suivante.

Pour les modèles présentés ici, plusieurs critères sur les résidus du calcul sont mis en place. Ces critères doivent tous être vérifiés simultanément pour que les itérations numériques prennent fin, passant ainsi à la nouvelle itération temporelle. Deux types de critères sont utilisés : les critères définissant une valeur seuil, et les critères définissant une limite asymptotique. Les calculs de l'équation de continuité, des équations de Navier-Stokes et de l'équation de transport du scalaire passif seront considérés comme convergés lorsque les résidus de ces calculs deviendront inférieurs à une valeur seuil minimum, notée Res .

Il est à noter que dans le logiciel Star-CCM+ [CD-adapco and Siemens, 2016], les résidus de calculs ne sont pas des quantités pouvant être directement reliées à des grandeurs physiques ou à une erreur numérique liée à la convergence. En effet, selon la documentation, il s'agit simplement de grandeurs qui décroissent au fur et à mesure de la convergence, mais la rapidité de cette décroissance, et la valeur seuil permettant de considérer que le calcul est convergé dépendent du type de calcul réalisé. Par exemple, si le calcul est initié avec des champs qui vérifient très exactement les équations, les résidus ne diminueront pas du tout. C'est pour cette raison que sont ajoutés deux autres critères, liés à des grandeurs physiques évaluées dans ces modèles, et plus pertinentes pour juger de la convergence du calcul.

Ces deux critères, qui s'ajoutent aux autres, sont des critères asymptotiques : on considèrera que le calcul a réalisé assez d'itérations numériques lorsque les valeurs considérées resteront identiques, à un certain critère près, au cours des dix dernières itérations numériques. Le problème considéré étant un problème de solidification, on peut considérer que la convergence du calcul conduit la position de l'interface solide/liquide à se stabiliser, pour ne plus évoluer lorsque le calcul a convergé. On définit alors une distance, notée Res_{int} . Le premier critère asymptotique porte sur la valeur x_{int}^{min} , qui représente la position extrême basse de l'interface : sur les dix dernières itérations de calcul, les dix valeurs de x_{int}^{min} associées doivent toutes avoir un écart avec les autres inférieur à Res_{int} pour pouvoir considérer que la position extrême basse de l'interface n'évolue plus au cours de la convergence. De même, le second critère porte sur la valeur x_{int}^{moy} , qui représente la position de l'ensemble des points de l'interface : sur les dix dernières itérations de calcul, les dix valeurs de x_{int}^{moy}

associées doivent toutes avoir un écart avec les autres inférieur à Res_{int} pour pouvoir considérer que les positions des points de l'interface n'évoluent plus au cours de la convergence.

Ce dernier critère peut être interprété de différentes manières selon les cas : en effet, l'évolution de la valeur de x_{int}^{moy} peut provenir de l'évolution d'un seul point, de plusieurs points, ou encore de l'ensemble. On appelle N_{int} le nombre de points qui composent l'isosurface. On considère les deux cas extrêmes : tous les points de l'interface se déplacent de la même manière ou bien seul un point de l'interface se déplace au cours des itérations numériques. Dans le premier cas, le critère sera vérifié si l'ensemble des points se déplace uniformément d'une distance inférieure à Res_{int} . Dans le second cas, le critère sera vérifié si un unique point se déplace d'une distance inférieure à $N_{int} \cdot Res_{int}$. Il faut donc choisir judicieusement la valeur du critère Res_{int} en accord avec le nombre de points définissant l'isosurface, afin de s'assurer de la pertinence du critère. Dans un cas comme dans l'autre, si ce critère est respecté, on considère que la position de l'interface est stabilisée et que le calcul a donc convergé, en considérant que la valeur de Res_{int} a été choisie suffisamment petite.

Par ailleurs, pour éviter les problèmes numériques, un nombre d'itérations numériques minimum et maximum, sont définis, respectivement $Niter_{min}$ et $Niter_{max}$. L'itération temporelle prend fin lorsque, suite aux itérations numériques, tous les critères présentés sont vérifiés simultanément, sauf si le nombre minimum d'itérations numériques n'a pas encore été atteint ou si le nombre d'itérations numériques dépasse le nombre maximum autorisé.

Pour conclure, dans cette partie, deux modèles ont été présentés en détails : le cas de Stefan et le cas de Stelian. La modélisation de la ségrégation sera cependant présentée dans une autre partie. Dans la partie suivante seront comparés les résultats connus, analytiques pour le premier cas, et numériques pour le second, avec les résultats obtenus avec la méthode de maillage glissant présentée. Les performances et le temps de calcul des différentes approches seront également discutés.

Chapitre III.

**Résultats pour les cas de validation
en thermique et hydrodynamique**

Dans cette partie, deux cas sont étudiés : le cas académique de Stefan d'une part, qui a une solution analytique dans une configuration de référence, et d'autre part les travaux numériques de Stelian dans une configuration plus complexe, qui donnent une solution numérique qui pourra servir de référence pour nos comparaisons. Par commodité, pour la suite, on désignera cette configuration et cette solution numérique par l'appellation « cas de Stelian ». Les caractéristiques de ces modèles ont été présentées dans la partie précédente (voir partie II.C et partie II.D). Cette étude est menée pour valider les résultats des simulations en thermique et hydrodynamique, et pour caractériser l'impact des méthodes numériques proposées sur les performances de calcul. Dans ce but, pour chacun des deux cas, plusieurs modèles numériques sont mis en place en déclinant certains paramètres numériques (taille du maillage, maillage fixe ou glissant, etc). Des comparaisons entre ces différents cas permettront de conclure sur l'influence respective des paramètres numériques, et des comparaisons avec les solutions de référence permettront de conclure sur la validité des résultats obtenus.

A. Résultats obtenus pour le cas de Stefan

Pour ce cas académique, une solution analytique a été identifiée (voir Équations (II-23), (II-24) et (II-25)). Ce modèle reproduit un phénomène transitoire de solidification en régime purement diffusif, suite à une modification brusque des conditions aux limites en température. On pourra considérer que les résultats issus des simulations sont valides s'ils reproduisent suffisamment bien d'une part l'évolution de la position de l'interface solide/liquide au cours du temps, et d'autre part le profil de température à un instant donné, tous deux connus analytiquement.

Deux modèles numériques sont mis en place pour étudier ce cas. Le premier modèle, désigné par l'appellation « Maillage glissant », correspond au modèle présenté en partie précédente, avec la mise en place de la méthode de maillage glissant et avec une taille de maille raffinée uniquement dans la zone mobile de suivi de l'interface. Le maillage de ce modèle est composé de 27560 mailles. Le second modèle, désigné par l'appellation « Maillage fixe », diffère du premier par le maillage utilisé : pour ce modèle, un seul maillage est mis en place, sans utiliser la méthode de maillage glissant. Ce maillage reste fixe au cours du temps, et est uniforme sur l'ensemble du domaine avec 192000 mailles fines anisotropes de largeur L et de hauteur $L/8$, identiques aux mailles utilisées dans la zone mobile de suivi du premier modèle. Tous les autres paramètres de ces deux modèles sont identiques.

Le modèle « Maillage fixe » présente la configuration qui doit être mise en place, en absence de méthode de maillage adaptatif, afin de garantir constamment un certain raffinement au voisinage de l'interface solide/liquide, tout au long de la simulation. En effet, lors de la solidification, l'interface avance en balayant le domaine ; sans méthode pour adapter le maillage au cours du calcul, il faut donc préalablement mailler le domaine de manière uniformément fine. Comme présenté au Chapitre II, le modèle « Maillage glissant » permet de mettre en place un maillage adaptatif et donc de ne mailler finement que la zone mobile de suivi de l'interface. Ces deux modèles garantissent ainsi chacun, à tout instant de la simulation, que les mailles au voisinage de l'interface solide/liquide sont fines, ce qui permet d'obtenir des résultats plus précis, et qu'elles sont raffinées de la même manière, ce qui rend comparables les résultats issus de ces deux modèles.

La Figure III-1 présente la comparaison des résultats obtenus pour la position de l'interface au cours du temps. La position x de l'interface augmente de manière continue, avec une pente qui est verticale à l'origine (vitesse infinie à $t = 0$) et qui diminue continuellement au cours de la simulation. En effet, la position x de l'interface est régie par une loi en racine carrée (voir Équation (II-25)). Sur les 40 secondes observées, la vitesse moyenne est d'environ 0,16 mm/s. Cette figure montre que les deux modèles reproduisent fidèlement l'avancée de l'interface au cours du régime transitoire. D'après cette figure, la méthode de maillage glissant utilisée permet bien d'obtenir un résultat tout à fait comparable à une simulation réalisée avec un maillage classique et uniformément raffiné ; et les deux approches donnent des résultats en accord avec la solution analytique.

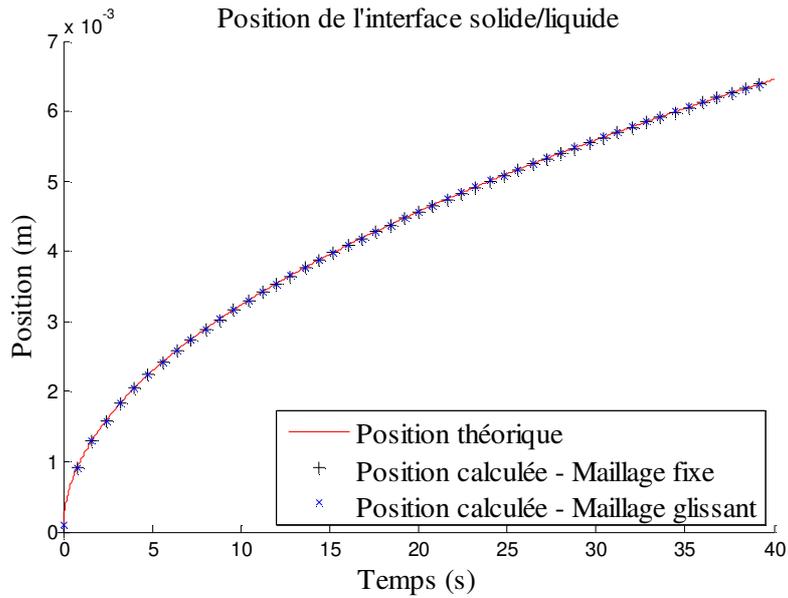


Figure III-1 : Évolution de la position de l'interface solide/liquide au cours du temps. La position théorique, obtenue analytiquement (voir Équation (II-25)) est tracée en rouge. Les positions issues des simulations avec les modèles « Maillage glissant » et « Maillage fixe » sont représentées avec les points respectivement bleus et noirs.

La comparaison des écarts relatifs sur la position de l'interface (voir Figure III-2) permet de confirmer la validation des résultats : à l'exception des premiers instants de la simulation, pour les deux modèles, l'écart relatif est faible et reste inférieur à 0,2% d'écart avec la solution analytique. Au premier instant de la solidification, dans le cas de Stefan, la vitesse de l'interface est infinie : elle suit une loi en dérivée de la fonction racine carrée, et ne peut donc pas être définie à l'instant $t = 0$. Il est donc normal que la simulation, quel que soit le modèle mis en place, capture moins bien les premiers instants de la solidification. Néanmoins, l'écart qui en résulte sur la position de l'interface se résorbe assez rapidement au cours du temps.

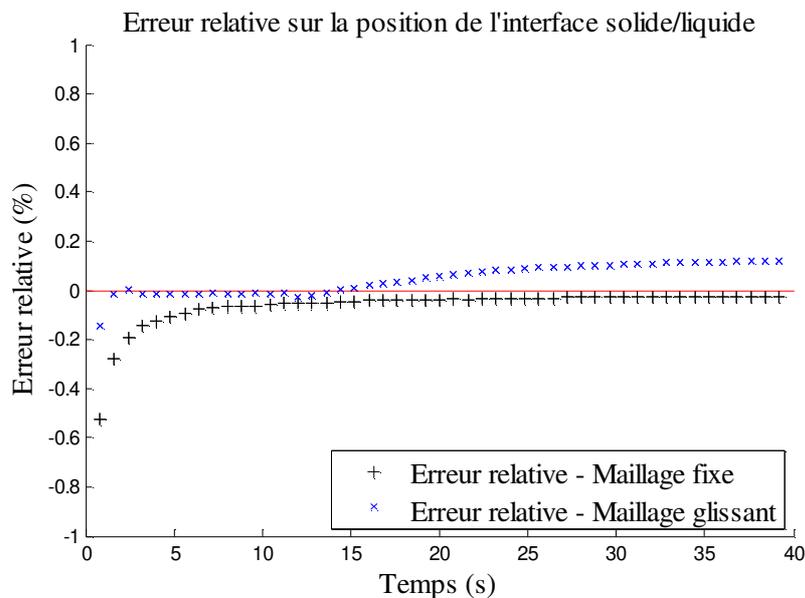


Figure III-2 : Évolution de l'écart relatif sur la position de l'interface solide/liquide au cours du temps, par rapport à la solution analytique. La droite rouge représente la ligne à 0% d'écart. Les écarts relatifs sur les positions de l'interface obtenus avec les modèles « Maillage glissant » et « Maillage fixe » sont représentés avec les points respectivement bleus et noirs.

On peut également noter que l'écart relatif issu du modèle « Maillage glissant », qui reste quasiment constant de $t = 2 \text{ s}$ à $t = 11,76 \text{ s}$, évolue doucement à partir de $t = 11,76 \text{ s}$ jusqu'à se stabiliser à nouveau. Bien que les amplitudes couvertes par cette évolution restent suffisamment faibles pour pouvoir valider le modèle proposé, cette évolution peut néanmoins s'expliquer : en effet, comme présenté en partie II.C, la simulation avec le modèle « Maillage glissant » se décompose en deux étapes distinctes. La première étape du calcul est une initialisation avec un maillage fixe (avec 30480 mailles), pour que l'interface solide/liquide puisse atteindre un éloignement à la paroi arbitrairement fixé à 3,5 mm. Cet éloignement, suffisant pour permettre la mise en place du maillage glissant par méthode *Overset Mesh*, est atteint à l'instant $t = 11,76 \text{ s}$. La simulation est alors mise en pause, et le maillage est modifié pour introduire le maillage glissant dans le modèle numérique. La seconde étape du calcul commence ainsi à l'instant $t = 11,76 \text{ s}$, lorsque le calcul reprend avec la méthode de maillage glissant. C'est donc cette décomposition du calcul en deux parties (maillage fixe puis maillage glissant) qui explique cette évolution de l'écart sur la position de l'interface à partir de $t = 11,76 \text{ s}$ (voir Figure III-2). On notera également que le modèle avec le maillage fixe donne un résultat un peu moins bon, pour les premiers instants de la simulation, que le modèle avec le maillage glissant. En considérant l'étude de convergence qui sera menée par la suite sur le cas de Stelian, et qui permet de conclure que les paramètres de convergence doivent être adaptés en fonction du maillage utilisé, on peut expliquer ce comportement. En effet, ces deux modèles ont les mêmes paramètres de convergence, mais pas les mêmes maillages. Autrement dit, le modèle avec le maillage glissant a un degré de convergence plus poussé que le modèle avec le maillage fixe, relativement au maillage mis en place (que se soit avant ou après l'instant $t = 11,76 \text{ s}$). Le transitoire initial est donc ainsi mieux décrit avec le modèle avec le maillage glissant. Pour obtenir un résultat comparable avec le modèle avec maillage fixe, il faudrait utiliser des paramètres de convergence plus stricts.

Ainsi, les deux modèles proposés sont capables de simuler correctement ce phénomène transitoire et de reproduire l'avancée de l'interface. Afin de valider complètement ces modèles numériques, il convient de s'intéresser également aux profils de température issus de ces simulations.

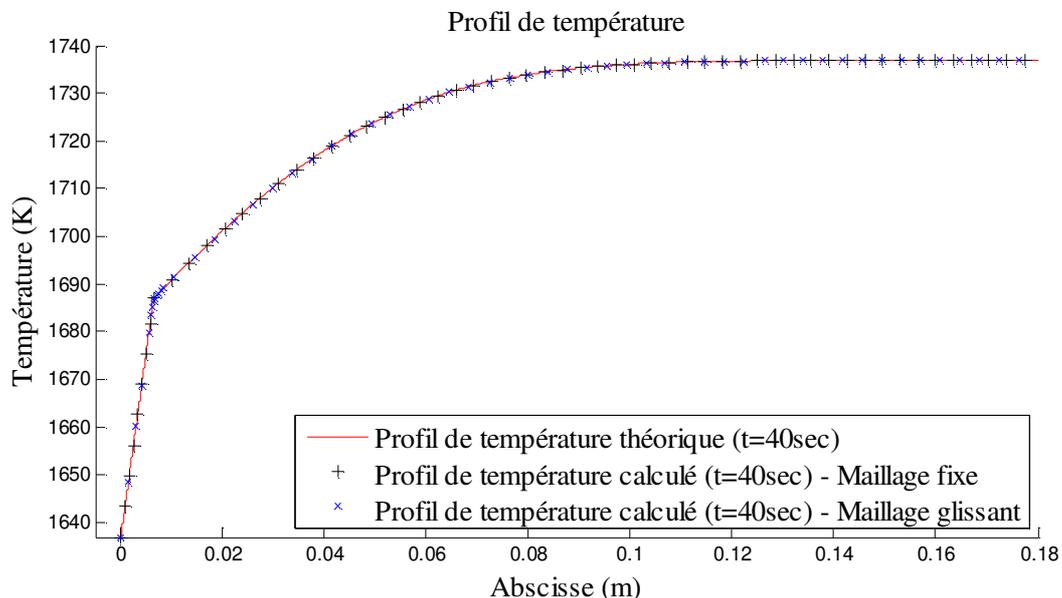


Figure III-3 : Profil longitudinal de température à l'instant $t = 40 \text{ s}$. Le profil de température analytique est tracé en rouge, les profils obtenus avec les modèles « Maillage glissant » et « Maillage fixe » sont représentés par les points respectivement bleus et noirs.

La Figure III-3 présente la comparaison des profils de température : le profil de température est quasi-linéaire dans la partie solide, jusqu'à la rupture de pente au niveau de l'interface. Cette rupture est due au saut de conductivité entre le solide et le liquide. On rappelle que la durée du calcul a été limitée pour conserver un flux nul à l'extrémité droite du domaine. Cette comparaison, qui permet d'étudier la modélisation de la thermique dans ce modèle purement diffusif, est satisfaisante : les

profils obtenus avec les deux approches sont en très bon accord avec la solution analytique, pour l'instant final de la simulation $t = 40$ s. La Figure III-4 présente l'écart relatif entre ces profils et le profil analytique. Les écarts obtenus restent très faibles, pour les deux modèles, malgré un écart légèrement plus élevé dans la partie solide du domaine. La modélisation de la thermique est ainsi validée grâce à ces résultats.

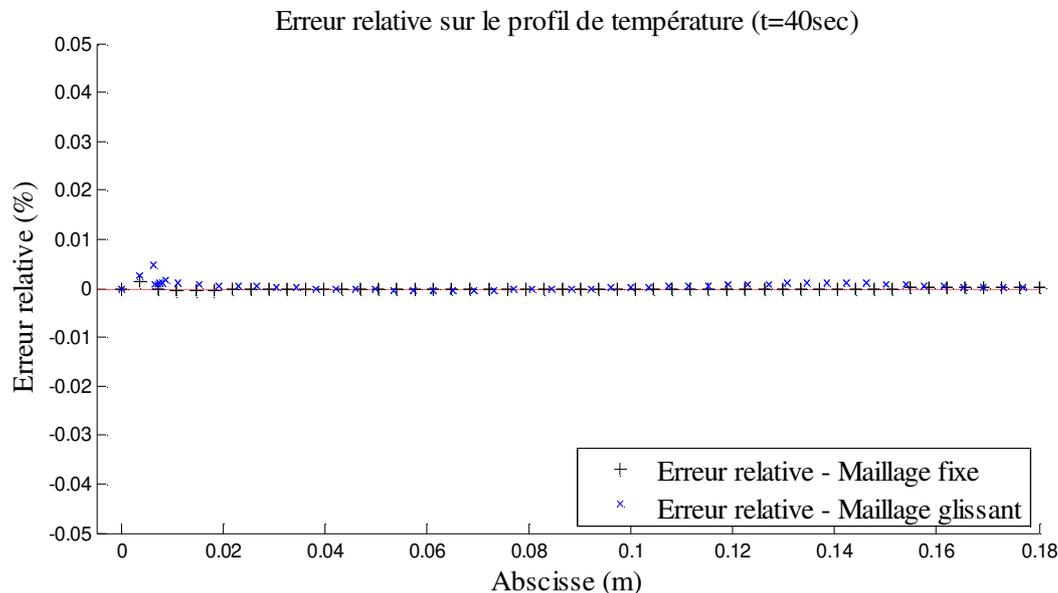


Figure III-4 : Écart relatif sur le profil longitudinal de température à l'instant $t = 40$ s, par rapport à la solution analytique. La droite rouge représente la ligne à 0% d'écart. Les écarts relatifs sur le profil de température obtenus avec les modèles « Maillage glissant » et « Maillage fixe » sont représentés avec les points respectivement bleus et noirs

On peut donc valider les deux modèles présentés, sur les aspects liés à la solidification et à la thermique, grâce à la solution analytique. En revanche, la mise en œuvre de ces deux modèles présente des différences non négligeables en termes de coût de calcul.

Les conditions de calcul, trop variables, ne nous ont pas permis de quantifier précisément le temps de calcul pour les différentes simulations. En effet, le nombre de CPU variable, l'exécution simultanée de plusieurs programmes, etc, ont une influence réelle sur les temps de calcul qui ont été obtenus. On ne peut donc pas comparer directement les temps de calcul, et les indications sur la durée des calculs données par la suite n'ont qu'une valeur indicative. En revanche, pour quantifier et comparer le coût de calcul des différents modèles, on utilisera le nombre total d'itérations numériques réalisées. En effet, les itérations numériques sont des opérations de calcul répétées un certain nombre de fois pour chaque itération temporelle. Ces itérations numériques ont donc un certain coût de calcul, et le nombre total d'itérations numériques qui a été nécessaire pour obtenir une simulation renseigne ainsi de manière quantitative sur le coût de la simulation.

Néanmoins, certains paramètres, tels que la taille ou le nombre de mailles, influent sur la durée nécessaire pour effectuer une itération numérique. Les deux modèles présentés n'ayant pas le même nombre de mailles, et la durée des itérations numériques n'ayant pas été précisément mesurée, il n'est pas possible de comparer précisément, pour ces deux modèles, la durée nécessaire pour effectuer une itération numérique. Le nombre total d'itérations numériques permet donc de comparer de manière quantitative et reproductible le coût de calcul d'une simulation (en terme de nombre d'opérations numériques), bien que ce nombre ne représente que partiellement le coût réel (en terme de durée du calcul).

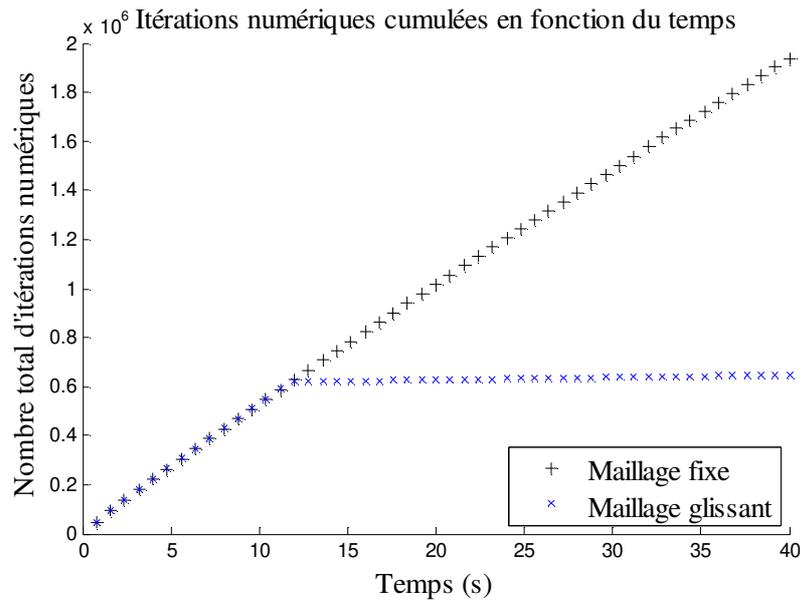


Figure III-5 : Nombre total d'itérations numériques nécessaires pour réaliser la simulation, en fonction du temps physique de la simulation.

Sur la Figure III-5, on peut constater que le modèle « Maillage fixe » a un coût de calcul plutôt linéaire : chaque itération temporelle requiert le même nombre d'itérations numériques pour aboutir, il y a donc une certaine proportionnalité entre le temps simulé et le nombre d'itérations numériques nécessaires pour réaliser cette simulation. On peut également constater que le modèle « Maillage glissant » a un coût de calcul comparable jusqu'à l'instant $t = 11,76$ s. Pour rappel, cette période correspond à la première partie de la simulation, qui est réalisée avec un maillage fixe. En revanche, après l'instant $t = 11,76$ s, la méthode de maillage glissant est mise en place : le modèle « Maillage glissant » requiert bien moins d'itérations numériques par itération temporelle. Cela se traduit par un changement de pente spectaculaire sur la figure pour l'évolution du nombre d'itérations numériques en fonction du temps. On divise en effet le nombre nécessaire d'itérations par pas de temps d'un facteur 47, comme indiquée dans le Tableau III-1.

Modèle	Nombre de mailles	Nombre d'itérations temporelles	Nombre total d'itérations numériques	Ratio moyen Iter.num/Iter.temp	Durée
« Maillage fixe »	1 ^{ère} Partie : 192000 2 ^{nde} Partie : 192000	4000	$1,94 \cdot 10^6$	1 ^{ère} Partie : 524 2 ^{nde} Partie : 468	1 ^{ère} Partie : ~ 9 h 2 ^{nde} Partie : ~ 28 h
« Maillage glissant »	1 ^{ère} Partie : 30480 2 ^{nde} Partie : 27560	4000	$6,48 \cdot 10^5$	1 ^{ère} Partie : 527 2 ^{nde} Partie : 10	1 ^{ère} Partie : ~ 9,5 h 2 ^{nde} Partie : ~ 2 h

Tableau III-1 : Caractéristiques de calcul pour les simulations des modèles « Maillage fixe » et « Maillage glissant ». Les indications « 1^{ère} Partie » et « 2^{nde} Partie » correspondent aux périodes allant respectivement des instants $t = 0$ s à $t = 11,76$ s et des instants $t = 11,76$ s à $t = 40$ s. Le rapport du nombre d'itérations numériques par itération temporelle est noté $\text{Iter.num}/\text{Iter.temp}$.

On constate donc que le coût de calcul des deux modèles est similaire jusqu'à l'instant $t = 11,76$ s, avec un nombre d'itérations numériques par itération temporelle comparable et un temps de calcul indicatif similaire. En revanche, après l'instant $t = 11,76$ s, la méthode de maillage glissant est introduite dans le second modèle, et l'impact sur le coût de calcul est significatif : il faut presque 47 fois moins d'itérations numériques pour réaliser une itération temporelle. La durée du calcul est également significativement plus faible. Cette performance est liée à l'effet prédictif de la méthode de maillage mobile : lors du déplacement du maillage, les champs calculés sont également déplacés avec le maillage. En particulier, les champs de température et de fraction solide sont translatés ; la position

de l'interface solide-liquide l'est donc également. L'interface ainsi déplacée est alors plus proche de sa position finale, et la convergence du calcul requiert dans ce cas moins d'itérations numériques par itération temporelle. La méthode de maillage glissant s'avère donc particulièrement efficace : la simulation est plus rapide.

Dans cette partie, on a donc montré que la méthode de maillage glissant, avec un maillage localement raffiné, donne des résultats de précision comparable à un modèle avec un maillage uniformément raffiné ; ces deux approches sont également validées, pour la thermique et la solidification, par comparaison à une solution analytique. Cette méthode de maillage glissant est ainsi capable de décrire correctement l'évolution transitoire d'un système. On a aussi montré que la méthode de maillage glissant permet de réduire significativement le coût de calcul, en réduisant le nombre d'itérations numériques effectuées. Cette amélioration est liée à l'allègement du nombre de maille, au suivi du front de solidification et surtout à l'effet de prédiction lié au déplacement du maillage. Pour ce cas académique, la mise en place de cette méthode permet d'effectuer le calcul avec près de 47 fois moins d'opérations numériques, ce qui est un gain très significatif.

B. Résultats obtenus pour le cas de Stelian

Le cas de Stefan, présenté en partie précédente, donne une solution de référence dans le cas d'un régime de solidification purement diffusif. En réalité, au cours du procédé de solidification, la phase liquide est souvent affectée par un écoulement convectif, avec une convection naturelle [Kaddeche et al., 1996] ou forcée, par des brasseurs mécaniques [Chatelain, 2016] ou par des champs magnétiques [Stelian et al., 2004 ; Mitric et al., 2006 ; Delannoy and Zaidat, 2012] par exemple. Il est alors nécessaire de valider la capacité du modèle proposé à prendre en compte cet écoulement convectif lors de la solidification. Trouver des cas de référence n'est pas chose aisée : l'idéal est d'avoir une configuration dont on connaît la thermique et pour laquelle on bénéficie de résultats expérimentaux, et qui puisse aussi servir pour la validation du modèle de ségrégation. Pour cela, on considère les travaux de Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003], dans lesquels sont présentés des modèles de solidification et leurs validations par comparaison à des résultats expérimentaux. Ces modèles mettent en œuvre deux domaines distincts pour la phase solide et la phase liquide, simulés par la méthode des éléments finis et qui évoluent grâce à des maillages déformables. Les résultats issus des modèles développés par Stelian seront pris comme solutions numériques de référence : on pourra considérer que le modèle proposé dans cette étude est valide s'il produit des résultats comparables aux résultats obtenus par Stelian.

Le modèle proposé et le modèle de référence n'utilisent pas la même formulation du problème (respectivement avec la méthode des volumes finis avec une formulation enthalpique d'une part et avec la méthode des éléments finis avec une formulation à deux domaines distincts d'autre part). On cherche ainsi à comparer nos résultats avec une référence indépendamment de la formulation respective des modèles étudiés.

Les travaux de Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003] présentent un accord entre son modèle numérique et des points expérimentaux issus des travaux de Barat [Barat et al., 1999]. En revanche, les données numériques de Stelian présentées par la suite, plus récentes, correspondent à un jeu de paramètres différents (vitesse de tirage plus lente notamment). Nos résultats ne pourront donc pas être directement comparés aux travaux de Barat. On pourra néanmoins considérer que la validation est réalisée par transitivité, par comparaison de nos données numériques avec celles de Stelian pour un jeu de paramètres d'une part, et connaissant d'autre part, pour un autre jeu de paramètres, la comparaison des données numériques de Stelian avec les données expérimentales de Barat. Pour le modèle de Stelian, pour le jeu de paramètres présenté, on connaît la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps.

Plusieurs modèles sont mis en place pour étudier ce cas : dans un premier temps on fait varier deux éléments du modèle, le maillage et les paramètres de convergence, afin d'étudier leurs influences sur la solution obtenue. L'appellation « Maillage L » correspond à un modèle qui diffère du modèle présenté en partie précédente (partie II.D) uniquement par le maillage : ce maillage est fixe, c'est-à-

dire sans méthode de maillage glissant, avec 4800 mailles carrées de taille L. Ce cas correspond à un maillage fixe et grossier. De même, l'appellation « Maillage L/4 » correspond à un modèle similaire mais avec 69000 mailles carrées de taille L/4, désignant ainsi un cas avec un maillage fixe et fin. Pour ces modèles, on adapte la valeur du paramètre ε , qui influe sur l'épaisseur de la zone de transition solide/liquide, en fonction du maillage utilisé : on choisit la valeur 1,5 K pour les modèles « Maillage L » et la valeur 0,5 K pour les modèles « Maillage L/4 ». En effet, ces valeurs assurent que la zone de transition a une épaisseur au moins égale à une taille de maille, pour éviter les artefacts numériques. Le raffinement du maillage permet donc de diminuer l'épaisseur de cette zone de transition. On fait également varier les paramètres de convergence numérique du modèle. L'appellation « Convergence simple » correspond aux critères de convergence présentés en partie II.F précédente. Pour rappel, il s'agit notamment d'un critère sur la position de l'interface, noté Res_{int} et égal à 2.10^{-8} , permettant de passer à l'itération temporelle suivante seulement si l'interface a convergé en position, et d'un critère sur le nombre maximum d'itérations numériques au sein d'une itération temporelle, noté $Niter_{max}$ et égal à 20. L'appellation « Convergence avancée » correspond à une modification pour être plus strict sur ces critères de convergence. Ainsi, dans ce cas, les valeurs de Res_{int} et de $Niter_{max}$ sont modifiées pour être respectivement égales à 1.10^{-9} et 100.

Afin d'étudier l'influence du maillage et des critères de convergence sur les résultats, nous comparons au cours du temps la position de référence de l'interface, obtenue d'après les résultats de Stelian en intégrant la vitesse de l'interface, avec l'évolution de la position de l'interface obtenue avec les différents cas présentés. On obtient ainsi la Figure III-6, qui présente l'évolution de la position de l'interface solide/liquide au cours du temps. Sur cette figure, on peut voir que le tirage débute à l'instant initial avec une partie du lingot déjà solidifiée. Le tirage étant piloté grâce à la vitesse de tirage constante, la position de référence au cours du temps présente une allure monotone quasiment linéaire. Trois des courbes numériques ont la même allure quasi-linéaire, tandis que la dernière est plus incurvée. L'interface se déplace d'environ 4 cm en un peu plus de 10 heures, ce qui correspond à la vitesse de tirage de $1 \mu\text{m/s}$.

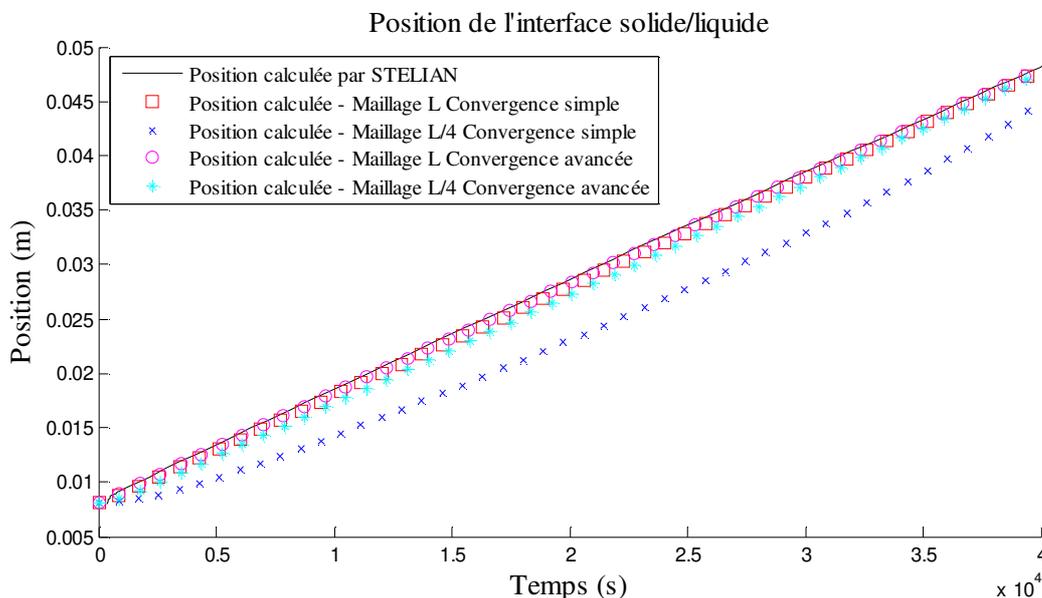


Figure III-6 : Comparaison de la position de l'interface solide/liquide au cours du temps pour quatre cas simulés avec des maillages fixes, fins ou grossiers (respectivement « Maillage L/4 » et « Maillage L ») et avec des critères de convergence plus ou moins stricts (respectivement « Convergence avancée » et « Convergence simple »). La position de référence, issue des résultats de Stelian, est tracée avec la ligne noire.

On obtient donc, d'après la figure ci-dessus, un accord correct pour les données des deux cas de maillage grossier (« Maillage L »), qui respectent bien l'allure quasi-linéaire pour la position au cours du temps. En revanche, le cas de maillage fin en convergence simple, tracé avec les croix bleues

foncées, ne donne pas satisfaction. Comme le cas de maillage fin en convergence avancée est beaucoup plus proche de la solution de référence, on peut donc déduire que la convergence simple avec le maillage fin n'est pas suffisamment stricte. Le critère de convergence simple étant suffisant pour le maillage grossier et insuffisant pour le maillage fin, on peut conclure que le choix des critères de convergence doit être corrélé à la taille des mailles utilisées : plus le maillage est fin, plus la convergence doit être stricte.

La Figure III-7 présente l'écart relatif sur la position de l'interface par rapport à la position de référence, afin de quantifier plus clairement la comparaison des courbes présentées sur la Figure III-6. Pour trois des quatre cas présentés, on observe dans les premiers instants de simulation une augmentation de l'écart, plus ou moins importante en fonction du maillage et de la convergence, suivie d'une diminution progressive et quasi-linéaire de l'écart jusqu'à la fin de la simulation. Pour le dernier cas, l'écart augmente fortement dans les premiers instants de la simulation, puis diminue également, de manière non linéaire, durant la simulation ; l'écart reste néanmoins élevé tout au long de la simulation pour ce dernier cas.

L'écart observé au début de la simulation est lié au transitoire initial du tirage : en effet, dans les premiers instants de la simulation, l'interface solide/liquide se met en mouvement, entraînée par les évolutions des conditions limites en thermique. Ce transitoire initial est plus ou moins bien capturé en fonction des paramètres du modèle, ce qui explique l'écart par rapport à la référence. Pour assurer une meilleure description de ce transitoire, il faudrait par exemple introduire une discrétisation temporelle plus fine pour les premiers instants de la simulation. Pour la position de l'interface, cet écart sur le transitoire initial se traduit par un décalage par rapport à la position de référence, qui resterait constant dans le cas d'un tirage de longueur infinie. Ce décalage par rapport à la référence, qui impacte la position de l'interface tout au long de la simulation, disparaît si on compare les vitesses des interfaces plutôt que les positions des interfaces (voir Figure III-8 et Figure III-9). Dans les cas présentés sur la Figure III-7, le domaine de calcul n'est pas infini : une condition aux limites en température est appliquée sur le bord droit du domaine. Cet effet de bord pour la thermique explique la réduction de l'écart au fur et à mesure de la progression de l'interface vers le bord du domaine.

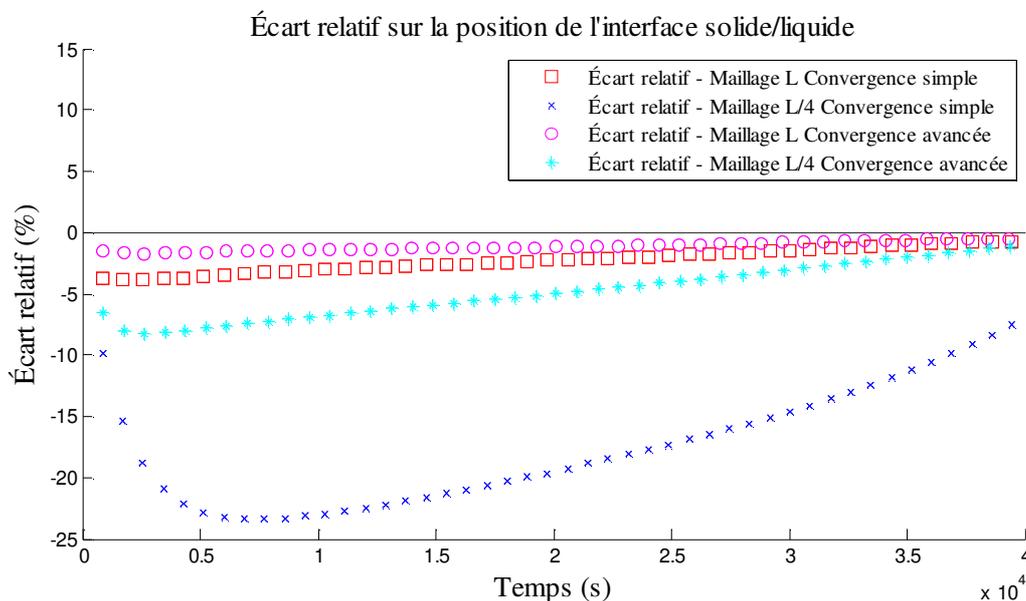


Figure III-7 : Comparaison des écarts relatifs sur la position de l'interface solide/liquide au cours du temps, par rapport à la position calculée par Stelian. Les quatre cas faisant varier les paramètres de taille de maille (maillage fixe) et les critères de convergence sont tracés, avec la légende en accord avec la figure précédente.

On pourra utiliser le principe de validation suivant afin de déterminer si les paramètres choisis pour le modèle sont satisfaisants : si l'utilisation d'un critère plus strict sur le maillage ou sur la convergence ne donne pas un gain significatif sur le résultat, on peut considérer que les paramètres sont bien choisis pour assurer un calcul satisfaisant. Pour les calculs réalisés avec le maillage fin, la

convergence avancée permet d'obtenir des résultats significativement différents par rapport au calcul réalisé avec la convergence simple. La convergence avancée n'est pratiquement pas assez stricte avec le maillage fin ; en assurant une meilleure convergence, on pourrait certainement encore améliorer la courbe correspondante, tracée avec les étoiles bleues claires. En tenant compte de l'effet du transitoire initial, on peut néanmoins considérer que le calcul avec le maillage fin et la convergence avancée donne un résultat acceptable. Pour les calculs réalisés avec le maillage grossier, la convergence avancée permet d'obtenir une légère amélioration seulement de la solution par rapport à la convergence simple. Au vu des valeurs de l'écart pour ces deux calculs, et en tenant compte de l'effet du transitoire initial, ces résultats en convergence simple et en convergence avancée sont suffisamment proches l'un de l'autre pour considérer que la convergence simple est suffisante pour que le modèle avec le maillage grossier donne des résultats satisfaisants. De plus, par comparaison aux données numériques de Stelian, on peut également conclure que le maillage grossier est suffisant pour capturer les phénomènes liés à la thermique et à la solidification dans ce calcul. Ce résultat peu paraître paradoxal, puisque la meilleure simulation n'est pas obtenue avec le maillage le plus fin, mais bien avec la meilleure combinaison entre la finesse du maillage et l'exigence portant sur le critère de convergence. Nous n'avons pas fait de simulation supplémentaire pour le modèle « Maillage L/4 » avec une convergence encore plus stricte, car la durée du calcul devenait trop importante.

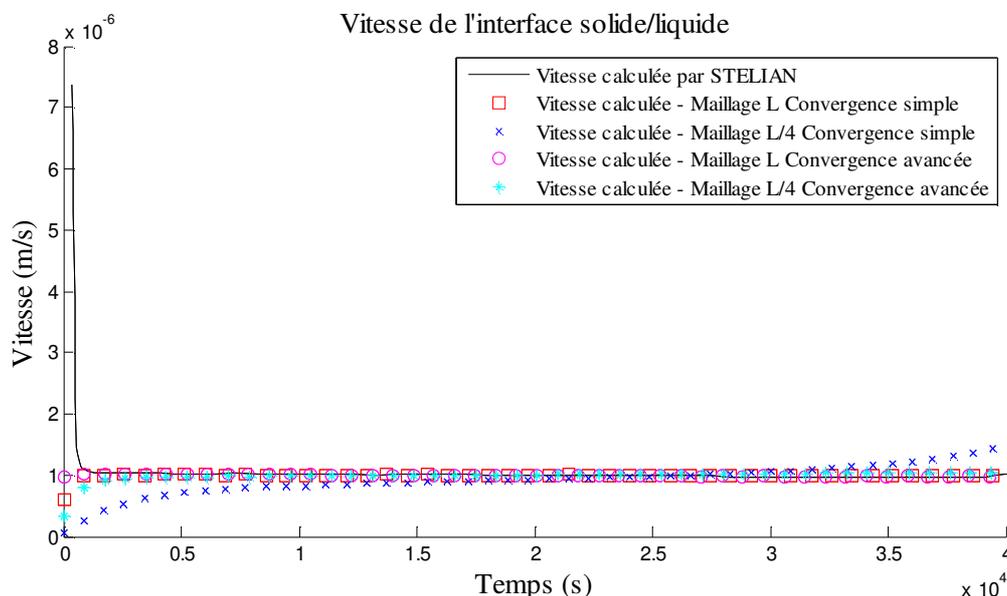


Figure III-8 : Comparaison de la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps pour quatre cas simulés avec des maillages fixes, fin ou grossiers respectivement « Maillage L/4 » et « Maillage L ») et avec des critères de convergence plus ou moins stricts (respectivement « Convergence avancée » et « Convergence simple »). La vitesse d'interface de référence, issue des résultats de Stelian, est tracée avec la ligne noire.

La Figure III-8 présente les vitesses de l'interface au cours du temps, obtenues en dérivant la position par rapport au temps. Cette comparaison permet de s'affranchir du décalage en position éventuellement introduit au début des simulations lors du transitoire initial. On a donc, sur cette figure, la vitesse de référence directement issue des données fournies par Stelian, tracée avec la ligne noire. Cette vitesse, qui semble tendre vers l'infini à l'initialisation du calcul, décroît très rapidement pour prendre une valeur quasiment égale à la vitesse de tirage appliquée par les conditions aux limites en thermique sur l'ensemble du tirage. Les courbes calculées présentent une vitesse nulle à l'initialisation du calcul, qui augmente rapidement pour prendre également une valeur quasiment identique à la vitesse de tirage. Cette différence de comportement à l'initialisation peut provenir des formulations et des méthodes de modélisation, qui ne sont pas les mêmes entre ces deux modèles, et de la condition initiale, qui n'est probablement pas traitée, par conséquent, de manière exactement identique. Cette différence à l'initialisation a finalement peu d'impact sur les vitesses obtenues sur l'ensemble du calcul, et on retrouve un bon accord des données pour trois des cas étudiés, tandis que le dernier cas

présente également des résultats moins satisfaisants. Cette figure permet de confirmer que les deux cas réalisés avec le maillage grossier et que le cas avec le maillage fin et la convergence avancée donnent des résultats satisfaisants, et prouve que l'écart entre leurs positions d'interface observé précédemment est essentiellement dû à l'offset introduit au début du calcul. En effet, la vitesse d'avancée de l'interface, c'est-à-dire la pente des courbes de position, est très comparable pour ces trois cas.

Cette figure permet donc de confirmer la conclusion précédente : le modèle avec maillage grossier et convergence simple permet d'obtenir un résultat satisfaisant. Cette conclusion est établie non seulement par comparaison à la solution de Stelian, prise comme référence, mais aussi par comparaison entre elles des différentes simulations issues du modèle étudié, en cohérence également avec la valeur de la vitesse de tirage constante.

La Figure III-9 présente l'écart relatif sur la vitesse de l'interface solide/liquide par rapport à la vitesse de référence directement issue des données numériques de Stelian. En accord avec la figure précédente, on observe que les trois cas satisfaisants (les deux cas avec maillage grossier et le cas avec maillage fin et convergence avancée) présentent un écart élevé à l'initialisation du calcul, certainement lié à l'application de la condition initiale ; comme l'écart se réduit ensuite très rapidement pour retrouver des gammes de valeurs permettant de valider la comparaison des modèles, l'initialisation n'a donc qu'un faible impact sur la vitesse de l'interface sur l'ensemble du tirage. Le calcul réalisé avec le maillage fin et la convergence simple, en revanche, présente encore une fois un écart important par rapport à la solution de référence et aux autres cas de calcul.

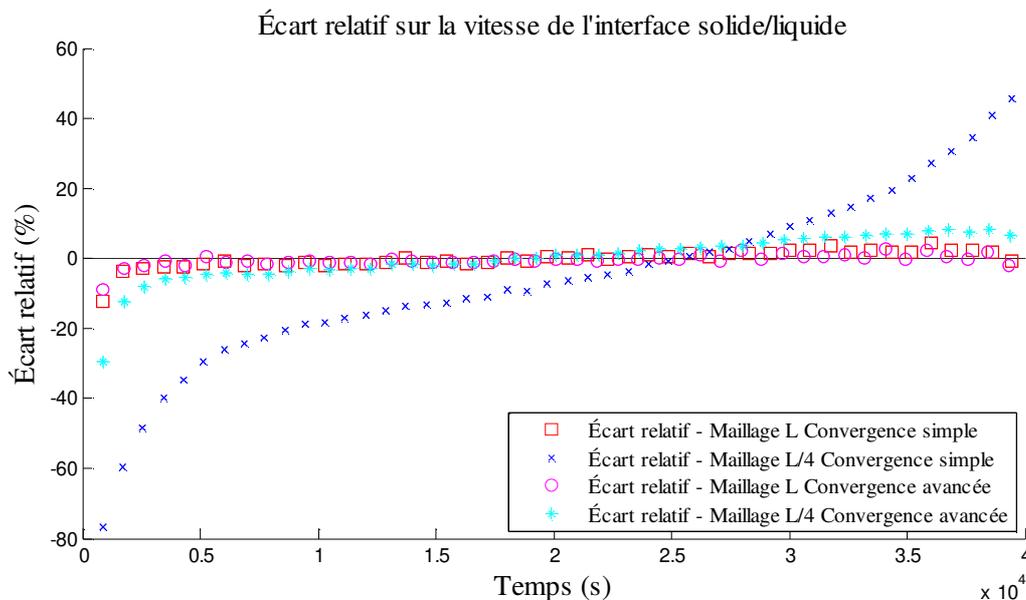


Figure III-9 : Comparaison des écarts relatifs sur la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps, par rapport à la vitesse calculée par Stelian. Les quatre cas faisant varier les paramètres de taille de maille (maillage fixe) et les critères de convergence sont tracés, avec la légende en accord avec la figure précédente.

Pour conclure cette première partie, on a validé le choix des valeurs pour les paramètres du modèle étudié en comparant les résultats avec une solution numérique de référence et en comparant entre eux différents résultats issus du modèle. Le modèle présenté, avec un maillage grossier et une convergence simple, permet donc de décrire correctement les phénomènes liés à la thermique et à la solidification, et en particulier l'évolution de la position et de la vitesse d'avancée de l'interface au cours du temps. Ce cas, réalisé avec un maillage fixe, pourra également servir de solution numérique de référence pour ce modèle, dans le but de déterminer l'influence de l'introduction de la méthode de maillage glissant.

Dans un second temps, on s'intéresse à l'influence de la méthode de maillage glissant et des interpolations de la méthode *Overset Mesh* sur les résultats, par rapport aux résultats obtenus sur le

modèle avec maillage fixe. Pour cela, on conserve le modèle « Maillage L Fixe », décrit précédemment, et utilisant un maillage simple grossier de taille L et non glissant (4800 mailles). On introduit également le modèle « Maillage L Overset Fixe », identique au précédent, si ce n'est qu'il y a deux maillages grossiers de taille L (pour un total de 7600 mailles) : un maillage d'arrière-plan identique à celui du modèle précédent, et un maillage grossier de taille L également, recouvrant une grande partie du domaine, lié au maillage d'arrière-plan par les interpolations de la méthode *Overset Mesh*. Ce maillage *Overset Mesh* n'est pas déplacé au cours du temps, il reste fixe par rapport au domaine de calcul. Il permettra donc d'étudier seulement l'influence des zones de raccordement des maillages sur le résultat, indépendamment de l'effet de maillage glissant. Enfin, le modèle « Maillage L Overset Glissant » est le modèle complet tel qu'il a été présenté en partie II.D, avec un maillage grossier de taille L pour l'ensemble du domaine, et une zone de maillage glissant, recouvrant partiellement ce dernier par la méthode *Overset Mesh*, avec un maillage raffiné de taille L/4 dans la zone de l'interface solide/liquide. Le maillage utilisé pour ce modèle comporte au total 18890 mailles. Ce modèle permettra de déterminer, par comparaison avec le précédent, l'influence de la méthode de maillage mobile sur la solution. Ces trois modèles sont mis en place avec une convergence simple, en accord avec les résultats de l'étude précédente et de manière à s'attendre à une précision raisonnable avec un temps de calcul réduit.

La Figure III-10 présente donc ainsi l'évolution de la position de l'interface au cours du temps, pour les trois modèles étudiés et pour le modèle numérique de Stelian pris comme référence. Sur cette figure, on peut constater que le domaine est initialisé avec une partie solide, et que la position de l'interface évolue de manière quasi-linéaire au cours du temps. Les trois modèles présentent un bon accord entre eux et avec la solution de Stelian.

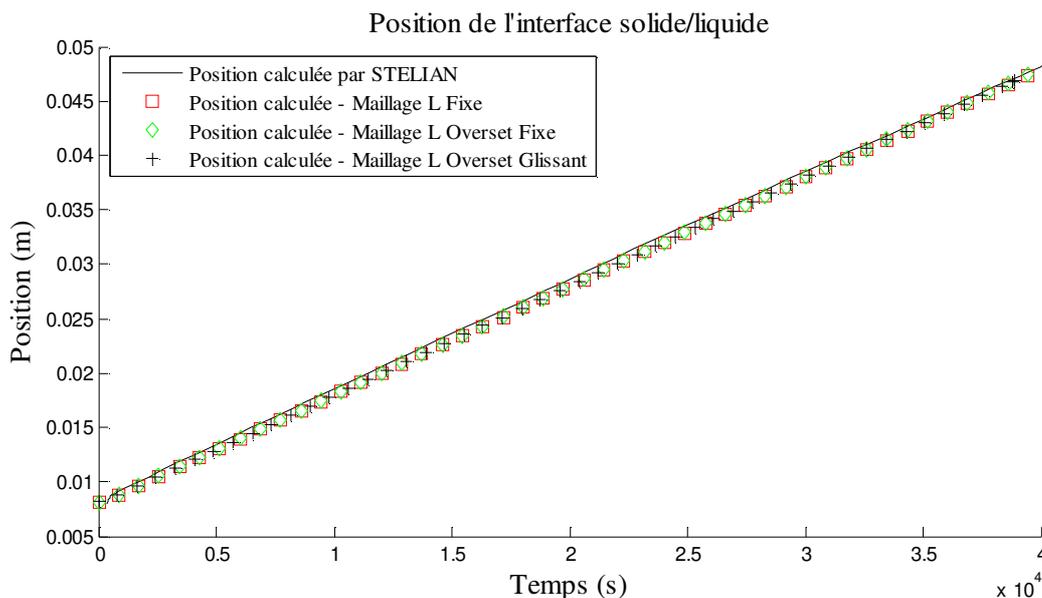


Figure III-10 : Comparaison de la position de l'interface solide/liquide au cours du temps pour trois cas simulés avec un maillage simple fixe, avec un maillage *Overset* fixe, et avec un maillage *Overset* glissant. La solution calculée par Stelian est tracée avec la ligne noire.

On peut ainsi constater que les modèles avec le maillage grossier *Overset* Fixe et avec le maillage grossier simple fixe donnent des résultats quasiment identiques, ce qui confirme le très faible impact des zones de raccordement entre les maillages sur la solution. Les interpolations réalisées pour lier les maillages, selon la méthode *Overset Mesh*, influent donc de manière négligeable sur le résultat obtenu. On peut noter que le modèle *Overset* Glissant est arrêté à 39000 secondes, soit plus tôt que les autres cas : cela correspond au moment où la zone glissante atteint la limite en haut du domaine. Le maillage mobile ne peut donc plus progresser par translation. Afin de poursuivre ce calcul, il faudrait reprendre la simulation avec une nouvelle étape de calcul, durant laquelle la zone de suivi serait immobilisée et le maillage en haut du domaine adapté pour assurer correctement la fin du calcul. Ce

modèle Overset Glissant, par ailleurs, donne des résultats quasiment identiques aux deux autres modèles, on peut donc en tirer deux conclusions : d'une part, la méthode de maillage glissant a également un très faible impact sur la solution obtenue, par rapport à la solution de Stelian, mais aussi par rapport à la solution numérique de référence obtenue avec un maillage fixe pour ce modèle. D'autre part, la convergence simple est suffisante pour obtenir un résultat satisfaisant avec le maillage Overset Glissant, malgré la présence de quelques mailles raffinées dans la zone de suivi de l'interface. Il faut donc, en général, adapter la convergence en fonction de la taille de maille utilisée dans le modèle, comme on l'a établi grâce à l'étude précédente ; toutefois, la présence d'une faible proportion de mailles plus raffinées au voisinage de l'interface ne semble pas nécessiter de changement pour les paramètres de convergence, comme le montre les résultats sur la Figure III-10.

La Figure III-11 présente l'écart relatif de ces différents cas étudiés par rapport à la position de référence, issue des données numériques de Stelian. Comme pour l'étude précédente, on constate une augmentation de l'écart dans les premiers instants de la simulation, liée au transitoire initial qui pourrait être capturé plus finement, suivie d'une réduction de l'écart progressive et quasi-linéaire au cours du temps. Ces trois cas présentent, en tenant compte de l'effet du transitoire, un assez bon accord avec la solution de référence, et présentent surtout un très faible écart entre eux. On peut donc conclure que les interpolations *Overset Mesh* et que la méthode de maillage glissant ne détériorent pas la solution par rapport au calcul avec un maillage simple fixe.

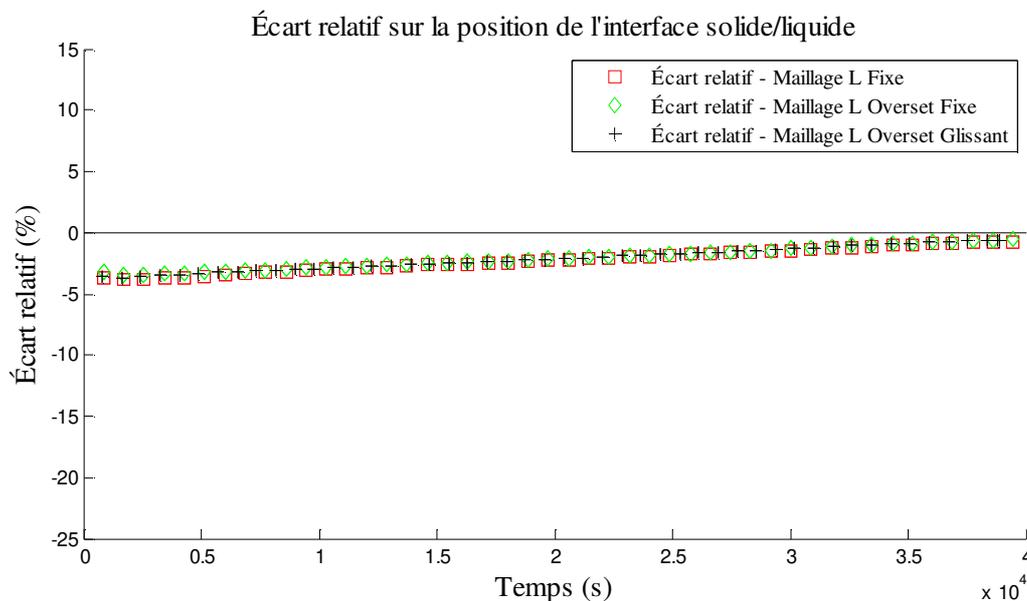


Figure III-11 : Comparaison des écarts relatifs sur la position de l'interface solide/liquide au cours du temps, par rapport à la position de l'interface dans les calculs de Stelian. Les trois cas étudiés sont tracés, avec la légende en accord avec la figure précédente.

Les figures suivantes (Figure III-12 et Figure III-13) présentent respectivement l'évolution de la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps, et l'écart relatif sur cette vitesse par rapport à la solution calculée par Stelian prise comme référence. Comme pour les vitesses présentées en Figure III-8, on observe une différence de comportement entre les modèles étudiés et le modèle de Stelian pour les premiers instants de la simulation, qui s'estompe rapidement au cours du tirage. Sur l'ensemble de la simulation, les trois modèles étudiés donnent un bon accord avec la vitesse calculée par Stelian, en cohérence avec la vitesse de tirage constante tout au long de la simulation. On observe également un écart plus important pour les derniers points de la simulation avec le maillage Overset Glissant : en effet, dans la simulation effectuée, aucune précaution particulière n'a été mise en place pour assurer la fin du calcul. Pourtant, lorsque la zone glissante atteint la limite haute du domaine, la translation du maillage glissant ne peut plus être effectuée normalement, alors que l'interface continue à progresser vers le bord. Le calcul a donc été coupé à ce moment-là ; on pourrait néanmoins envisager d'adapter le modèle afin d'améliorer la fin de la simulation.

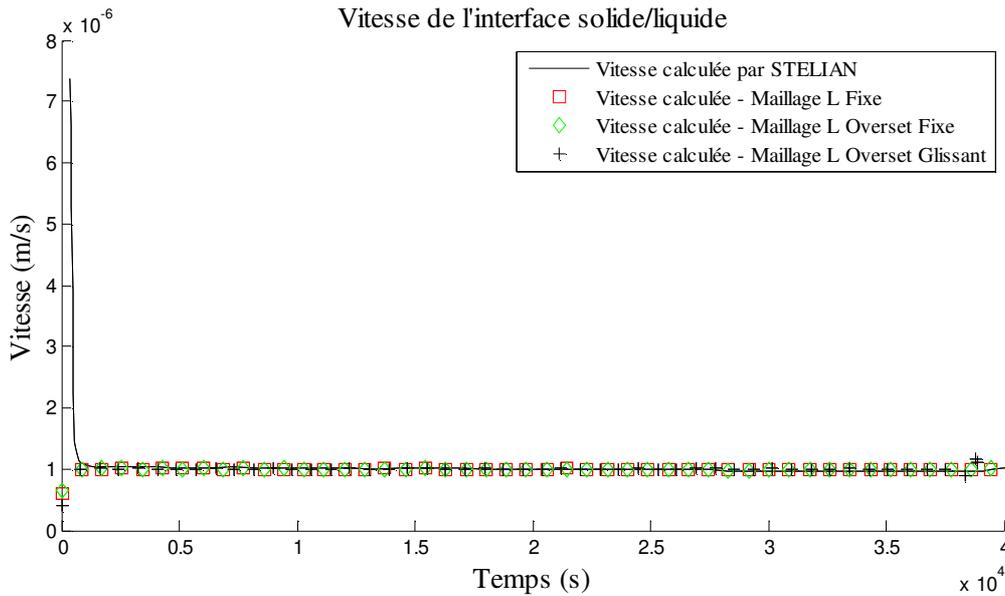


Figure III-12 : Comparaison de la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps pour trois cas simulés avec un maillage simple fixe, avec un maillage Overset fixe, et avec un maillage Overset glissant. La vitesse d'interface de référence, issue des résultats de Stelian, est tracée avec la ligne noire.

La figure suivante, présentant l'écart relatif sur la vitesse de l'interface au cours du temps, permet de confirmer l'analyse et les conclusions de la figure précédente en donnant une quantification de l'écart entre les courbes étudiées.

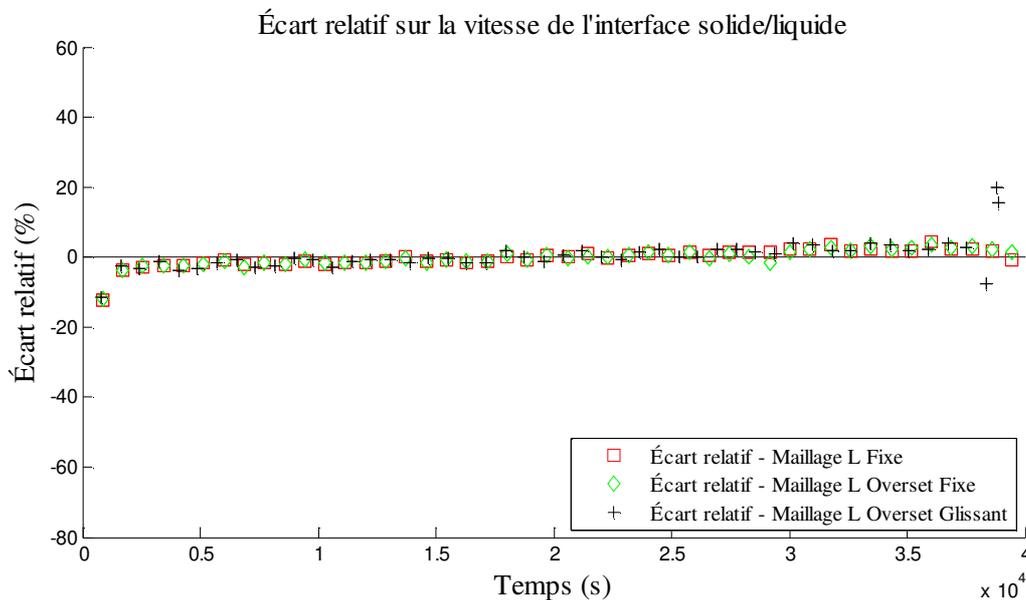


Figure III-13 : Comparaison des écarts relatifs sur la vitesse de l'interface solide/liquide au cours du temps, par rapport à la vitesse de l'interface dans les calculs de Stelian. Les trois cas étudiés sont tracés, avec la légende en accord avec la figure précédente.

Dans cette étude, on a donc validé le faible impact de la méthode *Overset Mesh* appliquée à un maillage glissant sur les résultats obtenus par rapport à la solution obtenue avec un unique maillage fixe. On a également vu précédemment que cette méthode permet d'obtenir un gain sur le coût de calcul dans le cas d'une solidification en régime diffusif pur ; on va donc désormais s'assurer que cette méthode permet aussi d'améliorer les performances de calcul dans ce cas de solidification en régime

convectif. Pour cela, on quantifiera encore les performances de calcul grâce au nombre d'itérations numériques nécessaires pour effectuer la simulation. Le temps de calcul sera également indiqué de manière indicative.

La Figure III-14 présente le nombre total d'itérations numériques nécessaires pour réaliser respectivement les cas présentés dans la première partie de cette étude, avec des maillages fixes, et les cas présentés dans la deuxième partie de cette étude, avec les méthodes originales de maillage pour améliorer les performances de calcul. On a ainsi des relations linéaires entre le temps simulé et le nombre d'itérations numériques effectuées pour tous les cas étudiés, ce qui signifie que chaque instant simulé du tirage a le même coût de calcul que les autres. On constate que les deux calculs réalisés avec le paramètre de convergence avancée coûtent plus cher que les autres cas : la convergence avancée demande environ cinq fois plus d'itérations numériques que la convergence simple pour effectuer la simulation. On constate également que la méthode de maillage glissant demande environ deux fois moins d'itérations numériques que la solution numérique de référence obtenue avec le maillage grossier fixe et la convergence simple. Si l'on s'intéresse à la thermique seulement, on a établi que cette dernière solution était suffisante pour obtenir un résultat correct ; diviser le coût de calcul par deux grâce à la mise en place de la méthode de maillage mobile est un gain positif, mais qui n'est pas très important. En revanche, en considérant que ce modèle sera également utilisé pour la modélisation de la ségrégation des impuretés et du transport d'espèces, et que les échelles spatiales des phénomènes pour la thermique et pour la ségrégation sont très différentes, il faut voir que le maillage grossier ne donne pas une résolution spatiale au voisinage de l'interface solide/liquide suffisante pour capturer correctement le rejet des impuretés à l'interface et la couche limite solutale qui en résulte. Ainsi, pour réaliser correctement la simulation de la ségrégation avec une bonne définition de l'interface à tout instant, et sachant que l'interface balaye l'ensemble du domaine lors du tirage, il faut nécessairement utiliser un unique maillage fixe raffiné en adaptant les paramètres de convergence (cas « Maillage L/4 Fixe Convergence avancée ») ou utiliser le modèle avec la méthode de maillage glissant (« Maillage L Overset Glissant Convergence simple ») qui a néanmoins une zone de suivi de l'interface aussi raffinée que l'autre modèle. Ainsi, en considérant les conditions nécessaires pour réaliser la simulation de la ségrégation, l'utilisation du modèle « Maillage L Overset Glissant Convergence simple » permet de diviser le nombre d'itérations numériques par dix environ, par rapport à l'utilisation du modèle « Maillage L/4 Fixe Convergence avancée ».

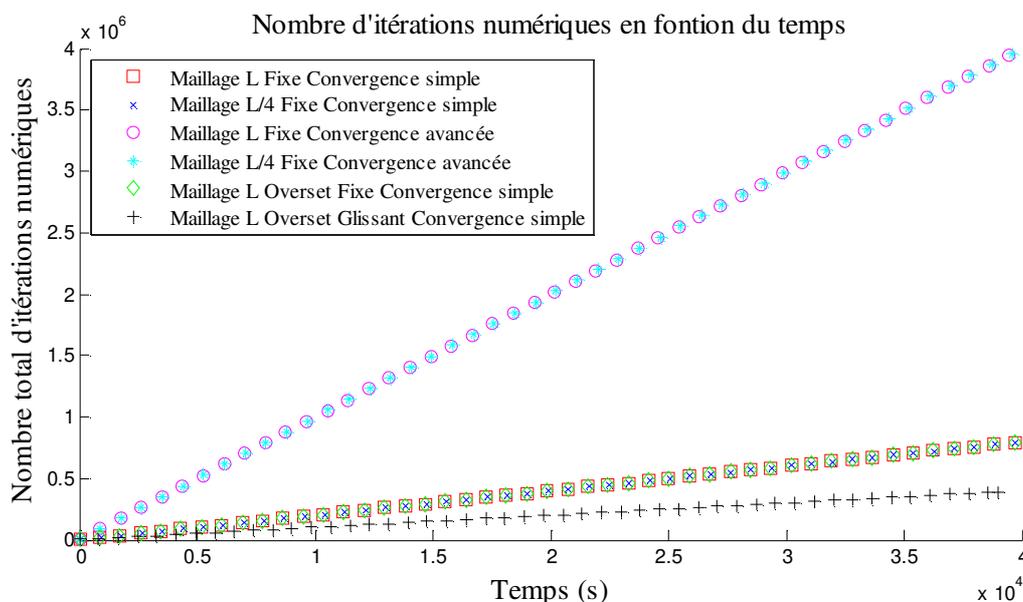


Figure III-14 : Nombre total d'itérations numériques nécessaires pour réaliser la simulation, en fonction du temps physique de la simulation.

Cette amélioration du coût de calcul est significative, et justifie bien l'intérêt de la mise en place de cette méthode de maillage glissant, qui permet une nette amélioration des performances de

calcul. Le Tableau III-2 présente le détail des caractéristiques de calcul de ces modèles, avec une valeur indicative de la durée de calcul.

Modèle	Nombre de mailles	Nombre d'itérations temporelles	Nombre total d'itérations numériques	Ratio moyen Iter.num/Iter.temp	Durée
« Maillage L Fixe Convergence simple »	4800	41000	820000	20	~ 18 h
« Maillage L/4 Fixe Convergence simple »	69000	41000	818371	20	~ 29 h
« Maillage L Fixe Convergence avancée »	4800	41749	4167033	100	~ 97 h
« Maillage L/4 Fixe Convergence avancée »	69000	41806	4180510	100	~ 169 h
« Maillage L Overset Fixe »	7600	41000	820000	20	~ 91 h
« Maillage L Overset Fixe » sans « Temporary Storage Retained »	7600	41000	820000	20	~ 42 h
« Maillage L Overset Glissant »	18890	39000	390000	10	~ 53 h
« Maillage L Overset Glissant » sans « Temporary Storage Retained »	18890	39000	390000	10	~ 18 h

Tableau III-2 : Caractéristiques de calcul pour les simulations des modèles présentés dans cette étude. Le rapport du nombre d'itérations numériques par itération temporelle est noté *Iter.num/Iter.temp*.

On rappelle que les conditions de calcul, trop variables, n'ont pas permis de quantifier précisément la durée des calculs en temps CPU, c'est pourquoi la comparaison est réalisée sur le nombre d'itérations numériques. Toutefois, ce tableau permet de mettre en évidence que la durée du calcul, contrairement au nombre d'itérations numériques, dépend également du nombre de mailles utilisées dans le modèle. Les modèles présentés n'ont pas tous le même nombre de mailles, il faut donc en tenir compte dans cette analyse. Par exemple, les deux modèles avec le maillage fixe et la convergence avancée demandent quasiment le même nombre d'itérations numériques, mais l'un utilisant un maillage grossier et l'autre un maillage fin, la durée nécessaire pour effectuer le calcul est plus longue dans le cas du maillage fin que dans le cas du maillage grossier.

On a montré précédemment que les interpolations *Overset Mesh* et que la méthode de maillage glissant permettent d'obtenir une solution comparable au calcul avec un maillage simple fixe. On a également montré que les interpolations *Overset Mesh* seules ont un faible impact sur le nombre d'itérations numériques nécessaires au calcul (modèle « Maillage L Overset Fixe »), tandis que la méthode de maillage glissant permet d'avoir un calcul plus efficace, avec une réduction du nombre de ces itérations (modèle « Maillage L Overset Glissant »). Ces tendances en termes de nombres d'itérations numériques sont bien présentes dans le Tableau III-2 ; en revanche, on constate que, paradoxalement, la durée indicative du calcul est anormalement élevée pour les deux calculs « Maillage L Overset Fixe » et « Maillage L Overset Glissant ». Pour expliquer cette tendance, il faut considérer l'ensemble des paramètres des modèles présentés : en effet, bien que dans cette partie, on

ne présente que la validation thermique et hydrodynamique des modèles, les simulations présentées ici prennent également en compte la modélisation de la ségrégation, dont l'implémentation et la validation seront discutées dans les parties suivantes. Or, comme on le verra dans ces parties, la modélisation de la ségrégation avec l'*Overset Mesh* et la méthode de maillage glissant nécessite l'activation de l'option « Temporary Storage Retained » du logiciel, qui permet d'accéder à des variables avancées et en particulier aux gradients spatiaux du champ de concentration. Pour les simulations avec un maillage fixe, la modélisation de la ségrégation ne nécessite pas, en revanche, d'activer cette option. L'activation de cette option augmente, en contrepartie, la durée nécessaire pour réaliser les itérations numériques : c'est pourquoi les deux calculs « Maillage L Overset Fixe » et « Maillage L Overset Glissant », respectivement aussi efficace et plus efficace en termes de nombre d'itérations numériques que le modèle équivalent avec un maillage fixe (« Maillage L Fixe Convergence simple »), sont paradoxalement plus long à calculer. Par ailleurs, si on ne s'intéresse pas à la modélisation de la ségrégation, on peut complètement désactiver cette option : les calculs « Maillage L Overset Fixe » et « Maillage L Overset Glissant » sans « Temporary Storage Retained » ont été réalisés dans cette optique afin de pouvoir comparer des temps de calcul indicatifs plus pertinents (voir Tableau III-2). Avec ces calculs (option désactivée), on obtient bien des durées de calcul plus faibles et plus en accord avec les tendances obtenues sur le cas de Stefan.

Toutefois, dans l'optique d'étudier la ségrégation, et malgré le surcoût en termes de durée lié à l'utilisation de cette option « Temporary Storage Retained », la mise en place de la méthode de maillage glissant permet tout de même d'améliorer les performances, en termes de durée et de nombre d'itérations numériques, par rapport au modèle « Maillage L/4 Fixe Convergence avancée ». Or, c'est bien par rapport à ce modèle qu'il faut finalement comparer le modèle « Maillage L Overset Glissant » : en effet, ces deux modèles ont une discrétisation spatiale fine et équivalente dans la zone de l'interface solide/liquide. À discrétisation comparable au voisinage de l'interface, le modèle avec maillage glissant se substitue donc avantageusement au modèle avec maillage fixe et fin.

Après cette étude quantitative des données obtenues pour la progression de l'interface solide/liquide, permettant de valider la thermique, on peut étudier et réaliser une comparaison qualitative des champs de vitesse obtenus. Sur la Figure III-15, on présente la norme de la vitesse et la concentration calculées par Stelian (a), pour une position d'interface solide/liquide déterminée ($x = 2 \text{ cm}$). On présente également la norme de la vitesse, pour la même position de l'interface, obtenue avec différents modèles. La figure (b) est obtenue avec un modèle avec un maillage fixe et fin et avec l'option « Flowstop » (option permettant de figer complètement les vitesses dans la partie solidifiée) : ainsi, ce modèle donne une solution sans écoulement résiduel dans la phase solide. La figure (c) est obtenue avec le modèle « Maillage L Overset Fixe », et la figure (d) est obtenue avec le modèle « Maillage L Overset Glissant ».

On peut noter que pour le cas (b), l'interface solide/liquide atteint la position $x = 2 \text{ cm}$ à l'instant $t = 13000 \text{ s}$, tandis que pour les cas (c) et (d), cette position est atteinte à l'instant $t = 12000 \text{ s}$. Cette différence peut être éclairée par la Figure III-7, qui présente les écarts sur l'avancée de l'interface au cours du temps pour ces modèles. On a vu que le modèle avec maillage fixe et fin accumule un léger retard dans l'avancée de l'interface au cours du transitoire initial, même avec les critères de convergence avancée. C'est ce retard, qui pourrait être compensé par une meilleure résolution temporelle du transitoire initial, qui est à l'origine de ce décalage temporel entre les modèles pour une position d'interface donnée. Les données présentées montrent que la structure de l'écoulement est identique pour chacun des modèles présentés. La valeur maximale de la norme de la vitesse varie toutefois d'un modèle à l'autre, tout en restant à chaque fois dans le même ordre de grandeur. On notera que dans le cas du modèle avec l'option « Flowstop », la distribution des vitesses et l'absence de l'écoulement résiduel dans le solide conduit à l'obtention d'une interface solide/liquide un peu plus courbée qu'avec les autres modèles, ce qui donne un écoulement un peu plus intense et une norme de la vitesse maximale un peu plus importante que la solution calculée par Stelian. Pour le modèle avec le maillage glissant (c), la présence de l'écoulement résiduel dans la phase solide donne une interface moins courbée et une norme de la vitesse maximale un peu moins importante que la solution calculée par Stelian. Dans le cas de la figure (b), obtenue avec un maillage grossier, la zone de transition entre la phase solide et la phase liquide est plus étalée, par rapport aux modèles avec un maillage fin à l'interface. En effet, bien qu'on cherche à limiter au maximum la taille de cette zone,

elle doit être au moins d'une taille de maille pour assurer le bon comportement numérique du modèle. Ainsi, le paramètre ε (voir Équations (II-2) et (II-3)), qui permet de régler la taille de cette zone de transition, est plus élevé ($\varepsilon = 1,5$) dans les modèles avec maillage grossier à l'interface que dans les modèles avec maillage fin à l'interface ($\varepsilon = 0,5$). L'étalement de cette zone de transition a un impact sur la distribution de vitesse et sur la courbure de l'interface, et diminue l'intensité de l'écoulement et la norme de la vitesse maximale, par rapport aux modèles avec maillage fin à l'interface. Toutefois, le champ de vitesse obtenu est cohérent et donne une approximation très satisfaisante pour la solution.

Cette comparaison qualitative des champs permet bien de valider que les champs de vitesse obtenus pour les différents modèles sont satisfaisants. Cette comparaison met toutefois en évidence l'intérêt de raffiner le maillage à l'interface solide/liquide pour obtenir une meilleure définition de l'interface, qui impacte elle-même la précision obtenue sur l'écoulement dans la phase liquide.

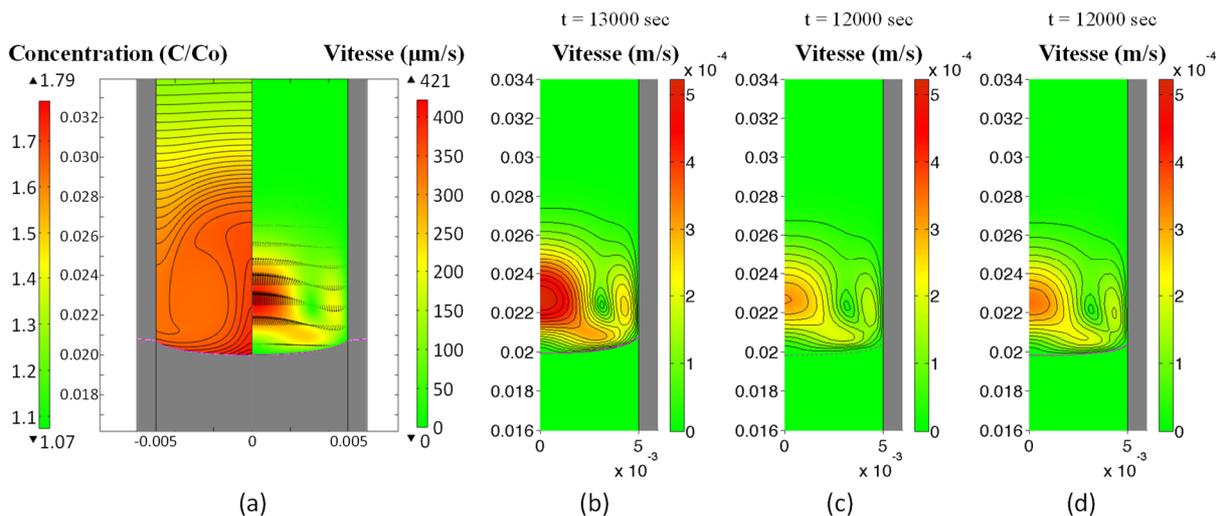


Figure III-15 : La figure (a) présente les champs de concentration et de la norme de la vitesse dans la phase liquide obtenus par Stelian lorsque l'interface solide/liquide est située à $x = 2$ cm. Les figures (b), (c) et (d) présentent la norme de la vitesse calculée respectivement pour les cas « Maillage L/4 Fixe Convergence Avancée » avec « Flowstop », « Maillage L Fixe Overset Fixe Convergence Simple » et « Maillage L Overset Glissant Convergence Simple », lorsque l'interface solide/liquide est à $x = 2$ cm. Les figures (a), (b), (c) et (d) sont tracées avec la même échelle.

Pour conclure dans cette partie, on a voulu valider, pour la thermique et l'hydrodynamique, les résultats issus du modèle présenté au Chapitre II, qui utilise une méthode originale de maillage glissant. Pour réaliser cette validation, on a comparé plusieurs déclinaisons de ce modèle, en faisant varier des paramètres tels que le maillage ou les critères de convergence, avec deux cas de référence : le cas de Stefan, un cas académique de solidification en régime purement diffusif avec une solution analytique pour la position de l'interface et pour le profil de température, et le modèle de Stelian [Stelian et al., 2001 ; Stelian et al., 2003], un modèle numérique par éléments finis, développé pour une solidification dirigée réalisée dans un four Bridgman en présence de convection naturelle, appelé par commodité dans cette étude « cas de Stelian ». Ces comparaisons permettent bien de valider les résultats en thermique et en solidification en régime diffusif pur, par un très bon accord à la solution analytique, et en régime convectif, par un bon accord avec les données de Stelian et par une comparaison avec des modèles à maillages fixes. La comparaison du nombre d'itérations numériques nécessaires pour réaliser ces simulations permettent de constater que l'utilisation de la méthode de maillage mobile améliore significativement les performances de calcul dans le cas de Stefan, et permet d'améliorer également de manière non négligeable les performances de calcul dans le cas de Stelian, d'autant plus si l'on considère la discrétisation spatiale au niveau de l'interface nécessaire à la modélisation de la ségrégation. Dans la partie suivante, on présentera comment la modélisation de la ségrégation des impuretés et du transport d'espèces est ajoutée dans ce modèle avec maillage glissant.

Chapitre IV.

Modélisation de la ségrégation

A. Équation de transport d'espèces

Afin de modéliser le rejet et le transport d'espèces pour les impuretés au cours du procédé de solidification, les équations de la modélisation thermique et l'hydrodynamique sont complétées avec une équation de transport d'espèces. Cette équation, présentée ci-après, introduit un couplage faible avec les équations précédentes : elle correspond à l'introduction d'un scalaire passif dans le modèle. L'équation de transport d'espèces s'écrit de la manière suivante [CD-adapco and Siemens, 2016] :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho\phi(\vec{v} - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (\rho D \vec{\nabla} \phi) + S, \quad (IV-1)$$

avec ρ la masse volumique, ϕ la fraction massique du scalaire passif (impuretés), \vec{v} la vitesse du fluide, \vec{v}_g la vitesse de grille, D la diffusivité du scalaire passif, et S un terme source. On rappelle que la vitesse \vec{v} , dans cette équation, peut être nulle : en effet, le champ de vitesse est freiné par le terme de Darcy dans la partie solidifiée (voir Équation (II-11)). En accord avec la modélisation établie en partie II.A, la masse volumique est considérée comme une constante, dont la valeur est égale ρ_l la masse volumique de la phase liquide. Pour cette modélisation de la ségrégation (approche enthalpique avec une méthode VOF), on considère que les impuretés dans la phase liquide et les impuretés dans la phase solide sont respectivement représentées par deux champs distincts, chacun définis sur l'ensemble du domaine de calcul [Voller et al., 1989]. Ces champs seront ensuite pondérés grâce au champ de fraction solide, qui permet de déterminer l'état (liquide ou solide) du matériau, afin de déterminer la concentration en impuretés dans le matériau. On choisit, pour cette modélisation, de s'intéresser principalement au transport des impuretés dans la phase liquide. On résout donc l'équation (IV-1) pour calculer le champ des impuretés dans la phase liquide. On en déduit directement le champ des impuretés dans la phase solide, puis la concentration moyenne des impuretés dans le matériau.

Ainsi, grâce à la résolution de l'équation (IV-1), on obtient la concentration massique C_l dans la phase liquide grâce à l'expression suivante :

$$C_l = \rho\phi. \quad (IV-2)$$

Pour résoudre cette équation, on ajoute au modèle présenté en partie II.D des conditions limites aux parois, de manière à imposer aux parois un flux nul pour le scalaire considéré. On ajoute également une condition initiale : le champ de fraction massique initial ϕ_0 pour les impuretés est uniforme à l'instant initial, avec une valeur arbitraire telle que :

$$\phi_0 = 1 \%. \quad (IV-3)$$

On peut donc définir la concentration massique initiale C_0 , telle que :

$$C_0 = \rho\phi_0. \quad (IV-4)$$

On déduit alors, à partir des quantités précédentes, le champ de concentration en impuretés normalisée dans la phase liquide. Grâce au coefficient de partage k permettant de lier à l'interface les concentrations en impuretés des phases solide et liquide, on en déduit également le champ de concentration en impuretés normalisée dans la phase solide. Enfin, grâce au champ de fraction solide α et à ces concentrations normalisées déterminées dans les phases solide et liquide, on en déduit la concentration moyenne en impuretés normalisée pour l'ensemble du domaine de calcul [Boussaa, 2014]. Ces champs normalisés, dont les expressions sont présentées ci-dessous, seront utilisés pour présenter les résultats obtenus dans la suite de cette étude :

$$\frac{C_l}{C_0} = \frac{\rho\phi}{\rho\phi_0}, \quad (IV-5)$$

$$\frac{C_s}{C_o} = k \frac{C_l}{C_o}, \quad (IV-6)$$

$$\frac{\langle C \rangle}{C_o} = \alpha \frac{C_s}{C_o} + (1 - \alpha) \frac{C_l}{C_o}, \quad (IV-7)$$

avec C_s la concentration massique dans la phase solidifiée et $\langle C \rangle$ la concentration massique moyenne en impuretés. La concentration $\langle C \rangle$ est calculée comme la moyenne des concentrations massiques correspondant aux phases solide et liquide, pondérées par la fraction solide (voir Équation (IV-7)). Ainsi, une maille complètement liquide aura une concentration $\langle C \rangle = C_l$, une maille complètement solide aura une concentration $\langle C \rangle = C_s$, et une maille en cours de solidification aura une concentration $\langle C \rangle = \alpha C_s + (1 - \alpha) C_l$ dépendant de sa fraction solide.

Les phases solide et liquide ne sont donc distinguées que par la valeur du champ de fraction solide α , qui renseigne sur l'état du matériau dans chaque maille. La masse volumique des phases solide et liquide est supposée identique et égale à ρ_l , la masse volumique de la phase liquide. Pour tenir compte, en revanche, du fait que la diffusivité des impuretés dans la phase solide est bien plus faible que la diffusivité des impuretés dans la phase liquide, on utilise une diffusivité variable en fonction de la fraction solide α . Ainsi, on définit la diffusivité D , introduite dans l'équation (IV-1), de la manière suivante :

$$D = (1 - \alpha). D_l + \alpha. D_s, \quad (IV-8)$$

avec D_l la valeur de la diffusivité des impuretés dans la phase liquide, et D_s la valeur de la diffusivité des impuretés dans la phase solide. Dans les mailles complètement solides et dans les mailles complètement liquides, pour lesquelles la fraction solide α est respectivement égale à 1 ou 0, la diffusivité vaudra donc respectivement D_s ou D_l . Dans un matériau donné, les valeurs de D_s et de D_l dépendent de l'impureté considérée ; dans le cadre de cette étude, la valeur de D_s est bien inférieure à la valeur de D_l , ce qui implique que la diffusion des impuretés dans la partie solide est bien plus faible que dans la partie liquide.

B. Rejet de soluté à l'interface

Dans les modèles étudiés ici, on considère que la température de fusion T_f ne varie pas significativement en fonction de la concentration. On peut alors assimiler T_f à T_{f_0} quelle que soit la concentration, comme illustré sur le diagramme des phases ci-dessous (voir Figure IV-1). Cette assimilation revient à découpler la thermique de la ségrégation : d'une part, pour la thermique, on considère que l'interface est diffuse et que la solidification a lieu entre les températures $T_f + \varepsilon$ et $T_f - \varepsilon$, et d'autre part, pour la ségrégation, on considère que la solidification a lieu à la température T_f , qui est constante et égale à T_{f_0} . Ainsi, à l'interface, à la température $T_f = T_{f_0}$, la concentration dans le solide C_s pourra être directement déduite de la concentration dans le liquide C_l grâce à la relation (I-3).

Par ailleurs, au cours de la solidification, l'interface solide/liquide est le lieu d'un rejet d'impuretés de la phase solide vers la phase liquide, en raison de la différence de concentration dans le solide et dans le liquide à l'interface. Dans le cas d'une interface lisse formant une paroi parfaitement définie entre deux domaines distincts, l'un solide et l'autre liquide, et en considérant la conservation de la matière pour les impuretés, un bilan de masse à l'interface permet d'obtenir la condition aux limites suivante [Boutet, 1999] :

$$D_l \vec{\nabla} C_l \cdot \vec{n} = -(C_l - C_s) \overrightarrow{V}_{int} \cdot \vec{n}, \quad (IV-9)$$

avec C_l la concentration en soluté dans la phase liquide, C_s la concentration en soluté dans la phase solide (obtenue à l'interface à l'aide du coefficient de partage k grâce à la relation (I-3)), D_l la

diffusivité de la phase liquide, \overline{V}_{int} la vitesse de l'interface et \vec{n} la normale à l'interface. Cette condition aux limites en flux, qui est appliquée à l'interface solide/liquide, traduit le flux de masse en soluté ajouté vers la phase liquide.

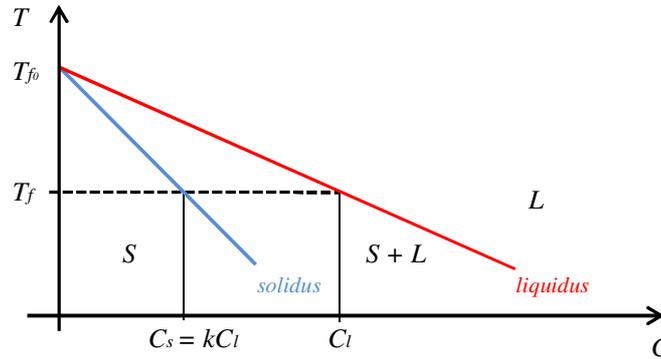


Figure IV-1 : Schématisation du diagramme des phases utilisé pour les modèles étudiés. Les symboles « S », « S+L » et « L » désignent respectivement les domaines « Solide », « Solide + Liquide » et « Liquide ». Pour une concentration C_l donnée, la concentration C_s correspondante est obtenue grâce aux droites du liquidus et du solidus.

On peut s'appuyer sur cette formulation du problème et sur cette condition aux limites seulement si les phases solide et liquide sont associées à des domaines distincts, séparés par une interface parfaitement définie. On est alors en présence d'un problème à interface libre : il s'agit d'appliquer cette condition aux limites en flux sur l'interface solide/liquide, dont la position change au cours du processus de solidification. Or, la méthode enthalpique utilisée dans cette étude ne permet pas de s'appuyer sur une telle formulation : en effet, les phases solides et liquides coexistent au sein du même domaine et l'interface solide/liquide, qui est diffuse dans notre cas, ne permet pas l'application d'une telle condition aux limites en flux sur l'interface [Avnaim et al., 2016]. Afin de modéliser le rejet de soluté, on utilisera donc plutôt un terme source.

1) Méthode enthalpique

La méthode enthalpique a initialement été développée pour les cas où une zone pâteuse est présente [Voller et al., 1989] : les phases solide et liquide sont associées à un seul et unique domaine, et une variable, appelée fraction solide et variant entre 0 et 1, permet de définir les phases solide et liquide. Ainsi, avec cette approche, on est en présence d'une interface diffuse et, par conséquent, la condition aux limites en flux de soluté présentée ci-avant n'est pas directement applicable. Contrairement au problème thermique de solidification avec rejet de chaleur latente, le problème en concentration avec rejet de soluté n'existe pas dans les modèles natifs de Star-CCM+.

Afin de modéliser avec une approche enthalpique le rejet de soluté ayant lieu à l'interface lors de la solidification, on propose d'introduire un terme source de soluté, localisé à l'interface, pour remplacer la condition aux limites en flux de soluté. Ce terme est défini comme une quantité de matière par unité de temps et de volume, et constitue un terme source volumique dans l'équation de transport d'espèces utilisée (voir Équation (IV-1)).

Nous avons, dans un premier temps, défini le terme source de soluté, noté S, de la manière suivante :

$$S = \underbrace{\left[(\alpha - \alpha_{begin}) \right]}_A + \underbrace{\left[\left(F_{int} \cdot \frac{d}{L} \right) \right]}_B \cdot C_{l_{int}} \cdot \frac{(1-k)}{\Delta t} + \underbrace{G_{C_l} \cdot \frac{d}{\Delta t}}_C, \quad (IV-10)$$

avec α le champ de fraction solide (calculé au cours des itérations numériques), α_{begin} le champ de fraction solide évalué avant la première itération numérique, F_{int} la fonction filtre permettant de sélectionner les mailles contenant l'interface solide/liquide, d le déplacement du maillage dans la direction du tirage, L la taille de maille, $C_{l_{int}}$ la valeur du champ de concentration de la phase liquide interpolée et évaluée à l'interface solide/liquide, k le coefficient de partage, Δt le pas de temps et G_{C_l} le gradient spatial du champ de concentration de la phase liquide dans la direction du tirage. La définition de ces variables sera détaillée dans la suite de cette partie.

Ce terme source peut être scindé en plusieurs parties : un terme A de rejet de soluté engendré par le changement de phase et deux termes de correction du rejet liés à la translation du maillage : un terme B correspondant à la correction de la translation du champ de fraction solide et un terme C correspondant à la correction de la translation du champ de concentration de la phase liquide (la formulation de ces termes sera détaillée dans la partie IV.B.3). Par la suite, on verra que le terme C peut être multiplié par $(\alpha \cdot (k - 1))$ pour obtenir une forme plus proche de l'équation (V-20). On a pu vérifier que cette modification n'a toutefois qu'un faible impact sur les résultats. Par ailleurs, on a aussi pu vérifier, par comparaison avec des résultats obtenus avec des termes de l'équation (V-20), que le terme source tel qu'il est proposé à l'équation (IV-10) est une bonne modélisation et approximation des termes de l'équation (V-20).

Avant de présenter plus précisément la définition de ce terme source et des variables qui le composent, il est judicieux de rappeler le processus de calcul utilisé pour résoudre les équations avec ce logiciel. De manière générale, le calcul se décompose en une suite d'itérations temporelles (chacune de ces itérations correspond à un pas de temps), qui contiennent chacune plusieurs itérations numériques. Ces itérations numériques permettent de résoudre les équations présentées de manière itérative, pour chaque pas de temps de la simulation, jusqu'à ce que les critères de convergence soient atteints. Dans le cas des simulations présentées ici, un certain nombre d'opérations nécessaires au calcul des variables qui composent le terme source S ne peuvent pas être réalisées nativement au sein du logiciel Star-CCM+. Afin de compléter les calculs, on a donc développé une macro correspondant à une séquence externe d'opérations codée en langage Java, qui sera détaillée en Figure IV-3. Cette macro Java complète les opérations réalisées au sein du logiciel de simulation, et les résultats issus de son exécution sont réintégrés dans le processus de calcul à chaque itération temporelle.

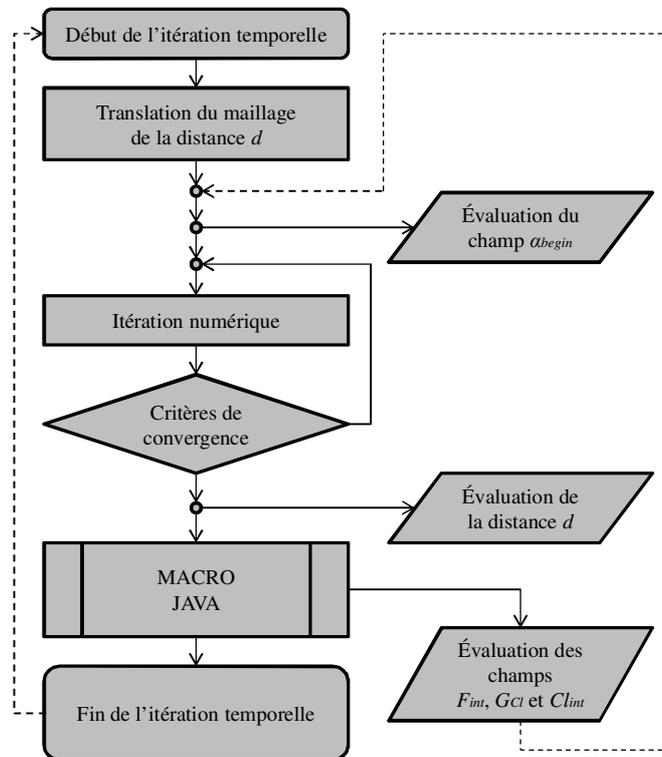


Figure IV-2 : Présentation des différentes étapes composant une itération temporelle. Cet organigramme présente la séquence qui effectue l'évaluation des variables du calcul, les itérations

numériques pour la résolution des équations, et l'appel de la macro Java développée pour le calcul du terme source. Cette séquence est exécutée, au cours de la simulation, pour chaque pas de temps. Le détail des actions effectuées par la macro Java est donné dans la Figure IV-3.

Le processus de calcul ainsi développé pour les simulations de cette étude est présenté plus précisément sur la Figure IV-2. Cette figure illustre le déroulé d'une itération temporelle : le maillage est d'abord translaté d'une distance d , qui est égale à l'avancée de l'interface solide/liquide lors de l'itération temporelle précédente (voir partie IV.B.3). On introduit ensuite les valeurs des champs F_{int} , G_{Cl} et $C_{l_{int}}$, issues de l'exécution de la macro Java lors de l'itération temporelle précédente. Le champ de fraction solide α est alors extrait et exporté avant le début des itérations numériques : ce champ sauvegardé à chaque itération temporelle est noté α_{begin} , et servira à comparer les champs de fraction solide avant et après la réalisation des itérations numériques. Ensuite, les itérations numériques s'effectuent afin de résoudre numériquement et de manière itérative les équations du problème, jusqu'à ce que les critères de convergence soient atteints. L'avancée totale de l'interface (c'est à dire le déplacement par translation du maillage et le déplacement lié à la résolution des équations) au cours de cette itération temporelle est alors évaluée et stockée pour devenir la nouvelle valeur de la distance d . Cette valeur servira pour la translation du maillage de l'itération temporelle suivante. Enfin, la macro Java est exécutée, de manière externe, afin de calculer les champs F_{int} , G_{Cl} et $C_{l_{int}}$ selon la méthode qui sera détaillée dans cette partie. Ces champs, qui interviennent dans le calcul du terme source pour corriger l'effet de translation du maillage, seront utilisés à l'itération temporelle suivante, après la translation du maillage. Après toutes ces étapes, l'itération temporelle se termine et le cycle recommence, jusqu'à la fin de la simulation.

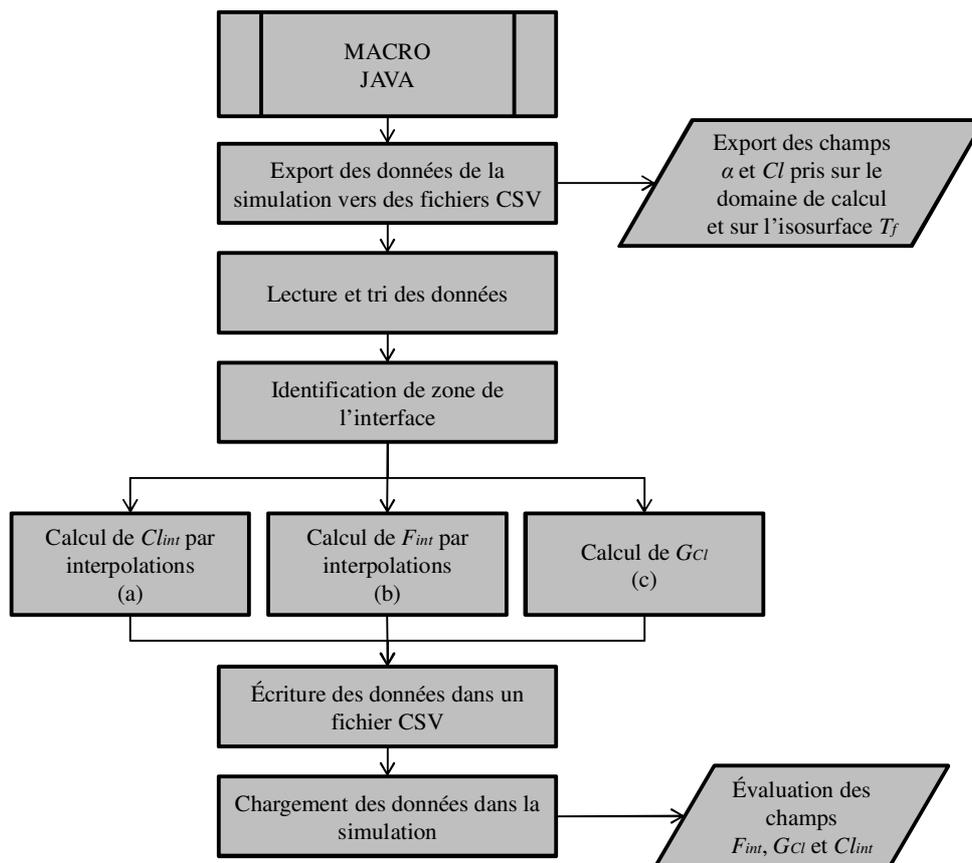


Figure IV-3 : Cet organigramme présente les étapes composant la macro Java, développée pour externaliser une partie du calcul qui ne peut pas être réalisée au sein du logiciel Star-CCM+. Cette séquence s'insère dans le processus de calcul, comme illustré dans la Figure IV-2. Les calculs des trois champs $C_{l_{int}}$, F_{int} et G_{Cl} sont réalisés de manière indépendante, comme illustré par les blocs (a), (b) et (c). La méthode utilisée pour ces calculs sera présentée dans la suite de cette partie.

Lors de l'exécution de cette macro Java, les champs de fraction solide α et de concentration massique dans la phase liquide C_l sont d'abord extraits de la simulation et les valeurs sont écrites dans des fichiers externes. Ces champs sont évalués et extraits sur le domaine de calcul maillé, ainsi que sur l'isosurface de température T_f , qui forme l'interface solide/liquide. Ces fichiers externes sont ensuite parcourus et triés afin de réordonner les données et de faciliter leur traitement. La zone contenant l'interface, maillée de manière structurée (voir Figure II-9) est ensuite identifiée, afin d'effectuer les opérations suivantes dans cette zone. Ensuite, trois calculs sont réalisés de manière distincte. D'une part, grâce à des interpolations, les valeurs de concentration dans la phase liquide prises sur l'interface solide/liquide sont associées à des colonnes du maillage afin de construire le champ $C_{l_{int}}$ (voir partie IV.B.2). Cette opération est réalisée dans le bloc (a) sur la Figure IV-3. D'autre part, la fonction filtre F_{int} est construite, en utilisant des interpolations également, de manière à sélectionner une unique maille par colonne du maillage : celle qui contient l'interface repérée par l'isosurface (voir partie IV.B.3). Enfin, le calcul de G_{C_l} , le gradient spatial de concentration dans la phase liquide dans la direction du tirage, est calculé pour chaque colonne du maillage (voir partie IV.B.3). Ces opérations sont réalisées respectivement dans les blocs (b) et (c) sur la Figure IV-3. Une fois que ces champs ont été calculés, les données sont écrites dans de nouveaux fichiers, qui sont ensuite lus par le logiciel Star-CCM+. Ces données sont ensuite intégrées dans la simulation, pour être utilisées selon le processus de calcul décrit en Figure IV-2.

En étudiant l'expression du terme source S (Équation (IV-10)), on peut distinguer le cas d'une simulation avec un maillage mobile, qui met en œuvre ce terme source dans son intégralité, et le cas d'une simulation avec un maillage fixe, pour lequel les termes B et C de correction du rejet de soluté s'annulent, simplifiant ainsi son expression. En effet, dans le cas d'un maillage fixe, la distance d , utilisée pour la translation du maillage, est nulle tout au long de la simulation. C'est pourquoi, afin de présenter la procédure de calcul par étapes, on détaille ci-dessous dans un premier temps le terme source appliqué à un cas avec maillage fixe, puis dans un second temps, un cas avec maillage mobile.

2) Cas d'une simulation avec maillage fixe

Dans le cas d'une simulation avec un maillage fixe, la position du maillage ne varie pas au cours du temps. Par conséquent, la distance de déplacement du maillage dans la direction du tirage, notée d , est nulle, ce qui implique que les termes B et C du terme source S (Équation (IV-10)) s'annulent. On a donc l'expression suivante pour le terme source :

$$S = [(\alpha - \alpha_{begin})] \cdot C_{l_{int}} \cdot \frac{(1 - k)}{\Delta t}. \quad (IV-11)$$

Dans ce cas, le calcul du rejet de soluté lors de la solidification est donc entièrement engendré par l'évolution du champ de fraction solide. En effet, le terme $(\alpha - \alpha_{begin})$ exprime, pour chaque maille, la variation de la fraction solide au cours des itérations numériques. Ce terme s'annule donc pour les mailles dont la fraction solide n'a pas varié au cours de l'itération temporelle. Ainsi, dans de telles mailles, ce terme source S est annulé en totalité. Les seules mailles dans lesquelles le terme source S n'est pas nul sont celles dans lesquelles la fraction solide a évolué : ce sont les mailles dans lesquelles coexistent, au début ou à la fin de l'itération temporelle, à la fois la phase liquide et la phase solide. Ces mailles forment la zone de transition entre la phase liquide et la phase solide.

L'interface solide/liquide est donc, par définition, une interface diffuse. En fixant la taille des mailles dans la zone de l'interface en fonction du gradient thermique appliqué dans le four et en fonction du choix du paramètre ε (voir Équations (II-2) et (II-3)), il est néanmoins possible de contrôler l'épaisseur de cette interface diffuse et de la limiter à deux ou trois mailles. Ainsi, malgré l'approche enthalpique pour ce modèle, il est possible d'obtenir une interface solide/liquide définie dans une zone de transition relativement fine. On rappelle qu'au cours du tirage, avec l'hypothèse d'un matériau faiblement concentré en impuretés, le front de solidification est lisse, c'est-à-dire non

dendritique. C'est pourquoi, dans ce modèle qui comporte une zone de transition, on a choisi de repérer l'interface solide/liquide par l'isosurface de température de fusion T_f (voir partie II.E), qui correspond également, d'après l'équation (II-4), à l'isosurface de fraction solide $\alpha = 0,5$.

Le terme source S , définissant le rejet de soluté, est exprimé par unité de volume et de temps, et donne un rejet dans chaque maille où $(\alpha - \alpha_{begin})$ est non nul. Pour le calculer, il faut multiplier la fraction du volume solidifié, égale à $(\alpha - \alpha_{begin})$, par la concentration en impuretés à l'interface qui correspond à ce volume solidifié. On obtient alors une quantité de matière par unité de volume, qui est ensuite multipliée par $\frac{(1-k)}{\Delta t}$ afin d'obtenir, par unité de volume et de temps, la quantité de matière qui n'a pas été conservée dans la phase solide et qui a par conséquent été rejetée dans la phase liquide. Or, cette conception du terme source implique d'une part que le rejet de soluté est effectué de manière diffuse, puisqu'il est actif dans chaque maille formant la zone de transition solide/liquide, et d'autre part que le rejet se réfère à la concentration en impuretés prise à l'interface, définie précisément par l'isosurface de température T_f . Il y a donc une difficulté à lever : en raison de l'épaisseur de la zone de transition, l'isosurface ne passe pas par toutes les mailles solidifiées ou partiellement solidifiées. Il faut donc pouvoir associer le volume solidifié et la concentration en impuretés à l'interface (prise sur l'isosurface) qui correspond à ce volume solidifié, malgré l'épaisseur de la zone de transition solide/liquide.

Pour résoudre ce problème, on va considérer que le maillage peut être vu, dans la zone du maillage proche de l'interface, comme un ensemble de colonnes de mailles parallèles à l'axe du creuset (voir Figure IV-4). Dans chacune de ces colonnes, la zone de transition a une épaisseur d'une ou de quelques mailles. Au sein d'une colonne, chaque maille est alors associée à la valeur de la concentration en impuretés prise sur l'isosurface et correspondant à l'ordonnée (sur \vec{y}) de la colonne considérée (voir Figure IV-5). Ainsi, dans une colonne du maillage, le rejet de soluté est diffus (il a lieu dans plusieurs mailles) en lien avec l'épaisseur de la zone de transition solide/liquide, mais la quantité de matière ainsi rejetée dans la colonne est égale à la quantité de matière obtenue en concentrant l'ensemble du volume solidifié d'une colonne dans la maille contenant l'isosurface.

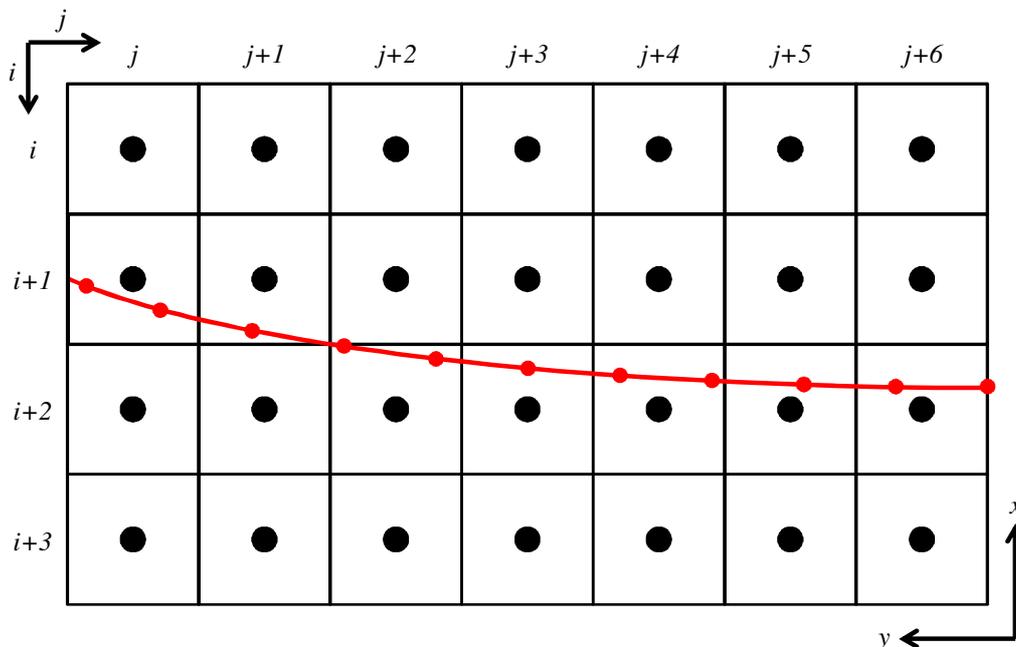


Figure IV-4 : Représentation schématique du maillage dans la zone de l'interface. Le solide est situé en bas, si bien que l'interface progresse selon \vec{x} . Les centres des mailles sont représentés par les points noirs de coordonnées (x_i, y_j) , et l'interface est représentée en rouge par l'isosurface de T_f , discrétisée aux points rouges notés a_n . Le maillage est découpé en colonnes, repérées par l'indice j .

Par ailleurs, il faut noter que ce calcul est réalisé lors de l'exécution de la macro Java, avec des données exportées de la simulation (voir bloc (a) sur la Figure IV-3). Or, lors de l'export des données prises sur l'isosurface, le logiciel applique une discrétisation arbitraire des champs calculés sur l'isosurface : les données obtenues suite à cet export correspondent à des points d'abscisse curviligne qui ne sont pas corrélés au maillage du domaine (comme illustré schématiquement sur la Figure IV-4). Il est donc nécessaire de réaliser des interpolations pour obtenir les données issues de l'isosurface qui correspondent aux ordonnées (sur \bar{y}) des centres des mailles des colonnes du maillage.

Ces opérations d'interpolations sont réalisées par la macro Java. On décrit le principe de cette opération d'interpolation appliquée sur un maillage régulier, en sachant que le maillage est effectivement régulier dans la zone de l'interface solide/liquide. Le tirage de l'interface a lieu suivant la direction \vec{x} , les indices i et j correspondent respectivement aux indices des lignes et des colonnes des matrices contenant les coordonnées du maillage, comme présenté schématiquement sur la Figure IV-4. Les valeurs des champs sont évaluées sur les points correspondant au centre des mailles (en noir), ainsi que sur les points de discrétisation de l'isosurface de température T_f (en rouge). On notera (x_i, y_j) les coordonnées des centres des mailles, et a_n les n points de discrétisation de l'isosurface, de coordonnées (x_{a_n}, y_{a_n}) , qui repèrent l'interface.

La Figure IV-5 présente une colonne extraite de la matrice du maillage présenté sur la Figure IV-4. Pour une colonne donnée, d'indice j , on considère l'ordonnée y_j représentée sur la Figure IV-5 par la droite (II). Le point d'ordonnée y_j appartenant à l'isosurface est noté a_j^* . Il a pour coordonnées le couple $x_{a_j^*}$ et $y_{a_j^*} = y_j$. La valeur de $x_{a_j^*}$ est obtenue par interpolation linéaire grâce aux valeurs associées aux points a_n et a_{n-1} , comme l'illustre la droite (I) dans la Figure IV-5.

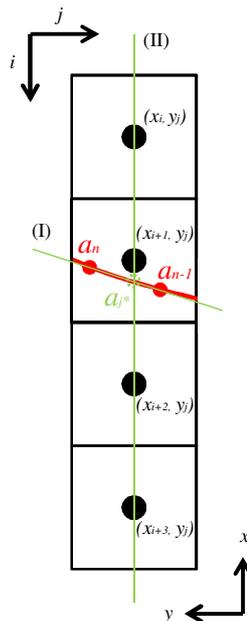


Figure IV-5 : Interpolations linéaires pour obtenir la valeur du champ de concentration sur l'interface solide/liquide à l'ordonnée y_j . Le processus est illustré pour une colonne de la matrice extraite du maillage présenté sur la Figure IV-4. La phase liquide est en haut et la phase solide en bas. Cette opération d'interpolation est reproduite pour chaque colonne de la matrice formée par le maillage.

Cette interpolation est réalisée à l'aide de polynômes de Lagrange d'ordre 1 :

$$x_{a_j^*} = \frac{y_{a_j^*} - y_{a_n}}{y_{a_{n-1}} - y_{a_n}} x_{a_{n-1}} + \frac{y_{a_j^*} - y_{a_{n-1}}}{y_{a_n} - y_{a_{n-1}}} x_{a_n} . \quad (IV-12)$$

Ensuite, la valeur du champ de concentration au point a_j^* , c'est-à-dire sur l'isosurface à l'ordonnée y_j , est également évaluée par interpolation linéaire. Pour cette opération, on utilise les valeurs du champ

de concentration disponibles aux centres des mailles les plus proches, c'est-à-dire les valeurs aux points de coordonnées (x_{i+1}, y_j) et (x_{i+2}, y_j) , comme indiqué dans l'équation suivante :

$$C_l(x_{a_j^*}, y_{a_j^*}) = \frac{x_{a_j^*} - x_{i+1}}{x_{i+2} - x_{i+1}} C_l(x_{i+2}, y_j) + \frac{x_{a_j^*} - x_{i+2}}{x_{i+1} - x_{i+2}} C_l(x_{i+1}, y_j). \quad (IV-13)$$

Cette équation (IV-13) fait également intervenir la valeur de $x_{a_j^*}$ obtenue par l'équation (IV-12). La valeur de concentration sur l'isosurface $C_l(x_{a_j^*}, y_{a_j^*})$ est ainsi obtenue en a_j^* pour la colonne d'ordonnée $y_j = y_{a_j^*}$. Ce processus d'interpolation est ensuite réalisé, en suivant le principe ainsi décrit, pour chaque autre colonne de la matrice formée par le maillage.

On peut ainsi déterminer pour chaque colonne la concentration en impuretés à l'interface, interpolée à partir des valeurs de concentration au centre des mailles. Ces valeurs interpolées de concentration à l'interface sont ensuite reportées dans les mailles de chaque colonne, afin de former un champ de concentration noté $C_{l_{int}}$. Ce champ de concentration $C_{l_{int}}$ est alors associé au volume solidifié pour déterminer la quantité de matière rejetée dans la phase liquide, comme indiqué dans l'équation (IV-11). On pourra noter que cette opération d'interpolation est réalisée sur le champ de concentration à la fin de l'itération temporelle. Lors du calcul du terme source, la concentration $C_{l_{int}}$ correspond donc plus précisément à la concentration en impuretés à l'interface évaluée à la fin de l'itération temporelle précédente. Le champ de concentration $C_{l_{int}}$ ne change pas lors du passage à la nouvelle itération temporelle et ne varie pas au cours des itérations numériques. Ce modèle utilise donc une approche explicite : on suppose que la concentration varie suffisamment peu au cours de l'itération temporelle pour qu'il soit possible de calculer le rejet de soluté avec la valeur de concentration prise au début du pas de temps.

3) Cas d'une simulation avec maillage mobile

Dans le cas d'une simulation avec maillage mobile, la position du maillage varie au cours du temps : le maillage est soumis à une translation dans la direction du tirage, d'une distance notée d . Cette translation est effectuée au début de chaque itération temporelle. La translation du maillage translate également les champs portés par celui-ci.

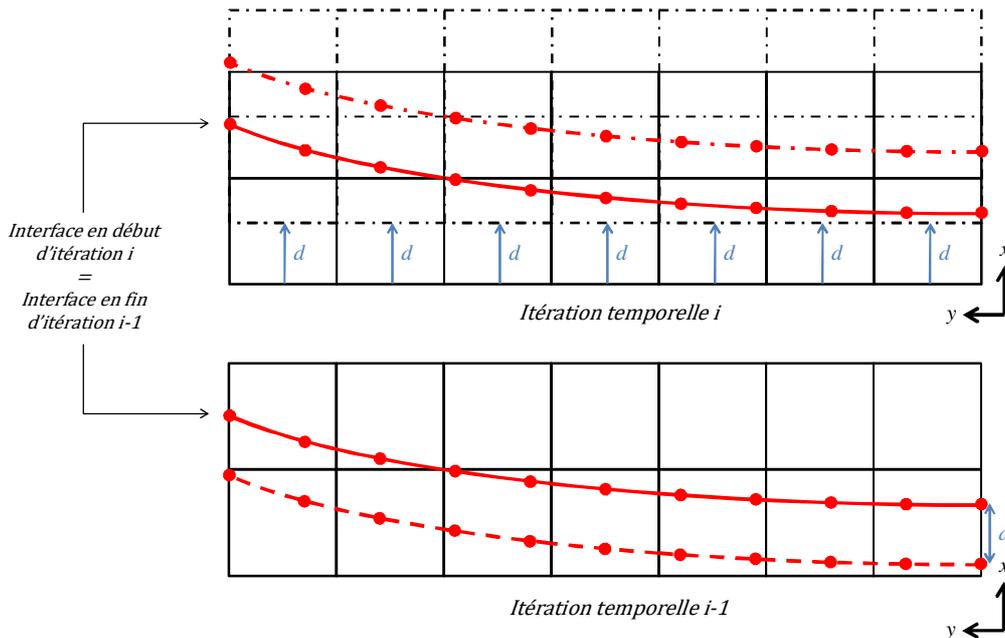


Figure IV-6 : Représentation schématique de la translation du maillage d'une distance d réalisée au début de l'itération temporelle i . La partie haute de la figure représente l'état à l'itération i . La partie

basse représente l'état l'itération précédente $i-1$. Pour la partie basse, l'interface en pointillé correspond à la position au début de l'itération $i-1$, et l'interface en trait plein correspond à la position en fin d'itération $i-1$. Pour la partie haute, l'interface en trait plein correspond à la position en début d'itération i , avant translation. L'interface en pointillé correspond à l'interface traduite d'une distance d . La distance d est obtenue avec l'avancée totale de l'interface à l'itération $i-1$ (tenant compte de l'avancée par translation et de la correction réalisée par les itérations numériques).

Considérant que l'avancée de l'interface varie peu d'une itération temporelle à l'autre, on choisit la distance d comme étant l'avancée de l'interface solide/liquide lors de l'itération temporelle précédente. Ainsi, déplacer le maillage permet de tradater, entre autres, l'interface solide/liquide d'une distance d , sans en changer la forme. De cette manière, d peut être vue comme une prédiction pour la nouvelle position de l'interface, qui sera ensuite corrigée lors des itérations numériques.

Pour estimer l'avancée de l'interface solide/liquide, on considère l'avancée, au cours de l'itération temporelle précédente, du point de l'interface ayant l'abscisse minimale suivant \vec{x} . La distance d est choisie égale à l'avancée de ce point particulier de l'interface, comme illustré dans le coin en bas à droite de la Figure IV-6. On rappelle que le déplacement du maillage translate, en plus du champ de fraction solide définissant l'interface, l'ensemble des autres champs, et notamment le champ de température ainsi que le champ de concentration.

Le terme source A, qui suffisait à décrire le rejet de soluté dans le cas d'une simulation avec maillage fixe, ne décrit plus ici que la partie du rejet de soluté liée à la correction de la position de l'interface lors des itérations numériques. En effet, dans le terme source A, l'expression $(\alpha - \alpha_{begin})$ permet de calculer le volume solidifié au cours des itérations numériques. Mais lors de la translation du maillage, le transport du champ de fraction solide α déplace l'interface solide/liquide, qui balaye alors un certain volume. On peut considérer que ce volume s'est solidifié hors de l'exécution des itérations numériques. Il faut donc calculer séparément ce volume « solidifié » lors de la translation du maillage. De la même manière, la translation du champ de concentration, réalisée hors de l'exécution des itérations numériques, doit être prise en compte dans le calcul. L'expression du terme source est donc complétée par des termes de compensation liés à la translation de l'interface solide/liquide (terme source B) et à la translation du champ de concentration (terme source C).

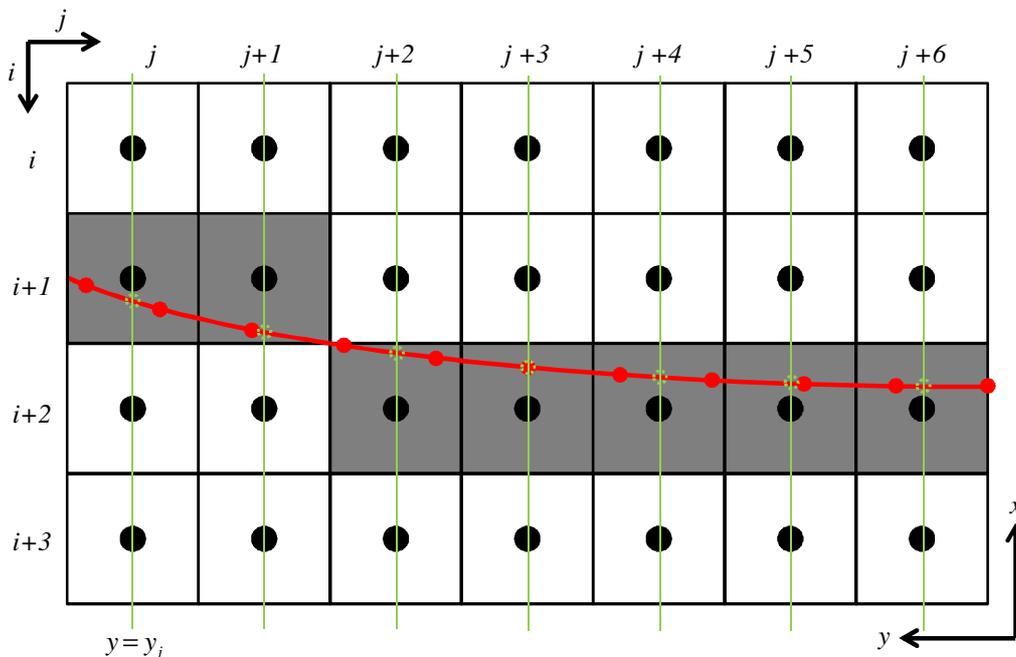


Figure IV-7 : Représentation schématique de la fonction filtre F_{int} sélectionnant les mailles les plus proches de l'interface solide/liquide. Pour chaque colonne, les valeurs $x_{\alpha_j^*}$ sont interpolées grâce à l'équation (IV-12). Les mailles dont les centres sont les plus proches des points a_j^* (en vert) dans la direction \vec{x} sont sélectionnées. La fonction F_{int} vaut 1 dans ces mailles (grises) et 0 ailleurs.

Le terme source B permet de calculer le volume balayé par l'interface lors de la translation du maillage et de calculer quantité de matière correspondante pour les impuretés, afin de compléter le rejet de soluté vers la phase liquide. On choisit de faire ce rejet, pour chaque colonne du maillage, dans la maille qui contient l'isosurface. Pour cela, on introduit une fonction filtre, notée F_{int} , permettant de sélectionner les mailles qui contiennent l'interface solide/liquide (mailles en gris sur la Figure IV-7). Dans ces mailles, la fonction F_{int} a une valeur égale à 1, tandis qu'elle vaut 0 dans les autres mailles. Cette fonction filtre F_{int} est construite grâce à la macro Java (voir bloc (b) sur la Figure IV-3).

Pour déterminer les mailles sélectionnées par la fonction filtre F_{int} , on détermine d'abord, pour chaque colonne, le point a_j^* de l'isosurface grâce à ses coordonnées interpolées suivant l'équation (IV-12). Ensuite, un processus de recherche est effectué dans chaque colonne, pour identifier le centre de maille le plus proche du point a_j^* suivant la direction \vec{x} . Connaissant la taille de maille, on peut alors construire la fonction F_{int} , comme représenté sur la figure Figure IV-7, en affectant la valeur 1 dans les mailles ainsi identifiées, et 0 dans les autres mailles. Par conséquent, cette fonction n'active qu'une seule maille par colonne de la matrice formée par le maillage.

Le terme source B est calculé comme le produit de cette fonction filtre F_{int} , qui permet de sélectionner les mailles dans lesquelles ce terme est actif, avec le terme $\frac{d}{L}$, qui donne dans chaque maille la fraction volumique balayée par l'interface lors de la translation. Cette fraction volumique est considérée comme solidifiée suite au déplacement du maillage. Ce terme est ensuite multiplié par le champ de concentration $C_{l,int}$, correspondant à la concentration en impuretés à l'interface, prise sur l'isosurface selon la méthode décrite précédemment (voir partie IV.B.2). On obtient alors la quantité de matière en impuretés, par unité de volume, correspondant au volume solidifié par la translation du maillage. En multipliant cette quantité par $\frac{(1-k)}{\Delta t}$, on obtient bien la quantité de matière, par unité de volume et de temps, rejetée dans la phase liquide. Ce terme source B, ajouté au terme source A, permet donc de retrouver l'intégralité du volume solidifié au cours de l'itération temporelle., et permet bien ce corriger le défaut de masse en impuretés, engendré par la translation du maillage, par un rejet localisé, pour chaque colonne du maillage, au plus près de l'interface solide/liquide.

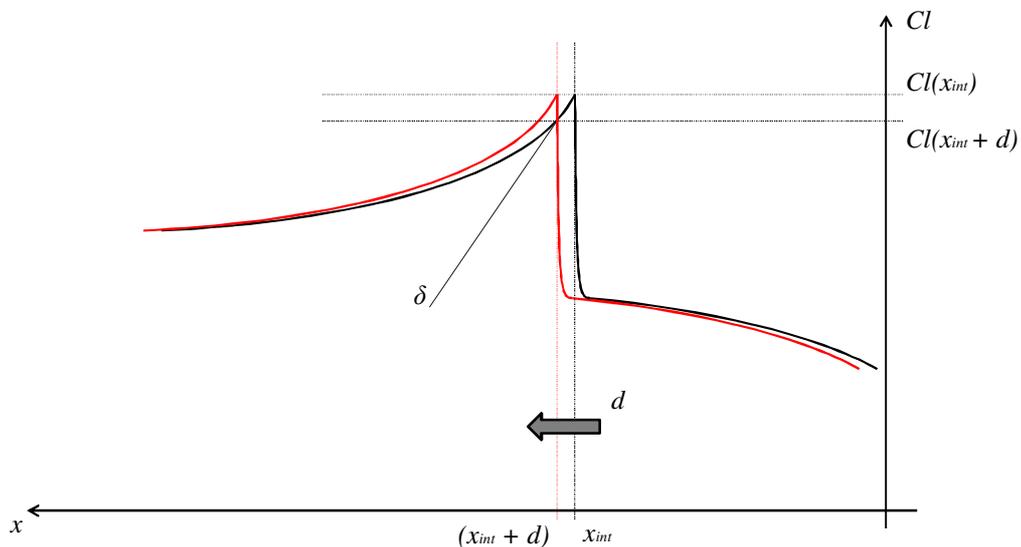


Figure IV-8 : Représentation schématique d'un profil de concentration typique C_l avant (en noir) et après (en rouge) translation d'une distance d . On note l'apparition d'un excédent de concentration lié à la translation du maillage au point d'abscisse $(x_{int} + d)$. Le gradient de concentration à l'interface, représenté par la droite δ , permet d'estimer cet excédent grâce à l'équation (IV-14).

Il faut également ajouter le terme de compensation C afin d'obtenir la totalité du terme source. Ce terme source C est lié à la translation spatiale du champ de concentration. La Figure IV-8 présente schématiquement, pour un instant donné et dans la zone de l'interface, un profil de concentration C_l

(en noir) en fonction de x typique d'une solidification dirigée, avec une interface solide/liquide située en x_{int} . La partie solide se trouve à droite de l'interface, et la partie liquide à gauche. Le saut de concentration C_l observé à l'interface est dû au rejet de soluté, défini comme un terme source volumique localisé au niveau de l'interface. Dans la partie solide, la concentration C_s sera déduite de la concentration C_l comme indiqué en partie IV.A. On s'intéresse plus particulièrement au pic de concentration observé dans la partie liquide à l'interface : on a notamment la concentration $C_l(x_{int})$ à l'interface d'abscisse x_{int} et la concentration $C_l(x_{int} + d)$ au point d'abscisse $(x_{int} + d)$ qui se situe au-delà de l'interface. Sur cette figure, le même champ de concentration est représenté translaté (en rouge) d'une distance d suivant \vec{x} . On constate que suite à cette translation, la concentration au point $(x_{int} + d)$ a changé : après la translation, elle est égale à $C_l(x_{int})$. Cette modification du champ de concentration par effet de translation peut être vue comme un rejet de soluté excédentaire. Il faut alors compenser le terme source pour tenir compte de cet effet. Cet excédent de soluté lié à la translation du maillage peut être estimé grâce au gradient spatial de concentration C_l à l'interface, noté $G_{C_{l_{int}}}$ et représenté par la droite δ sur la figure, avec l'approximation suivante :

$$C_l(x_{int}) - C_l(x_{int} + d) \approx G_{C_{l_{int}}} \cdot d. \quad (IV-14)$$

En retranchant cet excédent à la concentration $C_l(x_{int})$ obtenue à l'abscisse $(x_{int} + d)$ après translation (profil rouge), on retrouve bien la concentration originale $C_l(x_{int} + d)$ que l'on avait à l'abscisse $(x_{int} + d)$ avant la translation (profil noir). Cet effet lié à la translation et le principe utilisé pour le compenser ont été illustrés ici sur un exemple, avec le point particulier d'abscisse $(x_{int} + d)$, mais il faut bien noter que cet effet impacte en réalité toute la partie du domaine qui a été translatée. Il faut donc introduire le terme de correction sur tout le domaine du maillage mobile.

Le terme source C , corrigeant la translation du maillage, est donc calculé par unité de volume et de temps dans tout le domaine du maillage mobile par l'expression $G_{C_l} \cdot \frac{d}{\Delta t}$. Dans cette expression, G_{C_l} est le gradient spatial de concentration suivant \vec{x} (la direction du tirage), d est la distance de translation et Δt est le pas de temps. On peut noter que le terme $\frac{d}{\Delta t}$ correspond à la vitesse de grille. Le terme G_{C_l} peut être obtenu, de manière générale, grâce à l'option « Temporary Storage Retained » du logiciel, qui permet d'accéder aux gradients spatiaux du champ de concentration. L'utilisation de cette option s'accompagne néanmoins d'une augmentation du coût de calcul de la simulation. Cette option est donc utilisée pour obtenir G_{C_l} sur l'ensemble du domaine du maillage mobile, sauf dans la zone proche de l'interface. En effet, dans cette zone particulière du maillage mobile, le calcul du gradient G_{C_l} est adapté afin d'éviter certains problèmes numériques.

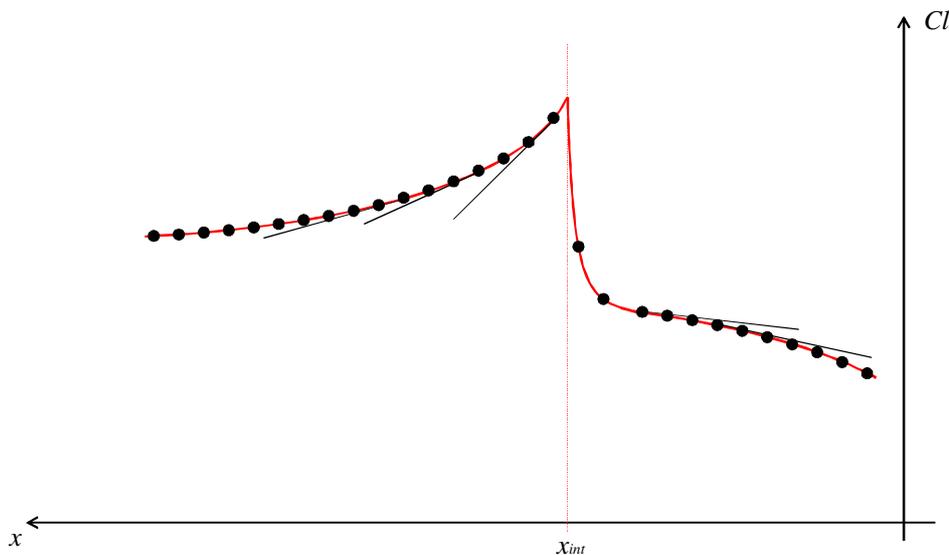


Figure IV-9 : Représentation schématique d'un profil de concentration C_l théorique typique (en rouge) et du profil de concentration C_l discrétisé correspondant (en noir). Le gradient G_{C_l} est calculé

de gauche à droite dans la partie liquide (à gauche de l'interface) et de droite à gauche dans la partie solide (à droite de l'interface). Le saut de concentration à l'interface comprend plusieurs points de discrétisation, nécessitant d'adapter le calcul de G_{C_l} afin d'éviter les valeurs aberrantes.

Dans la zone proche de l'interface, on adapte le calcul du gradient G_{C_l} dans chaque colonne du maillage avec une méthode qui se substitue à l'option « Temporary Storage Retained ». En effet, comme illustré schématiquement sur la Figure IV-9, le profil de concentration dans une colonne du maillage est en réalité discrétisé. Sur cette figure, un profil de concentration typique est illustré avec une ligne rouge, et le profil discrétisé correspondant est illustré avec les points noirs. On constate que le profil discrétisé ne permet pas de prendre en compte correctement la pointe du pic de concentration à l'interface. À l'abscisse x_{int} repérant l'interface, le gradient de concentration qui pourrait être calculé à partir des données discrétisées (points noirs) de part et d'autre de x_{int} ne correspond pas au gradient de concentration à l'interface attendu (voir droite δ sur la Figure IV-8). Pour résoudre ce problème, on calcule alors le gradient G_{C_l} grâce à la macro Java, lors de l'étape représentée par le bloc (c) dans la Figure IV-3.

Dans chaque colonne du maillage, le gradient G_{C_l} est calculé de gauche à droite dans la phase liquide (à gauche de l'interface) et de droite à gauche dans la partie solide (à droite de l'interface), comme schématisé pour quelques points sur la Figure IV-9. En considérant chaque point l'un après l'autre comme étant le point d'abscisse x_{i+1} , précédé du point x_i et suivi du point x_{i+2} de la gauche vers la droite, avec L la taille des mailles, le gradient G_{C_l} est défini de la manière suivante :

- si le point x_{i+1} considéré est dans la zone liquide ($x_{i+1} \geq x_{int}$), on a l'expression

$$G_{C_l}(x_{i+1}) = \frac{C_l(x_i) - C_l(x_{i+1})}{L} \quad \text{si } x_{i+1} \geq x_{int}, \quad (IV-15)$$

- si le point x_{i+1} considéré est dans la zone solide ($x_{int} > x_{i-1}$), on a l'expression

$$G_{C_l}(x_{i+1}) = \frac{C_l(x_{i+1}) - C_l(x_{i+2})}{L} \quad \text{si } x_{int} > x_{i-1}, \quad (IV-16)$$

avec x_{int} qui correspond, dans chaque colonne du maillage, à l'abscisse x_{a_j} issue de l'interpolation de l'isosurface de température T_f (voir Équation (IV-12)).

Le calcul du gradient G_{C_l} pour les points compris dans le saut de concentration entre les phases solide et liquide doit être traité à part, afin d'éviter les valeurs aberrantes. Pour les deux points les plus proches de l'interface dans la partie solide, on impose une valeur nulle pour le gradient G_{C_l} . Ce traitement est nécessaire pour éviter d'obtenir des valeurs aberrantes pour le gradient G_{C_l} dans la zone proche de l'interface. En effet, ces points particuliers correspondent à une zone de forte variation, liée au saut de concentration. L'étalement de ce saut de concentration peut néanmoins être considéré comme un artefact numérique. Or, les expressions (IV-15) et (IV-16), appliquées sur ces points particuliers, donneraient pour le gradient G_{C_l} des valeurs très élevées et incohérentes avec le modèle, qui seraient ensuite introduites dans le terme source C qui corrige les effets de translation du champ de concentration. Introduire ces valeurs aberrantes dans ce terme source conduirait à faire apparaître un excédent de matière au niveau de l'interface, au lieu d'obtenir l'effet correctif mentionné dans la Figure IV-8. C'est pourquoi, pour ces points particuliers, les valeurs de G_{C_l} sont ramenées à zéro, afin d'éviter cet artefact numérique au niveau de l'interface.

Ce terme source C fait donc intervenir le gradient de concentration suivant \vec{x} (direction du tirage), noté G_{C_l} . Le calcul de ce gradient, réalisé à l'aide de l'option « Temporary Storage Retained » dans le domaine du maillage mobile, est adapté dans la zone proche de l'interface, afin de supprimer les valeurs aberrantes provoquées par un artefact numérique, en lien avec la discrétisation et l'étalement du saut de concentration entre la phase liquide et la phase solide.

Ainsi, pour conclure, dans le cas du maillage mobile, on déplace le maillage en fonction de l'avancée de l'interface à l'itération temporelle précédente. Cette translation, qui déplace le maillage et les champs portés par celui-ci, agit comme un prédicteur pour la nouvelle position de l'interface. Cependant, pour le calcul du terme source de rejet de soluté, des termes de correction doivent être introduits pour compenser les effets de la translation du maillage. Dans l'équation (IV-10), on ajoute donc au terme source A, qui donne le rejet lié au changement de phase lorsque le maillage est fixe, le terme correctif B qui permet de prendre en compte le volume solidifié lors de la translation du maillage (réalisée en dehors des itérations numériques). L'effet lié à la translation du champ de concentration, qui peut être vu comme un rejet de soluté excédentaire, est compensé par le terme correctif C qui est ajouté aux autres termes. Les résultats des simulations obtenues avec ces termes sources seront présentés dans la partie V.A. Toutefois, avant de pouvoir exploiter les résultats des simulations, il est nécessaire d'introduire un post-traitement des données dans la partie solide, qui est présenté dans la partie suivante.

C. Post-traitement des données dans la phase solide

La méthode présentée dans la partie ci-dessus donne les équations utilisées pour résoudre le problème de ségrégation des impuretés, ainsi que le terme source permettant de calculer le rejet d'impuretés de la phase solide vers la phase liquide lors de la solidification. Cette méthode permet d'obtenir directement la concentration dans la phase liquide. En revanche, pour obtenir correctement la concentration dans la phase solide, il faut envisager un traitement des données supplémentaire. En effet, la présence d'un écoulement résiduel dans la phase solide entraîne une modification non désirée de la concentration dans la phase solide par convection. Pour les modèles avec la méthode de maillage glissant, la translation du maillage entraîne également une modification non désirée de la concentration dans le solide. Pour corriger ces effets et obtenir correctement la concentration dans la phase solide, on introduit un post-traitement des données dans le solide.

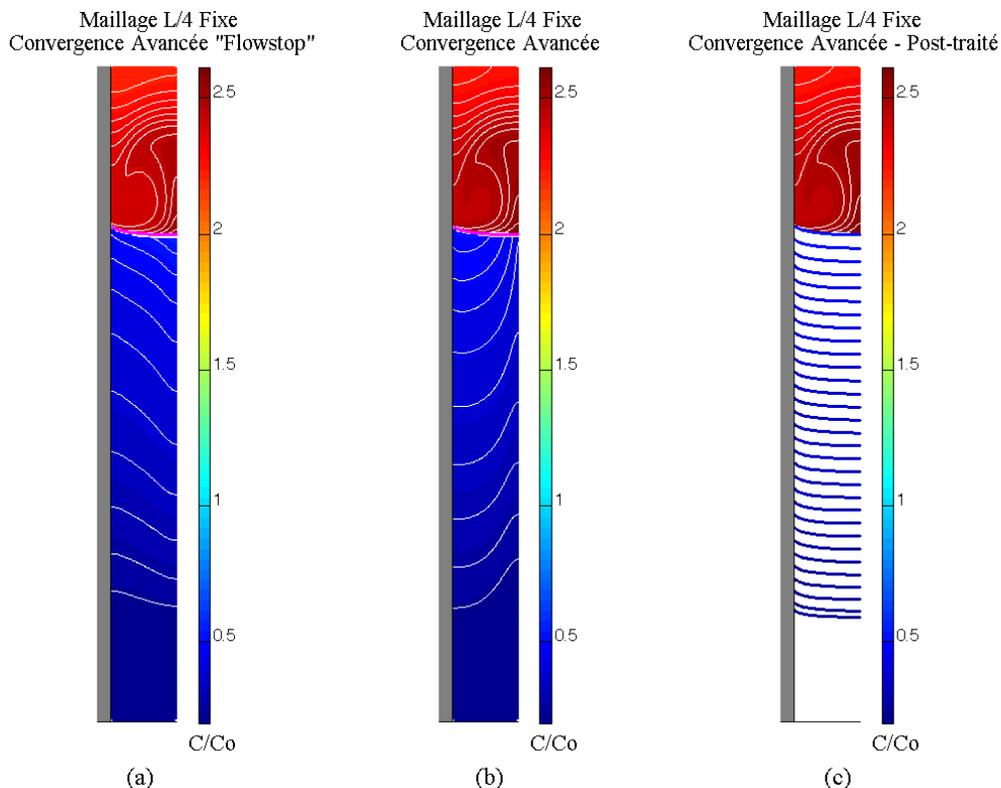


Figure IV-10 : Illustration de l'opération de post-traitement des données dans la phase solide, effectuée pour l'instant $t = 30000$ s. Les trois figures sont obtenues avec des modèles utilisant le même maillage et les mêmes paramètres de convergence. La figure (a) présente la concentration

obtenue avec l'option « Flowstop » et la figure (b) présente la concentration obtenue sans l'option « Flowstop ». La figure (c) présente les données issues de (b) après application du post-traitement proposé. La concentration dans la phase solide est représentée plus précisément en Figure IV-11. Ces trois figures sont tracées avec les mêmes échelles. L'interface est représentée par la ligne violette.

La Figure IV-10 présente la comparaison des résultats obtenus avec deux modèles, avec les mêmes maillages fixes et fins et avec les mêmes paramètres de convergence stricts. Le premier modèle utilise l'option « Flowstop » permettant d'imposer une vitesse nulle dans toute la phase solide (figure (a)), ce modèle servira donc de référence pour la comparaison de la concentration calculée dans le solide. On observe, grâce aux courbes d'isoconcentration tracées en blanc, que la concentration dans le solide augmente le long de la hauteur du barreau, plus rapidement le long de l'axe de symétrie du creuset qu'au bord de celui-ci. Cet enrichissement en impuretés plus rapide au centre du creuset s'explique grâce à la recirculation située dans la phase liquide dans la zone de l'interface. Le second modèle, présenté en figure (b), n'utilise pas l'option « Flowstop ». Pour ce modèle, les vitesses dans la phase solide ne sont diminuées que par le terme de Darcy (Équation (II-11)), qui laisse toutefois apparaître un écoulement résiduel dans le solide. L'impact de cet écoulement non désiré dans la phase solide est illustré dans la figure (b) : les courbes d'isoconcentration montrent bien qu'au lieu d'obtenir un enrichissement en impuretés plus important au centre du creuset, on obtient des concentrations anormalement élevées le long du bord du creuset, par rapport à la figure (a) qui sert de référence pour cette comparaison. En revanche, qualitativement, les concentrations dans la phase liquide sont assez similaires pour ces deux modèles. Les légères différences obtenues peuvent s'expliquer avec la forme de l'interface, qui est légèrement modifiée par l'utilisation de l'option « Flowstop », et qui entraîne également une modification l'intensité de la recirculation dans la phase liquide. Grâce à cette comparaison, on peut donc conclure que l'écoulement résiduel constaté sans l'option « Flowstop » a un impact significatif dans la phase solide, dont il faudra tenir compte, et qu'il n'a néanmoins pas d'impact significatif sur la concentration dans la phase liquide, et donc pas d'impact significatif sur la concentration à l'interface solide/liquide.

Lors de la solidification sans l'option « Flowstop », la concentration à l'interface est donc correctement calculée, et on obtient une concentration satisfaisante dans le solide nouvellement formé. C'est seulement après, au cours du temps, qu'on observe une évolution indésirable de la concentration dans le solide. Or, sans convection et en négligeant la diffusion dans la phase solide, la concentration dans le solide à un endroit donné devrait rester identique à la concentration obtenue lors du changement de phase à cet endroit. On propose donc, pour s'affranchir de cette évolution non désirée, d'appliquer un post-traitement des données : reconstruire la cartographie de concentration dans le solide grâce à la concentration de l'interface solide/liquide, extraite et sauvegardée à différents instants tout au long de la simulation. Ainsi, comme l'interface balaye l'ensemble du volume solidifié au cours de la simulation, on peut reconstituer la concentration dans le solide avec une certaine résolution, dépendant du nombre d'exports effectués. Cette cartographie reconstituée est illustrée sur la Figure IV-10 (c), obtenue d'après les données de la figure (b) après application du post-traitement proposé. Comme on le constate par comparaison des figures (b) et (c), ce post-traitement n'affecte pas les données dans la phase liquide.

Pour améliorer la lisibilité de la concentration obtenue dans la phase solide, on trace la Figure IV-11, similaire à la Figure IV-10, qui présente uniquement les concentrations dans la phase solide obtenues pour ces cas de simulation. On retrouve donc le modèle avec l'option « Flowstop » (a), le modèle sans l'option « Flowstop » (b), et les résultats issus du modèle (b) après application du post-traitement (c). On retrouve bien le comportement décrit précédemment : avec des vitesses nulles dans la phase solide (a), le barreau s'enrichit au cours du tirage plus rapidement le long de l'axe du creuset qu'au bord de celui-ci, tandis que l'écoulement résiduel dans la phase solide (b) impacte fortement la distribution d'impuretés dans le solide, conduisant au contraire à avoir un enrichissement plus fort près des bords du creuset. Sur la cartographie de concentration reconstituée grâce au post-traitement proposé (c), on observe une concentration plus importante le long de l'axe du barreau : on a donc une allure analogue aux résultats obtenus avec le modèle (a), qui sert de référence pour cette comparaison. Le post-traitement permet donc de corriger nettement la distribution d'impuretés aberrante obtenue

avec le modèle (b), et cette correction semble correcte d'un point de vue qualitatif. Une comparaison quantitative des résultats dans la phase solide obtenus avec ce post-traitement et avec les autres modèles sera présentée dans la partie V.A.

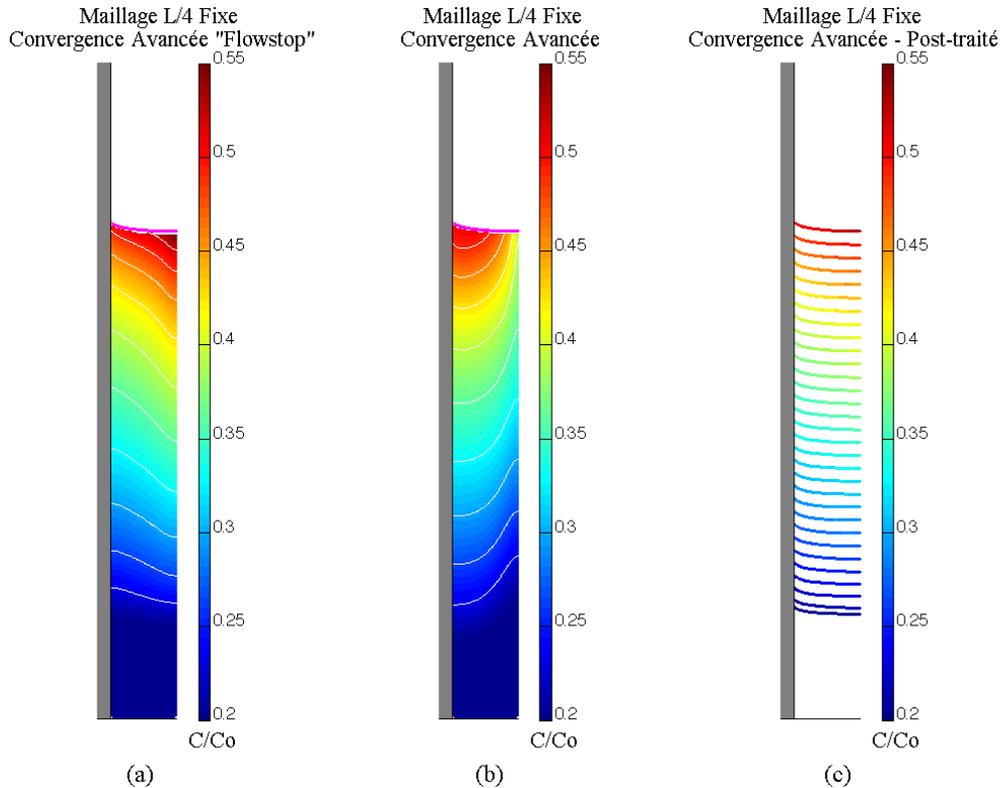


Figure IV-11 : Illustration de l'opération de post-traitement des données dans la phase solide, effectuée pour l'instant $t = 30000$ s. Les trois figures sont obtenues avec des modèles utilisant le même maillage et les mêmes paramètres de convergence. La figure (a) présente la concentration dans le solide obtenue avec l'option « Flowstop » et la figure (b) présente la concentration dans le solide obtenue sans l'option « Flowstop ». La figure (c) présente les données dans le solide issues de (b) après application du post-traitement proposé. Ces trois figures sont tracées avec les mêmes échelles. L'interface est représentée par la ligne violette.

Cette cartographie post-traitée, obtenue avec les données à l'interface extraites à différents instants au fur et à mesure du calcul, ne peut pas, en revanche, tenir compte d'une évolution temporelle de la concentration dans la phase solide. Dans le cas où la diffusion des impuretés dans le solide est négligée, cette restriction n'aura pas d'impact. En revanche, si la diffusion des impuretés dans le solide n'est pas négligée, comme c'est le cas dans les simulations de cette étude, ce post-traitement peut introduire un biais sur le résultat final. Toutefois, au vu des faibles valeurs de diffusivité pour les impuretés considérées, on peut espérer que ce biais n'aura qu'un faible impact sur le résultat. Ce biais pourra néanmoins expliquer les faibles écarts que l'on constatera par la suite entre la solution de référence obtenue avec l'option « Flowstop », qui tient compte de la diffusion des impuretés dans le solide, et la solution obtenue avec le post-traitement, qui n'en tient finalement pas compte. Malgré ce léger biais, le post-traitement permet tout de même d'améliorer considérablement la qualité des solutions obtenues dans la partie solide et autorise des comparaisons de profils de concentration dans la phase solide qui n'auraient pas pu être réalisées sans l'utilisation de ce post-traitement.

Chapitre V.

Validation de la ségrégation

Cette partie fait suite à l'étude de la validation en thermique et en hydrodynamique, présentée en partie III.B, pour l'étude du cas de Stelian uniquement. Les modèles étudiés sont similaires à ceux qui ont été présentés pour la validation de la thermique et de l'hydrodynamique ; ils ont été complétés avec la modélisation de la ségrégation présentée en partie précédente. Cette étude est menée pour valider les résultats des simulations pour la ségrégation des impuretés, et pour caractériser l'impact des méthodes numériques proposées sur les résultats. Pour cela, on met en place plusieurs modèles numériques en déclinant certains paramètres numériques (taille du maillage, maillage fixe ou glissant, etc). On pourra conclure sur l'influence des paramètres numériques et sur la validité des résultats grâce aux comparaisons entre ces différents cas, et grâce à des comparaisons avec une solution numérique calculée par Stelian (Stelian 2001, 2003) qui pourra servir de solution de référence pour nos comparaisons.

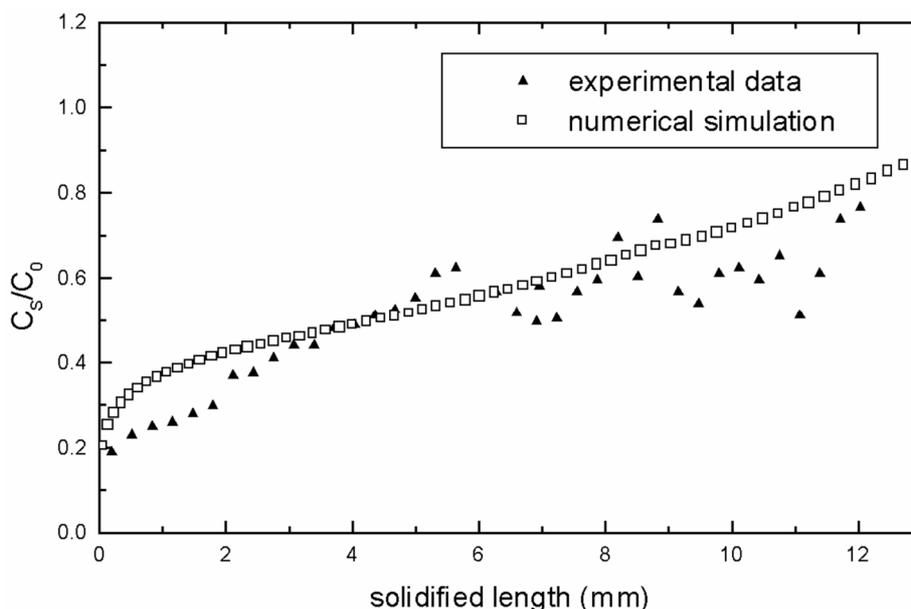


Figure V-1 : Comparaison des données numériques de Stelian [Stelian et al., 2001] et des données expérimentales de Barat, d'après la publication de Stelian. Cette comparaison correspond à un cas de tirage Bridgman vertical axisymétrique de GaInSb, et présente le profil axial de concentration normalisée d'indium dans la partie solidifiée du lingot.

Les résultats de Stelian, issus de ses travaux et de ses simulations grâce aux logiciels FIDAP puis COMSOL Multiphysics, ont été comparés à des résultats expérimentaux [Stelian et al., 2001], comme illustré sur la Figure V-1, dans le cas d'un tirage Bridgman vertical axisymétrique de GaInSb. Ces résultats expérimentaux sont issus des travaux de Barat [Barat et al., 1999] (on pourra d'ailleurs préciser qu'il n'est pas simple de trouver des données de référence pour la ségrégation dans un four à la thermique bien validée). Les données tracées correspondent aux profils de concentration normalisée dans la phase solide, tracés le long de l'axe de symétrie en fonction de la longueur solidifiée. Pour les résultats expérimentaux, ce type de profil peut être obtenu post-mortem, par analyse de l'échantillon solide obtenu en fin de tirage.

Sur cette figure, le profil de concentration obtenue numériquement augmente depuis sa valeur initiale de 0,2 au début du tirage jusqu'à une valeur proche de 0,9 pour une longueur solidifiée de 13 mm. La pente de la courbe numérique, assez élevée à l'instant initial, décroît rapidement pour prendre une valeur proche d'une constante pour le reste du tirage. Les résultats expérimentaux ne présentent pas vraiment cette pente élevée lors du transitoire initial, et présentent des points avec une dispersion assez élevée, voire des oscillations. Malgré cela, cette figure montre que les données numériques reproduisent assez bien la tendance des résultats expérimentaux, ce qui permet de valider le modèle numérique utilisé par Stelian. Toutefois, cette figure montre aussi que l'adéquation entre ce modèle numérique et les données expérimentales n'est pas totalement parfaite. Par conséquent, on peut

conclure que le modèle numérique de Stelian est capable de fournir une solution numérique comparable aux données expérimentales, et que cette solution pourra être utilisée comme solution de référence pour les comparaisons menées dans cette étude. Mais on retiendra aussi pour ces comparaisons, au vu de l'adéquation expérience/numérique présentée, qu'un léger écart à la solution numérique prise comme référence peut rester acceptable afin de valider les résultats qui seront présentés par la suite.

Les résultats présentés dans la Figure V-1 correspondent à des données numériques plutôt anciennes, obtenues par la mise en œuvre du modèle décrit dans les publications de Stelian grâce au logiciel FIDAP. Plus récemment, Stelian a également mis en œuvre ce modèle numérique grâce au logiciel COMSOL Multiphysics, et a ainsi obtenu de nouvelles données numériques. Ce sont ces nouvelles données qui seront présentées et utilisées dans la suite de cette étude. Ces données, plus récentes, correspondent à d'autres paramètres de tirage que ceux qui ont permis d'obtenir la Figure V-1. Par conséquent, ces nouvelles données ne peuvent pas être directement comparées aux données expérimentales de Barat (il faut savoir que de telles données expérimentales sont rares : il est donc difficile de trouver des données de référence lorsqu'on change la configuration ou les paramètres étudiés). Cependant, comme le modèle mis en œuvre par Stelian reste le même, on peut considérer que ces nouvelles données, issues d'un modèle qui a par ailleurs produit des résultats numériques en adéquation avec des données expérimentales, sont suffisamment fiables pour être considérées comme une solution de référence.

A. Résultats pour les cas de validation de la ségrégation

Comme indiqué ci-avant, on présente dans cette partie l'étude des résultats obtenus pour la modélisation de la ségrégation proposée. Pour cela, comme dans le Chapitre III, on met en place plusieurs modèles en faisant varier, entre autres, les paramètres de maillage et les paramètres de convergence. On désignera par l'appellation « Maillage L » les modèles qui ont un maillage grossier de taille L, et par « Maillage L/4 » les modèles qui ont un maillage fin de taille L/4. L'appellation « Fixe » désigne les modèles dont le maillage reste fixe au cours du temps, c'est-à-dire sans la méthode de maillage glissant, tandis que l'appellation « Overset Fixe » désigne les modèles qui utilisent la méthode *Overset Mesh*, avec deux maillages de paramètres similaires qui sont connectés de la manière décrite en partie II.B, mais qui restent fixes au cours du temps, sans maillage glissant. Ce cas de simulation permettra d'étudier distinctement l'influence des interpolations qui lient les maillages entre eux et l'influence du déplacement du maillage glissant. L'appellation « Overset Glissant » correspond aux paramètres décrits en détail dans la partie II.D, avec la mise en place de la méthode de maillage glissant et d'une zone de maillage fin au voisinage de l'interface. Les paramètres de convergence, désignés sous les appellations « Convergence Avancée » et « Convergence Simple », sont choisis en accord avec les conclusions de l'étude des résultats en thermique et en hydrodynamique. En effet, une corrélation entre la taille de maille et les paramètres de convergence à choisir pour obtenir un résultat satisfaisant avait été mise en évidence : plus le maillage est fin et plus les paramètres de convergence doivent être stricts. Enfin, le paramètre « Flowstop » désigne les modèles qui utilisent l'option permettant d'assigner une vitesse nulle dans toutes les mailles dont la fraction solide α est égale à 1, c'est-à-dire dans les mailles complètement solides. Cette option permet d'éviter la présence d'un écoulement résiduel dans la phase solide, qui apparaît malgré la forte augmentation de la résistance visqueuse dans la phase solide (voir partie II.A.5). On rappelle que cette option n'est pas compatible avec la méthode de maillage glissant, c'est pourquoi on propose en substitution un post-traitement pour s'affranchir des effets de l'écoulement résiduel dans la phase solide. Toutefois, en complémentarité avec les résultats de Stelian, les résultats obtenus avec cette option « Flowstop » peuvent également servir de point de comparaison en donnant une autre solution de référence, avec un maillage fixe et fin et des vitesses parfaitement nulles dans la phase solide, pour étudier l'influence des différents paramètres présentés.

La Figure V-2 suivante présente une vue d'ensemble d'un tirage complet réalisé avec le modèle « Maillage L/4 Fixe Convergence Avancée "Flowstop" ». Le modèle étant axisymétrique, pour chacun des neuf instants extraits du calcul, on présente la concentration moyenne normalisée à gauche

et la norme de la vitesse à droite de chaque figure. La position de l'interface solide/liquide est repérée sur chacune de ces figures par une ligne violette.

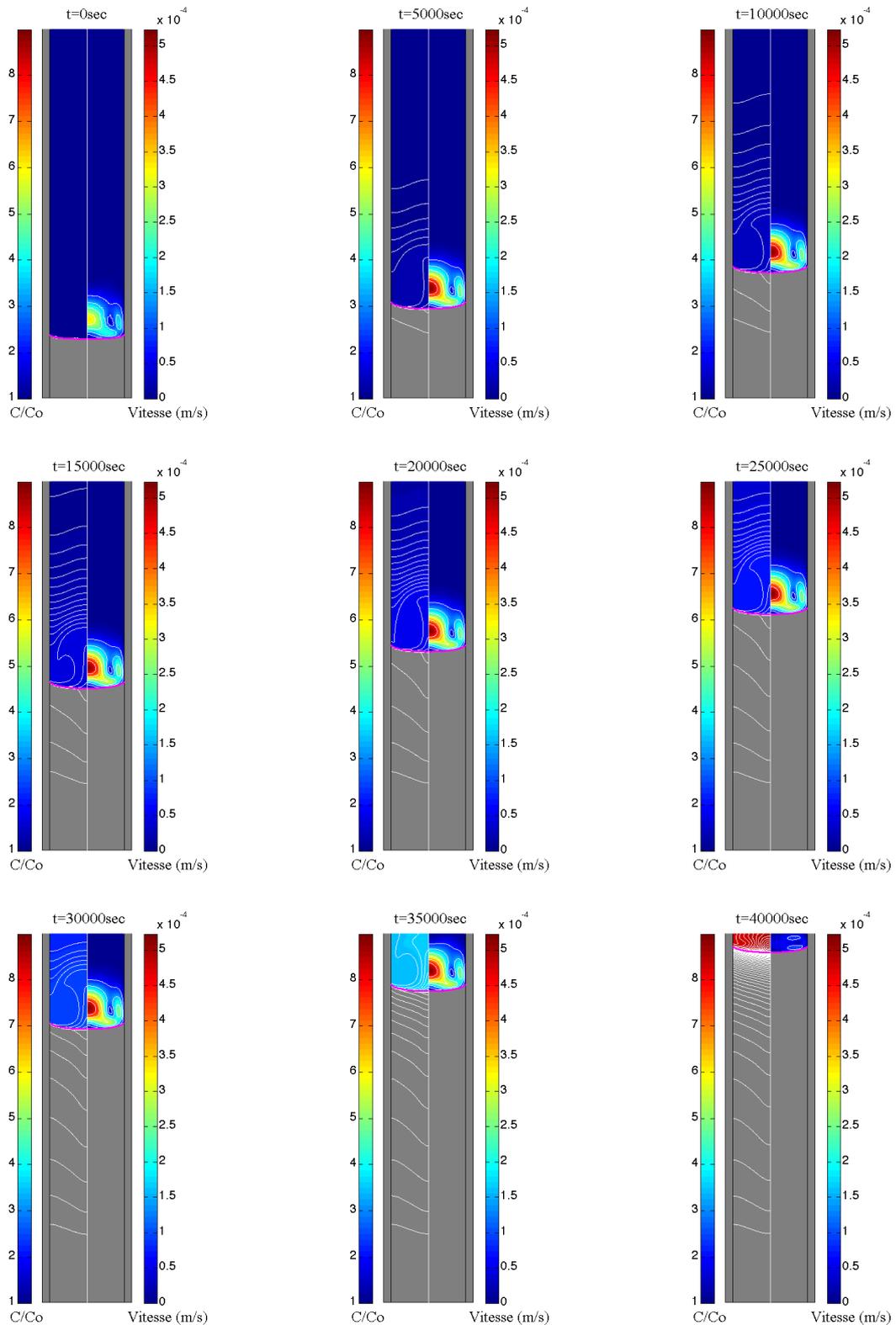


Figure V-2 : Résultats obtenus à différents instants au cours de la simulation du tirage, avec le modèle « Maillage Fixe L/4 Convergence Avancée "Flowstop" ». Le modèle étant axisymétrique, pour chacune de ces figures, la norme de la vitesse est représentée à droite et la concentration moyenne

normalisée est tracée à gauche. Les parties solides sont représentées en gris. Ces figures sont tracées à la même échelle. Sur chaque figure, l'interface solide/liquide est représentée par la ligne violette.

Sur cette figure, on observe bien qu'on a une distribution homogène d'impuretés dans la phase liquide à l'instant initial. Le rapport des concentrations à l'instant initial entre les phases solide et liquide est égal à k , le coefficient de partage. On constate au fur et à mesure du tirage que l'interface solide/liquide progresse de bas en haut à vitesse constante, en accord avec les résultats présentés dans la partie III.B. La courbure de l'interface se maintient tout au long du tirage. Lors de la progression de l'interface, la phase solidifiée rejette des impuretés dans la phase liquide, qui s'enrichit ainsi progressivement. Les isovaleurs de concentration montrent bien cette tendance, et montrent aussi que l'écoulement dans la phase liquide, qui présente une recirculation au voisinage de l'interface qui entraîne le fluide des bords du creuset pour le faire remonter au centre du creuset, transporte les impuretés rejetées et homogénéise la concentration dans le bain liquide. Grâce au phénomène de convection, la concentration en impuretés à l'interface solide/liquide est donc ainsi moins élevée que dans un cas purement diffusif. On observe également une évolution des proportions de la cavité liquide, jusqu'aux derniers instants du tirage pour lesquels la forme de la recirculation dans la phase liquide est modifiée par la présence du bord supérieur du creuset. La phase liquide est alors très riche en impuretés. Les isovaleurs de concentration renseignent également la distribution des impuretés restées piégées dans la phase solide : on constate une augmentation de la concentration en impuretés plus rapide le long de l'axe central que le long des parois du creuset.

De cette même simulation, on extrait le profil de concentration moyenne normalisée le long de l'axe de symétrie du creuset. Grâce à la mise en place de l'option « Flowstop » et de ses qualités de maillage et de convergence, ce profil servira de point de référence pour l'étude de l'influence des différents paramètres qui va suivre, de manière complémentaire à la solution de Stelian. Dans un premier temps, ce profil de concentration, tracé en Figure V-3, permet de prendre la mesure des phénomènes et des échelles concernées. Sur cette figure, qui présente le profil de concentration à l'instant $t = 20000$ s, on peut voir clairement le saut de concentration qui a lieu à l'interface solide/liquide. On constate également que la concentration augmente le long de l'axe dans la partie solide, depuis la valeur de la concentration initiale jusqu'à la valeur de la concentration à l'interface dans la partie solide. Suite au saut de concentration lié au changement de phase, on observe bien la présence d'un maximum de concentration à l'interface dans la zone liquide. Celui-ci est estompé par la présence d'un plateau lié à la recirculation du fluide, qui homogénéise la distribution des impuretés. Cette zone, détaillée dans la Figure V-4, est repérée par le rectangle noir dans la figure.

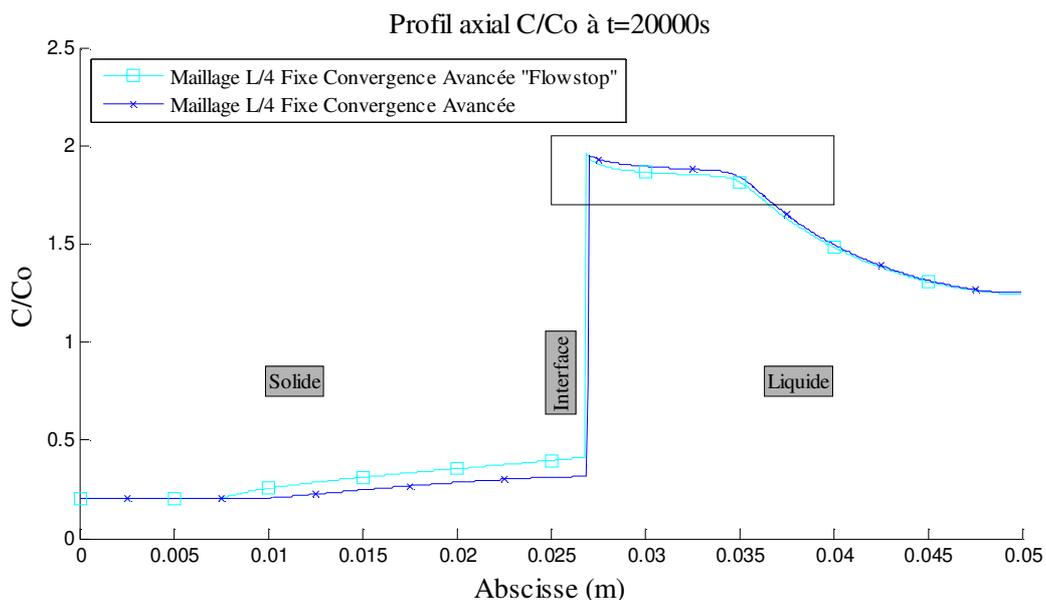


Figure V-3 : Comparaison des profils de concentration moyenne normalisée à l'instant $t = 20000$ s pour deux cas simulés avec le même maillage fixe et fin et les mêmes critères de convergence avancée.

Le profil tracé avec les carrés bleus clairs a été obtenu avec l'option « Flowstop », qui annule complètement les vitesses dans la phase solide. Le profil tracé avec les croix bleues foncées a été obtenu sans cette option. Le rectangle noir représente la zone détaillée dans la Figure V-4.

La Figure V-4, qui présente un agrandissement de la zone repérée dans la figure précédente, permet de vérifier les échelles spatiales pertinentes pour la ségrégation. Le pic de concentration créé par le rejet de soluté depuis la phase solide est en partie estompé et étalé par les effets de convection, qui créent un plateau en lieu et place du pic très marqué caractéristique d'un régime purement diffusif. En revanche, grâce au pic résiduel, on peut tout de même évaluer une échelle spatiale pertinente pour décrire les variations de la concentration au voisinage de l'interface, qui est de l'ordre d'un millimètre selon cette figure. Sur cette épaisseur, il y a une forte variation de la concentration, et un fort enjeu pour l'estimation de la concentration à l'interface, qui conditionne la validité du profil de concentration obtenu lors des simulations. C'est pourquoi une discrétisation fine dans cette couche limite solutale est nécessaire. Avec une taille de maille L ($250 \mu\text{m}$), correspondant au maillage grossier, une couche limite de cet ordre de grandeur est décrite par quatre mailles seulement. Cette discrétisation peut fournir un premier résultat intéressant, mais ne permet pas d'obtenir la précision nécessaire à la bonne description du problème. En revanche, une taille de maille de $L/4$ ($62,5 \mu\text{m}$), correspondant au maillage fin, permet d'avoir seize mailles environ pour décrire la couche limite solutale, ce qui permet d'avoir une description plus fine du pic de concentration. Par ailleurs, dans le cas d'une simulation d'un cas purement diffusif, pour lequel l'épaisseur de la couche limite solutale serait encore plus faible qu'en présence de convection, on pourrait envisager d'affiner encore la discrétisation.

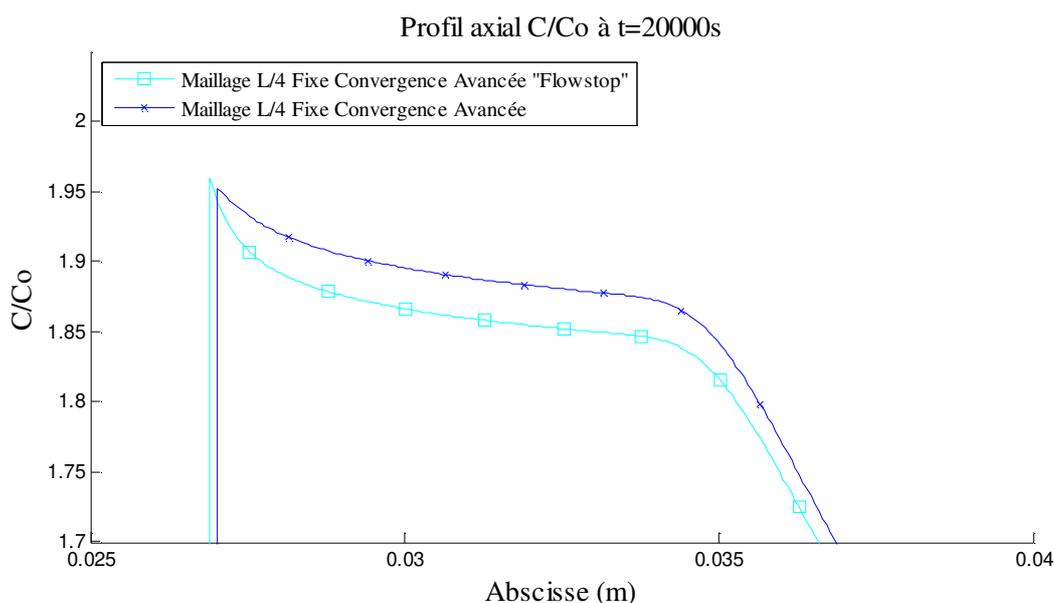


Figure V-4 : Détail de la Figure V-3 extrait de la zone délimitée par le rectangle noir.

D'autre part, les deux figures précédentes présentent aussi la comparaison des profils de concentration obtenus par deux modèles qui ne diffèrent que par l'utilisation de l'option « Flowstop », qui permet d'annuler complètement les vitesses dans la partie solide. Le modèle sans cette option ne réduit les vitesses dans le solide qu'à l'aide de l'augmentation de la résistance visqueuse, qui laisse toutefois lieu à un écoulement résiduel dans la partie solide. On constate que dans la partie liquide, les résultats obtenus avec ces deux approches sont très similaires : il y a moins de 2% d'écart relatif entre ces deux profils pour la phase liquide. Cette différence peut s'expliquer par la légère modification de la distribution des vitesses dans la zone de l'interface en fonction de l'utilisation du « Flowstop », qui modifie légèrement la courbure de l'interface et qui modifie également, par conséquent, la recirculation et le transport d'espèces par convection. En revanche, on constate l'apparition d'un écart important dans la partie solide, avec environ 20% d'écart relatif entre les deux profils. Cet écart est clairement lié à l'écoulement résiduel, qui apparaît en l'absence de l'option « Flowstop », et qui

modifie assez fortement la distribution des impuretés dans la phase solide. Cet écart est problématique pour comparer les résultats, puisqu'on exporte uniquement les profils dans la phase solide en fin de tirage pour l'exploitation des résultats, mais n'impacte que peu le calcul à proprement parler : en effet, le champ de vitesse dans la phase liquide n'est que très peu impacté par cette option. Ainsi, seule la distribution des impuretés dans la partie solide, qui peut être vue, à la diffusion dans le solide près, comme l'historique de la concentration à l'interface solide/liquide, est impactée par cette option « Flowstop ».

Un post-traitement décrit en partie IV.C permet de s'affranchir de ce problème dans la phase solide quand on ne peut pas utiliser l'option « Flowstop ». Il consiste à extraire et à sauvegarder la concentration à l'interface à différents instants, tout au long de la simulation. La Figure V-5 suivante présente l'influence de ce post-traitement sur les données, afin de pouvoir valider cette méthode. Cette figure permet de comparer, en fin de tirage, les profils de concentration obtenus pour les deux cas présentés dans les figures précédentes et les mêmes données soumises à la procédure de post-traitement proposée. La solution calculée par Stelian est tracée avec la ligne noire, afin de pouvoir également valider les résultats sur une solution numérique extérieure. Pour ces profils, on observe donc, en accord avec la description du tirage faite pour la Figure V-2, que la concentration augmente progressivement et lentement le long de l'axe sur la majorité de la longueur du barreau, pour ensuite augmenter fortement dans les derniers 20% du barreau. Le modèle sans « Flowstop » et sans post-traitement, en revanche, ne reproduit pas correctement cette allure, ce qui justifie la nécessité d'introduire un post-traitement. Le modèle avec « Flowstop » donne des profils similaires avec ou sans post-traitement, ce qui correspond au comportement attendu. Par ailleurs, ces deux profils ont un assez bon accord avec la solution de Stelian, ce qui valide les résultats obtenus avec ce modèle numérique. Le modèle sans « Flowstop » post-traité donne un profil qui reproduit également la tendance attendue, et qui est assez proche de la solution avec « Flowstop » et de la solution de Stelian. On peut remarquer que le dernier point du profil non post-traité (tracé avec les étoiles bleues foncées) présente un saut de concentration important et qu'il est confondu avec le dernier point du profil post-traité et proche du profil obtenu avec « Flowstop » : ceci confirme le bon comportement du calcul à l'interface et dans la partie liquide. En effet, cela signifie que le pic de concentration à l'interface solide/liquide est correctement calculé et comparable aux autres cas, et ce, malgré l'erreur qui affecte progressivement la partie solide.

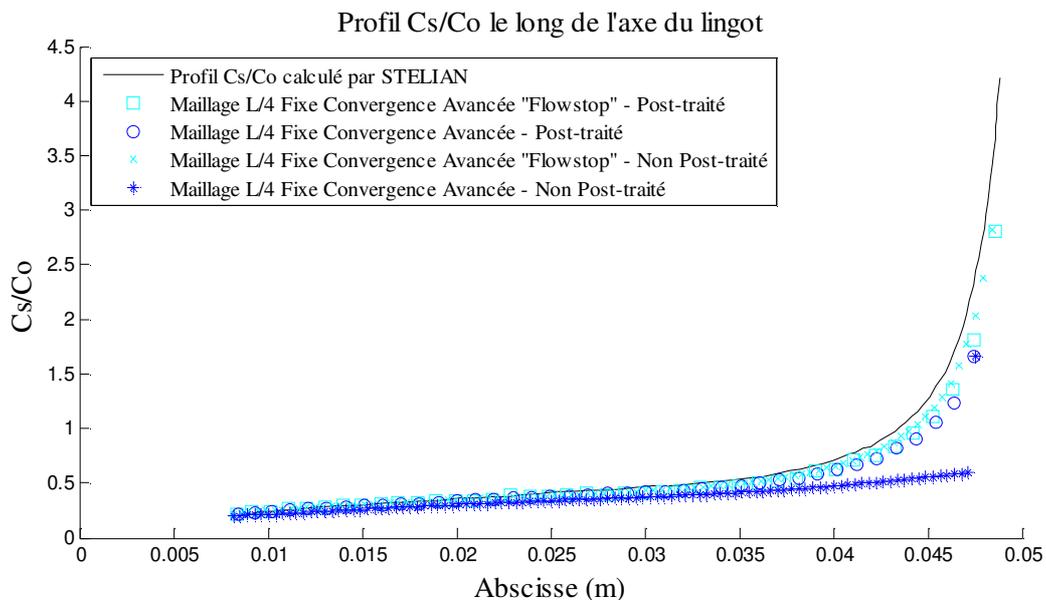


Figure V-5 : Comparaison des profils axiaux de concentration normalisée dans la phase solide en fin de tirage, pour des cas simulés avec le même maillage fixe et fin et les mêmes critères de convergence avancée. Les deux cas présentés avec les croix bleues claires et les étoiles bleues foncées ont été obtenus respectivement avec et sans l'option « Flowstop ». Les deux cas présentés avec les carrés

bleus clairs et avec les cercles bleus foncés sont les profils obtenus respectivement après application du post-traitement aux deux cas précédents. Le profil calculé par Stelian est tracé avec la ligne noire.

Afin de quantifier l'écart entre les profils sans post-traitement et les profils post-traités, on trace sur la Figure V-6 l'écart relatif entre les profils calculés et les profils traités, en prenant les profils calculés comme référence. On constate, comme attendu, que l'écart relatif entre les profils sans « Flowstop » calculé et post-traité est important : environ 15% sur la majeure partie du lingot mais jusqu'à 112% dans la partie d'enrichissement rapide en fin de tirage. On constate également qu'il y a un écart allant jusqu'à 8% entre les profils avec « Flowstop » calculé et post-traité, alors qu'on s'attendrait à ce que le post-traitement reste sans effet sur ces données. Cependant, le post-traitement, qui consiste à extraire les données à l'interface au fur et à mesure de son avancée, ne peut donner un écart relatif nul par rapport au profil calculé en fin de tirage que si les données dans la phase solide n'évoluent aucunement entre leur extraction pour le post-traitement et la fin du tirage. Or, si l'option « Flowstop » bloque bien l'évolution par convection dans la partie solide, il reste la possibilité d'une évolution par diffusion pour les profils de concentration dans la partie solide. Ainsi, le post-traitement proposé revient à supposer que la distribution des impuretés dans la phase solide n'évolue pas au cours du temps, ce qui revient à négliger la diffusion dans le solide, alors que le calcul effectué prend en compte cette diffusion dans le solide. Bien que cette hypothèse de non diffusion dans le solide soit une hypothèse valable et régulièrement faite dans des cas de solidification similaires [Bellet et al., 2009], comme le calcul proposé ici est réalisé sans cette hypothèse, on observe un écart entre ces deux profils. Les données obtenues par ce post-traitement sont donc simplement les données qu'on aurait obtenues par le calcul avec un modèle négligeant la diffusion dans le solide.

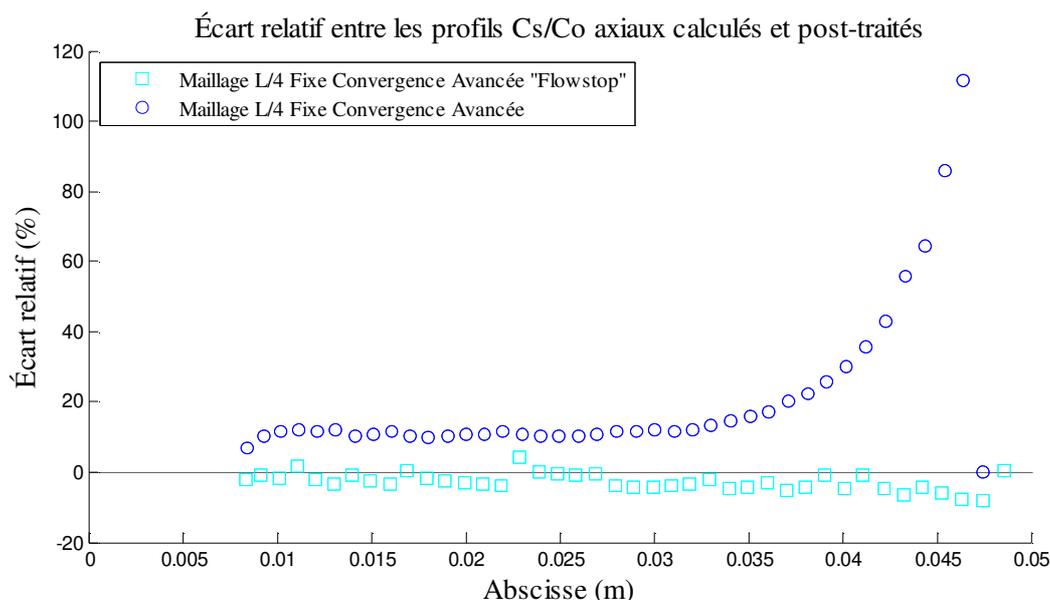


Figure V-6 : Écart relatif entre les profils calculés et les profils post-traités présentés dans la figure précédente, tracés respectivement avec l'option « Flowstop » avec les carrés bleus clairs et sans l'option « Flowstop » avec les cercles bleus foncés.

Ainsi, pour les modèles présentés, même si le post-traitement ne fournit pas exactement le même profil de concentration dans le solide que les données directement issues du calcul, l'écart relatif est néanmoins faible, et le profil obtenu par le post-traitement reste assez pertinent pour comparer les courbes et juger de la validité du modèle pour la modélisation de la ségrégation. C'est pourquoi, par la suite, on exploitera et on comparera uniquement des profils post-traités.

On mène donc les comparaisons par étapes, de la même manière que pour la partie thermique et hydrodynamique : on compare les résultats obtenus avec des maillages fixes, puis avec un maillage *Overset Mesh* fixe pour caractériser l'influence liée au recouvrement des maillages, puis avec un maillage mobile. Les comparaisons réalisées entre les modèles avec un maillage fixe sont présentées

en Figure V-7. Sur cette figure, quatre profils de concentration normalisée obtenus dans la phase solide en fin de tirage et post-traités selon la méthode validée précédemment sont comparés entre eux et avec la solution calculée par Stelian. On observe un très bon accord entre les différentes déclinaisons du modèle numérique mis en place, en rappelant que le modèle « Maillage L/4 Fixe Convergence Avancée "Flowstop" » peut être pris comme référence pour la comparaison avec les autres modèles. Pour tous ces profils, on a bien une augmentation lente et assez régulière de la concentration le long de l'axe sur la majorité de la longueur du barreau, puis une augmentation plus brusque et plus importante sur le dernier cinquième du barreau. Ces profils sont par ailleurs proches de la solution calculée par Stelian, et ont bien la même allure.

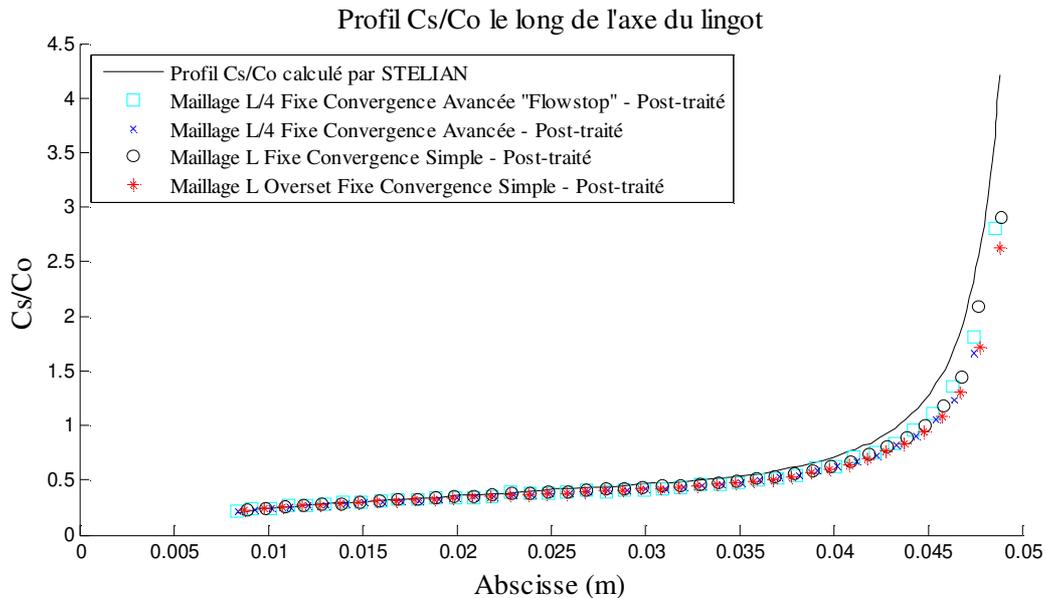


Figure V-7 : Comparaison des profils axiaux de concentration normalisée dans la phase solide en fin de tirage, pour quatre cas simulés avec des maillages fixes, fins ou grossiers (respectivement « Maillage L/4 » et « Maillage L ») et avec des critères de convergence plus ou moins stricts (respectivement « Convergence avancée » et « Convergence simple »). Le profil calculé par Stelian est tracé avec la ligne noire.

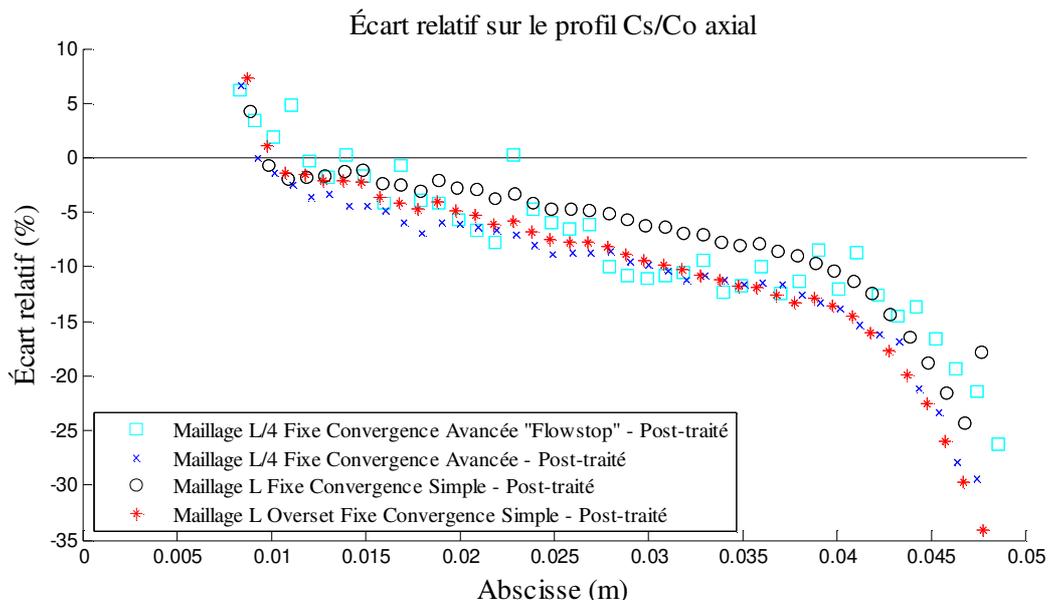


Figure V-8 : Comparaison des écarts relatifs sur les profils axiaux de concentration, par rapport au profil calculé par Stelian. Les quatre cas faisant varier les paramètres de taille de maille (maillage

fixe), les critères de convergence et l'option « Flowstop » sont tracés, avec la légende en accord avec la figure précédente.

Ces résultats montrent aussi que le maillage grossier de taille L permet finalement d'obtenir des profils de relativement bonne qualité au vu de la discrétisation de la couche limite solutale. Toutefois, malgré ce résultat inattendu, une discrétisation fine de la couche limite solutale permet également d'améliorer la précision sur le champ de vitesse, d'améliorer la forme et la position de l'interface solide/liquide, et permet d'accéder correctement à d'autres valeurs utiles pour d'autres approches de modélisation, comme celles s'appuyant sur le frottement à la paroi [Chatelain et al., 2017]. Il y a donc un réel intérêt à mettre en place une zone maillée finement dans la zone de l'interface.

La Figure V-8 présente les écarts relatifs entre chaque profil et la solution de Stelian. On constate que les profils de concentration présentent un écart relatif plutôt faible entre eux : par exemple, pour deux modèles comparables, avec un maillage de taille L et avec maillage fixe (profil tracé avec les cercles noirs) ou avec maillage *Overset Mesh* fixe (profil tracé avec les étoiles rouges), il y a 5% d'écart relatif au maximum (sauf pour les quatre derniers points correspondant à la fin du tirage, pour lesquels l'écart est un peu plus important). Cet écart montre bien que la méthode introduisant le raccordement de plusieurs maillages pour réaliser le calcul n'a qu'une faible influence sur la modélisation de la ségrégation. Les résultats obtenus présentent des écarts relatifs un peu plus importants par rapport à la solution de Stelian : on peut supposer que ces écarts peuvent être en partie expliqués grâce aux différences dans l'approche de la modélisation de la ségrégation. En effet, la méthode proposée dans cette étude repose sur une bonne évaluation du terme source en impuretés : il doit être calculé correctement pour éviter tout ajout ou toute perte artificielle sur la quantité d'impuretés, tout au long de la simulation. Une légère imprécision sur le calcul de ce terme se cumulerait au fur et à mesure des itérations temporelles, et pourrait expliquer une partie des écarts obtenus par rapport à l'approche proposée par Stelian. Il est possible également que de légères différences dans les conditions initiales ou les paramètres du modèle, en lien avec les approches différentes, expliquent l'écart relatif observé entre les résultats de Stelian et du modèle présenté.

Pour conclure, malgré quelques écarts entre les différents profils comparés, les résultats quantitatifs obtenus sont satisfaisants. On peut considérer que la modélisation de la ségrégation proposée ici donne des résultats pertinents et valides, dans le cas des modèles avec maillages fixes. Si l'on se réfère à la description de l'implémentation du terme source donnée en partie IV.B, on peut donc considérer que le modèle calcule correctement le terme A de rejet de soluté engendré par le changement de phase, ainsi que l'évaluation de la concentration à l'interface utilisée pour le rejet de soluté, notée Cl_{old_int} . Les deux termes de correction du rejet liés à la translation du maillage, en revanche, restent à valider par une étude avec le maillage glissant.

Après cette comparaison quantitative pour des données obtenues le long de l'axe de symétrie du système, on peut comparer qualitativement les champs de concentration. Sur la Figure V-9, on présente les cartographies de la norme de la vitesse et de concentration calculées par Stelian (a), pour une position d'interface solide/liquide déterminée ($x = 2\text{ cm}$). On présente également les champs de concentration, pour la même position de l'interface, obtenus avec le modèle à maillage fixe et fin et avec l'option « Flowstop » (b), avec le modèle avec maillage *Overset Mesh* fixe (c) et avec le modèle avec le maillage *Overset Mesh* glissant (d). On rappelle que les champs de la norme de la vitesse correspondants obtenus avec ces modèles sont présentés en partie III.B (voir Figure III-15) et sont qualitativement en accord avec le champ de vitesse calculé par Stelian.

Comme on l'a constaté pour la Figure III-15, on constate à nouveau que l'interface solide/liquide atteint la position $x = 2\text{ cm}$ à l'instant $t = 13000\text{ s}$ pour le cas (b) et à l'instant $t = 12000\text{ s}$ pour les cas (c) et (d), en raison du retard accumulé au transitoire initial. On retrouve également, dans le cas de la figure (c), une zone de transition entre la phase solide et la phase liquide plus étalée (le maillage grossier à l'interface contraint la valeur du paramètre ε , qui influe sur l'épaisseur de la zone de transition). Cet étalement, qui impacte la solution obtenue, peut expliquer les légères différences avec la solution du modèle à maillage fixe et fin, et illustre l'intérêt d'une discrétisation fine pour améliorer la définition de l'interface solide/liquide.

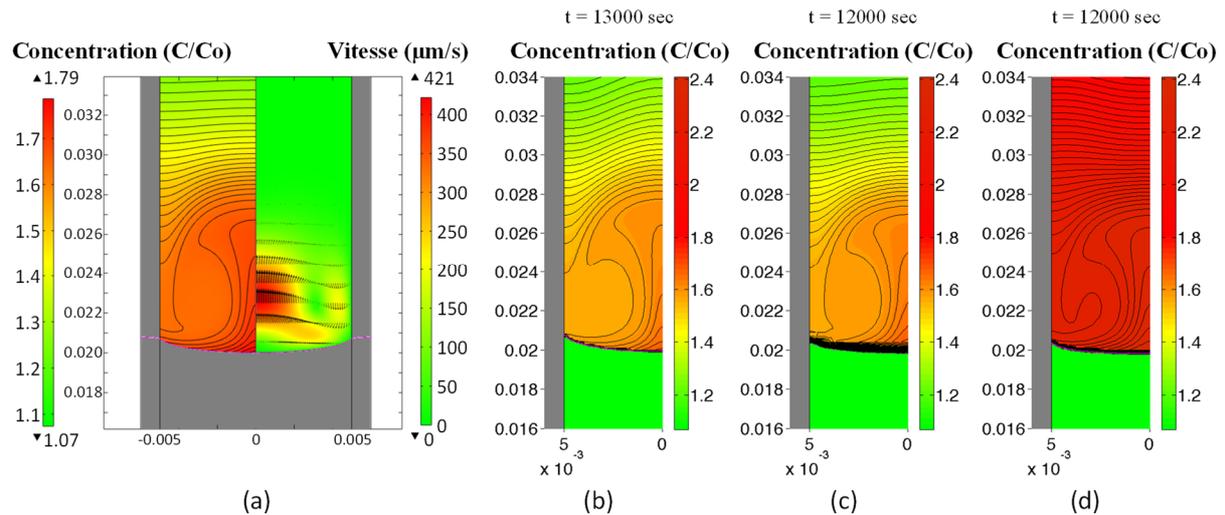


Figure V-9 : La figure (a) présente les champs de concentration et de la norme de la vitesse dans la phase liquide obtenus par Stelian lorsque l'interface solide/liquide est située à $x = 2$ cm. Les figures (b), (c) et (d) présentent les champs de concentration calculés respectivement pour les cas « Maillage L/4 Fixe Convergence Avancée "Flowstop" », « Maillage L Fixe Overset Fixe Convergence Simple » et « Maillage L Overset Glissant Convergence Simple », lorsque l'interface solide/liquide est à $x = 2$ cm. Les figures (a), (b), (c) et (d) sont tracées avec la même échelle.

Les données présentées dans cette figure n'ont pas été post-traitées, seules les données dans la partie liquide peuvent donc être comparées correctement aux données de Stelian. Qualitativement, le champ de concentration obtenu dans le cas avec maillage fixe et fin et avec « Flowstop » est correct, et présente bien des valeurs maximales en accord avec les champs calculés par Stelian. Ainsi, la modélisation proposée est donc bien validée sur une configuration qui servira de référence pour la suite (bien qu'elle soit coûteuse à mettre en place). On constate également que le champ de concentration est qualitativement correct avec le maillage *Overset Mesh* fixe (c), malgré l'épaisseur de la zone de transition, ce qui permet de valider l'implémentation d'une partie des termes sources pour le rejet de soluté, et de valider l'utilisation de la méthode de raccordement des maillages. En revanche, pour le cas avec maillage *Overset Mesh* glissant (d), même si la distribution des impuretés semble qualitativement bonne, les valeurs du champ de concentration dans la phase liquide ne correspondent pas bien. Cela montre que, même si les effets convectifs sont bien reproduits, le rejet de soluté lié à la solidification est surévalué dans le cas de la méthode de maillage glissant. Afin de vérifier quantitativement ce résultat, on trace pour ce cas, en Figure V-10, le profil axial de concentration dans la phase solide.

Sur cette Figure V-10, on trace le profil de concentration obtenu dans la phase solide avec le modèle mettant en œuvre la méthode de maillage glissant, post-traité selon la méthode décrite précédemment. La solution calculée par Stelian est tracée pour donner un point de comparaison. On constate que le profil de concentration obtenu ne présente pas le comportement attendu, avec un écart relatif par rapport à la solution de Stelian allant jusqu'à 163%. On observe bien une augmentation progressive de la concentration le long de l'axe du barreau, et une augmentation un peu plus rapide sur la dernière section du barreau, mais on observe surtout qu'il y a un rejet de matière trop important tout au long du tirage pour ce modèle. Comme certaines parties du terme source ont pu être validées précédemment, cette surévaluation du terme source ne peut être imputée qu'aux termes de corrections B et C (voir partie IV.B) liés à la translation du maillage. Au vu de la difficulté à calculer correctement les gradients de concentration dans la zone de l'interface, on peut supposer que l'amélioration de ce point pourrait contribuer à corriger ce rejet de matière. Comme dans cette configuration, le terme source rejette trop d'impuretés dans la phase liquide, il y a non conservation du soluté. Comme le rejet de matière est effectué tout au long du tirage, on a une accumulation à chaque pas de temps, ce qui conduit bien à l'augmentation observée de l'écart relatif par rapport à la solution de référence au fur et à mesure de l'avancée de la simulation.

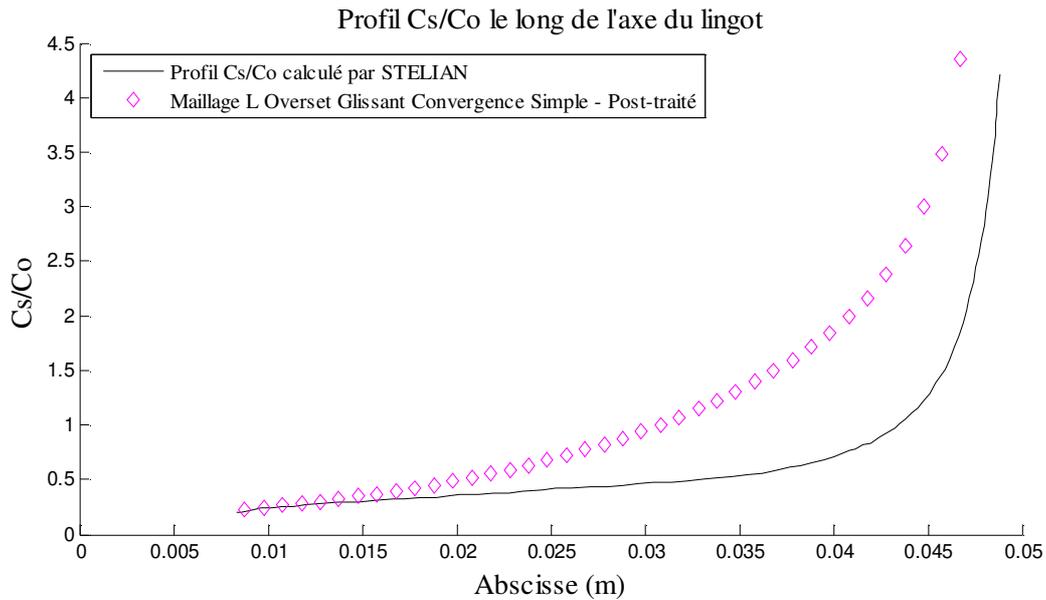


Figure V-10 : Comparaison du profil axial de concentration normalisée dans la phase solide en fin de tirage, obtenu avec le modèle utilisant le maillage glissant (losanges violets), avec le profil calculé par Stelian (ligne noire).

Pour conclure, on pourra retenir de cette étude que la modélisation de la ségrégation proposée donne des résultats valides avec des modèles à maillage fixe. Les résultats peuvent toutefois être améliorés en annulant complètement les vitesses dans la phase solide. Si l'option « Flowstop » n'est pas compatible avec le modèle mis en place, on peut envisager de modifier le seuil limitant la valeur de la résistance visqueuse dans la phase solide (en contrepartie d'une convergence plus difficile pour les calculs), afin de diminuer l'influence de l'écoulement résiduel dans la partie solide. L'étude sur l'influence de cette modélisation de la ségrégation sur le coût de calcul a été présentée en partie III.B, en comparaison avec les résultats portant sur la thermique. Il ressort de ces comparaisons que l'utilisation de l'option « Temporary Storage Retained », nécessaire dans cette implémentation de la ségrégation, entraîne un surcoût pour le calcul. Néanmoins, la mise en place de la méthode de maillage glissant contrebalance ce surcoût et permet d'améliorer les performances, en termes de nombre d'itérations numériques et de temps de calcul, par rapport à l'utilisation d'un maillage fixe et fin.

Par ailleurs, la modélisation de la ségrégation donne des résultats encourageants, mais dont on ne peut pas se satisfaire, dans le cas du modèle avec maillage glissant. En effet, l'approche proposée conduit à un rejet de matière trop important à l'interface, qui ne permet pas la conservation du soluté. Afin d'améliorer ce comportement, il faudrait certainement retravailler, dans le terme source, la définition des termes de correction liés à la translation du maillage. Les autres composantes de ce terme source, en revanche, sont validées dans leur définition et dans leur implémentation, au vu des résultats présentés dans cette partie. Afin d'améliorer les problèmes liés à la conservation du soluté mis en évidence dans le cas de la méthode de maillage glissant, la partie suivante proposera de nouvelles formulations et implémentations du terme source dans le logiciel Star-CCM+, utilisé pour ces simulations.

B. Pistes de développements pour améliorer la conservation du soluté

Comme on l'a vu dans la partie précédente, la modélisation de la ségrégation développée dans le Chapitre IV donne des résultats plutôt satisfaisants tant que le maillage reste fixe, même avec la méthode *Overset Mesh*. En revanche, on constate que la mise en place d'un maillage glissant mène à une surestimation du rejet de soluté. Pour améliorer la conservation du soluté, il pourrait être intéressant d'intégrer le rejet de soluté directement dans les équations résolues par le solveur, ou tout au moins l'exprimer sous une forme plus proche des expressions résolues par le solveur. En effet, la modélisation de la solidification, qui a été validée dans le Chapitre III, montre que l'équation d'énergie

(Équation (II-8)) est résolue correctement ; c'est en particulier le cas pour le terme de rejet de chaleur latente, même en présence d'un maillage mobile. Or, le rejet de chaleur latente dans l'équation d'énergie et le rejet de soluté dans l'équation de transport d'espèce sont assez analogues ; on peut donc penser que si le premier est calculé correctement, on peut trouver une implémentation similaire pour le second qui donnera des résultats satisfaisants. En revanche, les discussions menées avec l'éditeur du logiciel Star-CCM+ n'ont pas permis, à l'heure actuelle, de connaître un moyen de réaliser une telle implémentation, en lien plus direct avec le solveur. Dans cette partie, on va donc développer une autre expression pour l'équation du transport d'espèces, de manière à intégrer le terme source différemment dans l'équation.

Pour ces développements, on propose de reprendre et d'adapter la démarche de Bennon et Incropera qui présente le développement de l'équation à résoudre pour la ségrégation dans le cas d'une méthode enthalpique multiphase [Bennon and Incropera, 1987]. Avec une telle approche pour la ségrégation, les deux phases solides et liquides sont initialement considérées comme deux phases distinctes, chacune régie par une équation distincte de transport d'espèces. À partir de ces équations, Bennon et Incropera donnent un développement permettant d'obtenir une seule équation pour la ségrégation : cette équation est exploitable pour la méthode enthalpique avec l'approche VOF utilisée dans nos simulations. En revanche, les développements qu'ils ont proposés ne prennent pas en compte la vitesse de grille. On propose donc de reprendre et de compléter ce développement, adapté au cas de cette étude, en tenant compte de l'introduction de la vitesse de grille (translation du maillage mobile).

En considérant que les phases liquides et solides ont une masse volumique égale et constante, soit $\rho = \rho_l = \rho_s$, on pose les expressions suivantes :

$$C_l = \rho \phi_l , \quad (V-1)$$

$$C_s = \rho \phi_s = k \cdot C_l , \quad (V-2)$$

avec ϕ_l et ϕ_s les fractions massiques et avec C_l et C_s les concentrations massiques du scalaire considéré, respectivement dans la phase liquide et dans la phase solide, et avec k le coefficient de partage permettant de lier les concentrations de la phase liquide et de la phase solide au niveau de l'interface. En distinguant les équations de transport d'espèces dans la phase liquide et dans la phase solide, et en introduisant la vitesse de grille notée \vec{v}_g (indépendante de la phase), on a :

$$\frac{\partial(\rho \phi_l)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho \phi_l \cdot (\vec{v}_l - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (\rho D_l \vec{\nabla} \phi_l) + S_l , \quad (V-3)$$

$$\frac{\partial(\rho \phi_s)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho \phi_s \cdot (\vec{v}_s - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (\rho D_s \vec{\nabla} \phi_s) + S_s , \quad (V-4)$$

avec \vec{v}_l et \vec{v}_s les vitesses et D_l et D_s les diffusivités du scalaire considéré, respectivement dans la phase liquide et dans la phase solide. S_l et S_s sont les termes sources de chacune de ces équations traduisant la production ou la destruction de matière au sein d'une phase, respectivement liquide ou solide, lorsque les impuretés passent d'une phase à l'autre. Par commodité et pour conserver la cohérence des notations avec le développement de Bennon et Incropera, on notera g_l et g_s les fractions volumiques de chacune des phases, respectivement liquide et solide, définies dans notre cas telles que :

$$g_l = (1 - \alpha) , \quad (V-5)$$

$$g_s = \alpha , \quad (V-6)$$

avec α la fraction volumique de la phase solide, telle que définie dans la partie II.A. En considérant que le scalaire passe d'une phase à l'autre avec conservation du soluté, c'est-à-dire :

$$g_l S_l + g_s S_s = 0 , \quad (V-7)$$

et en combinant les équations (V-3) et (V-4) en accord avec les fractions volumiques de chaque phase, on obtient l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho g_l \phi_l + \rho g_s \phi_s)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho g_l \phi_l \cdot \vec{v}_l + \rho g_s \phi_s \cdot \vec{v}_s) - \vec{v} \cdot (\rho g_l \phi_l \cdot \vec{v}_g + \rho g_s \phi_s \cdot \vec{v}_g) \\ = \vec{v} \cdot (\rho g_l D_l \vec{v} \phi_l + \rho g_s D_s \vec{v} \phi_s). \end{aligned} \quad (V-8)$$

On définit les expressions de la diffusivité D du matériau et de la concentration moyenne $\langle C \rangle$, qui seront identifiées par la suite dans les équations :

$$D = g_l D_l + g_s D_s, \quad (V-9)$$

$$\langle C \rangle = \rho \langle \phi \rangle = \rho g_l \phi_l + \rho g_s \phi_s, \quad (V-10)$$

avec $\langle \phi \rangle$ la fraction massique moyenne du scalaire considéré. On définit également la vitesse moyenne \vec{v} par l'expression suivante :

$$\vec{v} = g_l \cdot \vec{v}_l + g_s \cdot \vec{v}_s. \quad (V-11)$$

En se référant aux développements proposés dans la littérature [Bennon and Incropera, 1987], et en les adaptant pour tenir compte de la vitesse de grille, l'équation (V-8) peut s'écrire sous une forme strictement équivalente :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \langle \phi \rangle)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\rho \langle \phi \rangle \cdot \vec{v}) - \vec{v} \cdot (\rho \langle \phi \rangle \cdot \vec{v}_g) \\ = \vec{v} \cdot (\rho D \vec{v} \langle \phi \rangle) + \vec{v} \cdot (\rho g_l D_l \vec{v} (\phi_l - \langle \phi \rangle)) + \vec{v} \cdot (\rho g_s D_s \vec{v} (\phi_s - \langle \phi \rangle)) \\ - \vec{v} \cdot (\rho g_l \cdot (\phi_l - \langle \phi \rangle) (\vec{v}_l - \vec{v})) - \vec{v} \cdot (\rho g_s \cdot (\phi_s - \langle \phi \rangle) (\vec{v}_s - \vec{v})), \end{aligned} \quad (V-12)$$

avec une relation supplémentaire pour remplacer les deux derniers termes de l'équation (V-12) :

$$\begin{aligned} -\vec{v} \cdot (\rho g_l \cdot (\phi_l - \langle \phi \rangle) (\vec{v}_l - \vec{v})) - \vec{v} \cdot (\rho g_s \cdot (\phi_s - \langle \phi \rangle) (\vec{v}_s - \vec{v})) \\ = -\vec{v} \cdot (\rho g_s \cdot (\phi_l - \phi_s) (\vec{v} - \vec{v}_s)). \end{aligned} \quad (V-13)$$

Afin de pouvoir simplifier le terme du second membre de la relation (V-13), on a l'expression suivante :

$$\rho g_s \cdot (\phi_l - \phi_s) = \rho (\phi_l - \langle \phi \rangle). \quad (V-14)$$

En considérant que la vitesse dans la phase solide est nulle, soit $\vec{v}_s = \vec{0}$, en considérant qu'on peut négliger la diffusion dans la phase solide, soit $D = g_l D_l$, et en introduisant les relations (V-13) et (V-14) dans l'équation (V-12), on obtient finalement l'équation suivante :

$$\frac{\partial(\langle C \rangle)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\langle C \rangle \cdot (\vec{v} - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (D \vec{v} \langle C \rangle) + \vec{v} \cdot (D \vec{v} (C_l - \langle C \rangle)) - \vec{v} \cdot ((C_l - \langle C \rangle) \cdot \vec{v}). \quad (V-15)$$

En passant les termes du second membre de l'équation dans le premier membre, on peut encore simplifier cette expression et l'écrire sous la forme strictement équivalente suivante :

$$\frac{\partial(\langle C \rangle)}{\partial t} + \vec{v} \cdot (C_l \cdot \vec{v} - \langle C \rangle \cdot \vec{v}_g) = \vec{v} \cdot (D \vec{v} C_l). \quad (V-16)$$

Cette équation, qui prend en compte la diffusion dans la phase liquide, qui tient compte de la vitesse de grille, et qui, par sa forme, est compatible pour une utilisation avec une méthode enthalpique VOF, est l'équation que l'on souhaite résoudre. En effet, le premier terme, qui décrit la variation locale de concentration moyenne par rapport au temps, contient implicitement le rejet de soluté lié à la solidification de la phase. Le second terme décrit le transport d'espèces dans la phase liquide par convection, en tenant compte de la vitesse de grille, et le dernier terme décrit le transport d'espèces dans la phase liquide par diffusion.

Par ailleurs, si l'on considère que la vitesse de grille est nulle ($\vec{v}_g = \vec{0}$) et qu'on peut négliger le dernier terme de cette équation (V-16) décrivant les phénomènes de diffusion, on retrouve bien une équation classique donnée dans la littérature pour la modélisation de la ségrégation [Bellet et al., 2009 ; Boussaa, 2014] :

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \vec{v} \cdot (C_l \cdot \vec{v}) = 0. \quad (V-17)$$

Comme cette équation néglige les phénomènes de diffusion, notamment la diffusion dans la phase liquide, alors que ces phénomènes sont pris en compte dans les simulations de cette étude, on gardera l'équation (V-16) pour la suite.

On notera que cette équation fait intervenir les deux variables $\langle C \rangle$ et C_l , on dira donc que l'équation (V-16) est sous forme mixte. Ce point est important pour le lien avec l'implémentation dans le logiciel Star-CCM+, qui ne propose que l'ajout d'une équation de scalaire passif écrite sur une seule variable (voir Équation (IV-1)). On va donc proposer deux expressions équivalentes à l'équation (V-16), l'une exprimée seulement en fonction de C_l et l'autre exprimée seulement en fonction de $\langle C \rangle$.

On peut retrouver la forme de cette équation (IV-1), qui ne fait intervenir que la variable C_l , en rappelant que $g_s = \alpha$ et en introduisant l'expression suivante dans l'équation (V-16) :

$$\langle C \rangle = (1 + \alpha \cdot (k - 1)) \cdot C_l. \quad (V-18)$$

On obtient alors l'équation (V-19), strictement équivalente à l'équation (V-16), mais écrite avec une seule variable. On dira alors que l'équation (V-19) est écrite sur la variable C_l :

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} + \vec{v} \cdot (C_l \cdot (\vec{v} - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (D \vec{\nabla} C_l) + \left(\frac{\partial(\alpha \cdot C_l)}{\partial t} - \vec{v} \cdot (\alpha \cdot C_l \cdot \vec{v}_g) \right) \cdot (1 - k), \quad (V-19)$$

avec le dernier terme du second membre correspondant au terme source S de l'équation (IV-1), traduisant le rejet de soluté à l'interface à ajouter à l'équation de transport d'espèces écrite sur la variable C_l , et dont on a proposé une modélisation en partie IV.B. Pour faciliter la comparaison terme à terme avec l'équation (IV-10), on peut utiliser le développement suivant (valable dans le cadre de cette étude en supposant que $\vec{v}_g = d/\Delta t \vec{x}$) :

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial(\alpha \cdot C_l)}{\partial t} - \vec{v} \cdot (\alpha \cdot C_l \cdot \vec{v}_g) \right) \cdot (1 - k) \\ &= \frac{\partial(\alpha \cdot C_l)}{\partial t} \cdot (1 - k) + \frac{\partial \alpha}{\partial x} \cdot C_l \cdot \frac{d}{\Delta t} \cdot (k - 1) + \alpha \cdot \frac{\partial C_l}{\partial x} \cdot \frac{d}{\Delta t} \cdot (k - 1). \end{aligned} \quad (V-20)$$

Ainsi, on retrouve bien, au second membre de cette équation, les trois termes qui sont modélisés et approximés respectivement par les termes A, B et C de l'équation (IV-10), tel que décrit précédemment en partie IV.B.

En revanche, pour implémenter cette formulation du problème dans le logiciel Star-CCM+ et déclarer correctement ce terme source, il faut pouvoir accéder aux dérivées temporelles calculées par

le logiciel, en particulier aux dérivées temporelles du champ de fraction solide α et du champ de concentration C_l . Le logiciel ne permet pas en l'état à l'utilisateur d'accéder aux valeurs de ces variables ou de les utiliser pour déclarer un terme source selon la définition de l'équation (V-19). En raison de cet inconvénient, on ne va pas retenir cette formulation : on s'intéresse donc à la formulation suivante, développée en fonction de $\langle C \rangle$.

Pour obtenir cette seconde formulation, on reprend l'équation (V-15) et on remplace les variables C_l grâce à l'équation (V-18). On obtient alors l'équation (V-21), strictement équivalente aux équations (V-16) et (V-19), mais cette fois écrite sur la variable $\langle C \rangle$:

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\langle C \rangle \cdot (\vec{v} - \vec{v}_g)) = \vec{v} \cdot (D\vec{v}\langle C \rangle) + S, \quad (V-21)$$

avec S le terme source regroupant les deux derniers termes du second membre de l'équation (V-15), qui s'écrit alors de la manière suivante :

$$S = \vec{v} \cdot \left[\left(\frac{\alpha \cdot (k-1)}{1 + \alpha \cdot (k-1)} \langle C \rangle \right) \cdot \vec{v} \right] - \vec{v} \cdot \left[D\vec{v} \left(\frac{\alpha \cdot (k-1)}{1 + \alpha \cdot (k-1)} \langle C \rangle \right) \right]. \quad (V-22)$$

On constate bien que cette formulation permet d'obtenir un terme source qui ne fait pas intervenir de dérivées temporelles mais des gradients spatiaux. Ces derniers sont bien accessibles et utilisables dans le logiciel Star-CCM+. Ainsi, plutôt que de prendre le terme source de l'équation (V-19) et de retrouver une modélisation très proche de celle qui a été développée dans le Chapitre IV, et qui aboutirait sur les mêmes inconvénients (l'utilisation de dérivées temporelles dans le terme source), on peut utiliser le terme source (V-22), lié à l'équation (V-21) écrite sur la variable $\langle C \rangle$. Pour utiliser cette équation, il faut changer la variable dans l'équation de scalaire passif proposée par le logiciel Star-CCM+ (voir équation (IV-1)) et utiliser $\langle C \rangle$ (on utilisait C_l dans le Chapitre IV).

L'implémentation du terme source (V-22) dans le logiciel Star-CCM+, en lien avec la résolution de l'équation (V-21) écrite sur la variable $\langle C \rangle$, est réalisée de la manière suivante :

$$S = \text{div} \left(\vec{v} \cdot \rho \langle \phi \rangle \cdot \left(\frac{\alpha \cdot (k-1)}{1 + \alpha \cdot (k-1)} \right) \right) - \text{div} \left(\rho D \cdot \left(\langle \phi \rangle \cdot \overrightarrow{\text{grad}} \left(\frac{\alpha \cdot (k-1)}{1 + \alpha \cdot (k-1)} \right) + \frac{\alpha \cdot (k-1)}{1 + \alpha \cdot (k-1)} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}(\langle \phi \rangle) \right) \right), \quad (V-23)$$

avec les opérateurs div et $\overrightarrow{\text{grad}}$, respectivement les opérateurs « divergence » et « gradient », disponibles dans le logiciel. Par rapport à l'expression (V-22), le second terme a été scindé en deux parties pour faire apparaître $\overrightarrow{\text{grad}}(\langle \phi \rangle)$: en effet, l'option « Temporary Storage Retained » du logiciel permet d'accéder directement à cette valeur, calculée ainsi plus précisément. Le gradient portant sur le champ de fraction solide α , qui n'est pas disponible de cette manière, est obtenu en appliquant simplement l'opérateur « gradient » à l'expression détaillée ci-dessus.

D'après la documentation du logiciel [CD-adapco and Siemens, 2016], les valeurs obtenues par ces opérateurs div et $\overrightarrow{\text{grad}}$ disponibles pour l'utilisateur peuvent être différentes des valeurs calculées avec ces opérateurs par le solveur. En effet, ces opérateurs sont, dans l'un et l'autre cas, calculés avec des approches différentes. Or, si les équations (V-16) et (V-21) sont strictement équivalentes d'un point de vue mathématique, grâce aux termes qui se compensent parfaitement, cette différence de définition entre les opérateurs utilisés par le solveur et les opérateurs utilisés pour la définition du terme source peut amener les termes en question à ne plus parfaitement se compenser ; cette différence dans la définition des opérateurs peut ainsi être problématique.

Pour tester la validité de cette approche, on considère la configuration de Stelian dans un cas simplifié : sans maillage glissant (vitesse de grille $\vec{v}_g = \vec{0}$), et en négligeant la diffusion dans la phase solide, en accord avec les développements proposés. L'implémentation décrite ci-dessus a été adaptée et mise en place dans le logiciel Star-CCM+ pour ce modèle. On notera que les opérateurs div et $grad$ n'étant disponibles dans Star-CCM+ qu'avec des modèles 2D et non avec les modèles 2D axisymétriques, ce cas de simulation a également été adapté en modèle 2D simple. Avec cette implémentation et ces paramètres, le calcul diverge immédiatement et ne donne pas de résultat.

Pourtant, comme on l'a vu précédemment, le cas avec maillage fixe et calculé avec le terme source modélisé à la partie précédente donne de bons résultats. C'est donc cette nouvelle implémentation qui est à l'origine de la divergence du calcul, et non la configuration simulée. Les termes introduits par le terme source (V-22) et censés compenser les termes de convection et de diffusion de l'équation (V-21), pour qu'elle soit équivalente à l'équation sous forme mixte (V-16), ne les compensent probablement pas correctement en raison de la définition des opérateurs utilisés, ce qui entraîne la divergence du calcul.

Pour améliorer cela, il faudrait pouvoir implémenter directement le rejet de scalaire dans les équations résolues par le solveur, idéalement grâce à l'équation sous forme mixte (V-16). De cette manière, la dérivée temporelle du champ de fraction solide α pourrait être calculée correctement au sein du solveur, ce qui ne peut être fait actuellement par manque d'accès au solveur pour les utilisateurs. Pourtant, on peut légitimement penser que cette implémentation serait réalisable et viable : en effet, l'équation d'énergie (Équation (II-8)) a une forme assez analogue à l'équation proposée ici pour le transport d'espèces, avec son terme de dérivée temporelle qui fait intervenir l'enthalpie totale, faisant elle-même intervenir la fraction solide α (voir Équation (II-9)). Comme on a montré dans le Chapitre III que la solidification, dépendant du rejet de chaleur latente et donc de la variation de volume solidifié par rapport au temps, était correctement calculée par le solveur, on peut supposer qu'une implémentation analogue pour le transport d'espèces permettrait de calculer correctement le rejet de scalaire à l'interface solide/liquide. Par ailleurs, le rejet de chaleur latente pour la partie thermique et solidification étant correctement pris en compte en présence d'un maillage glissant, on peut légitimement supposer, en se reposant encore sur l'analogie entre les équations régissant la thermique et le transport d'espèces, que le rejet de scalaire passif serait correctement pris en compte avec la méthode de maillage glissant. Cette perspective résoudrait du même coup le mauvais conditionnement de l'implémentation proposée dans cette partie, la surévaluation du rejet d'impuretés constaté en partie V.A en présence du maillage glissant, et les pertes de performances liées à l'utilisation de l'option « Temporary Storage Retained », qui ne serait alors plus nécessaire si l'implémentation est réalisée directement au sein du solveur. On pourrait ainsi avoir une implémentation permettant de prendre en compte une vitesse de grille non nulle, et éventuellement, de conserver les termes traduisant la diffusion dans la phase solide. Cette perspective nécessite cependant d'avoir un accès au code interne du logiciel, afin de pouvoir intégrer les modifications proposées. À l'heure actuelle, un simple utilisateur ne peut pas avoir un tel accès : dans cette optique, une collaboration avec les développeurs du logiciel semble donc nécessaire.

Pour conclure, dans cette partie, on a présenté les développements permettant de mettre en place une implémentation alternative du problème de transport d'espèces, afin de corriger les problèmes observés dans la partie précédente. On a montré qu'on ne peut pas modifier la forme de l'équation de transport de scalaire passif résolue par le logiciel Star-CCM+, et que l'accès à certaines valeurs est limité ou impossible, en particulier l'accès aux dérivées temporelles des variables du logiciel, même avec l'option « Temporary Storage Retained ». On a alors proposé une implémentation permettant de s'affranchir de ces limitations, en identifiant un terme source utilisant plutôt les gradients spatiaux des variables concernées. On a également montré que l'ajout d'un tel terme source n'est pas suffisant pour résoudre les problèmes rencontrés, dans la mesure où les opérateurs mathématiques mis à disposition de l'utilisateur ne sont pas ceux qui sont utilisés par le solveur du logiciel, ce qui entraîne la divergence des calculs effectués. En revanche, une perspective d'amélioration du logiciel est proposée afin de résoudre les problèmes rencontrés avec la modélisation de la ségrégation, corroborée par la validation de la modélisation de la thermique et par l'analogie qui existe entre les équations de la thermique et du transport d'espèces.

Conclusion

Les travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent dans un domaine scientifique encore très actuel bien que le champ de recherche ait été ouvert il y a plusieurs dizaines d'années. Dans le contexte de l'élaboration de cellules photovoltaïques en silicium à l'aide de procédés de solidification dirigée, les simulations numériques ont une grande utilité : elles permettent d'étudier les phénomènes physiques mis en jeu et leurs couplages, elles permettent de prototyper des fours ou des dispositifs de brassage intégrés dans les fours, et permettent également de réduire les coûts en limitant et en améliorant les prototypes expérimentaux. On peut donc légitimement penser que ces simulations seront encore très utilisées dans les années à venir. Cependant, en raison de l'aspect multi-échelles du problème et de la mobilité de l'interface solide/liquide, les simulations demandent des ressources importantes, voire même prohibitives dans le cas de simulations complètes de four en 3D (de l'ordre de plusieurs mois de calcul). Il y a donc un réel besoin d'améliorer les méthodes de simulation utilisées afin d'augmenter leurs performances, pour favoriser les recherches futures.

Pour répondre à ce besoin de performances accrues, on propose dans ces travaux d'améliorer la méthode enthalpique, qui est très utilisée pour la simulation de la solidification dirigée. Cette méthode a notamment un désavantage connu : elle nécessite la mise en place d'un maillage dense sur l'ensemble du domaine de calcul. On propose de s'affranchir de cet inconvénient en introduisant une méthode originale de maillage glissant, à l'aide de la technologie « Overset Mesh », aussi connue sous le nom de maillage chimère. Cette technologie, appliquée à la simulation de la solidification par méthode enthalpique, permet de réaliser le suivi de front avec un effet de prédiction sur la position de l'interface et d'optimiser la densité du maillage sur le domaine. Grâce à cela, les simulations numériques sont plus efficaces : le coût de calcul diminue sensiblement.

Dans un premier temps, on a présenté la mise en équations permettant de modéliser la thermique et l'hydrodynamique lors du processus de solidification dirigée. Le fonctionnement détaillé de la méthode de maillage glissant a été introduit, et les paramètres de deux modèles distincts ont été présentés : le modèle de Stefan et le modèle de Stelian. Le modèle de Stefan est un cas académique de solidification en régime purement diffusif, pour lequel on a une solution analytique. Le modèle dit « de Stelian » est issu de ses travaux de simulation numérique, publiés dans la littérature : on a ainsi accès à des résultats issus de simulations numériques dans une configuration Bridgman vertical en présence de convection naturelle, avec modélisation de la solidification et de la ségrégation par une méthode multi-domaines à maillage déformable. Cette configuration de calcul et ces résultats sont suffisamment bien documentés pour qu'on puisse considérer ces calculs comme une référence pour réaliser des comparaisons. Ces travaux de thèse visent donc à reproduire ces deux cas de référence à l'aide de la méthode enthalpique agrémentée de la méthode originale de maillage glissant.

Dans un second temps, les résultats obtenus sur le cas de Stefan sont présentés. Ces résultats de simulation, en solidification seulement, montrent un très bon accord pour la position de l'interface au cours du temps et pour un profil de température obtenu à $t = 40$ s, par comparaison à la solution analytique. On valide donc la capacité de cette méthode de maillage mobile à prendre en compte la modélisation de la solidification et plus particulièrement le rejet de chaleur latente à l'interface. La comparaison avec un modèle densément maillé et sans maillage glissant permet de quantifier le gain de temps et de performance, à précision équivalente dans la zone de l'interface : la méthode proposée permet de réaliser le calcul en près de 47 fois moins d'itérations numériques. Les résultats obtenus sur le second cas, le cas de Stelian, permettent d'identifier une relation entre les paramètres de convergence du modèle et la taille du maillage, qui doivent par conséquent être choisis judicieusement pour assurer la qualité des résultats. Les résultats obtenus confirment également la bonne modélisation de la solidification, grâce à une comparaison probante de la position de l'interface au cours du temps par rapport aux données numériques de Stelian. La comparaison de la norme de la vitesse permet de vérifier que la modélisation de l'hydrodynamique est également satisfaisante. La comparaison avec un modèle densément maillé et sans maillage glissant permet de quantifier les gains en terme de

Conclusion

performance : pour ce modèle, l'utilisation de la méthode de maillage glissant permet de réaliser le calcul en environ 10 fois moins d'itérations numériques.

La modélisation de la ségrégation est proposée dans une partie suivante : le rejet des impuretés à l'interface est pris en compte par un terme source volumique dont l'expression proposée doit être validée. Pour ce calcul du terme source, plusieurs opérations de calcul sont détaillées et ensuite intégrées dans une macro Java qui complète les simulations réalisées avec le code volumes finis Star-CCM+. Ce terme source est notamment scindé en trois parties, dont deux visent à corriger les effets de translation du maillage. Ces derniers s'annulent donc en l'absence de maillage mobile. Un post-traitement des données dans la partie solidifiée est également proposé, afin de reconstituer le profil de concentration dans la phase solide : ce sont en effet les données dans la phase solide que l'on peut comparer aux calculs réalisés par Stelian.

Enfin, dans la dernière partie, on valide le post-traitement proposé malgré son incapacité à prendre en compte la diffusion dans la phase solide. On compare ensuite les résultats obtenus en ségrégation avec le terme source proposé, dans une configuration sans maillage mobile mais avec la technologie « Overset Mesh ». Les résultats sont comparables aux résultats de Stelian et suffisamment proches d'un calcul réalisé avec un maillage simple et densément maillé pour valider l'expression proposée du terme source sans translation du maillage. En effet, la partie principale du terme source, qui calcule le volume solidifié et la quantité de matière associée à rejeter dans la phase liquide, donne des résultats satisfaisants. On confirme également par cette étude le faible impact de la technologie « Overset Mesh » sur la solution obtenue. En revanche, l'étude montre que les termes de correction ajoutés au terme source de soluté ne permettent pas de prendre en compte correctement l'introduction du maillage glissant : en effet, la modélisation de la ségrégation en présence du maillage glissant ne présente pas le comportement attendu et montre que le rejet de soluté est surestimé tout au long du tirage. Par ailleurs, le gain de performance suite à l'introduction de la modélisation de la ségrégation est plus mitigé : en effet, l'expression du terme source avec translation du maillage nécessite l'utilisation de variables qui ne sont accessibles dans le logiciel qu'à travers l'option « Temporary Storage Retained ». Cette option permet à l'utilisateur d'accéder à certaines variables internes utilisées au cours du calcul itératif, mais il y a une contrepartie à cet accès : un temps de calcul et une utilisation de mémoire plus importants. Pour un maillage à précision égale dans la zone de l'interface, le calcul avec ségrégation est tout de même plus efficace en activant l'option « Temporary Storage Retained » et en introduisant le maillage glissant, mais le gain de performance est moins spectaculaire que pour le calcul avec solidification seulement.

Une nouvelle implémentation du terme source est ensuite développée afin d'améliorer la conservation du soluté au cours du calcul. Cette expression alternative utilise des opérateurs de calcul vectoriel, en particulier les opérateurs de gradient et de divergence. Cependant, ces opérateurs mis à disposition de l'utilisateur pour définir les termes sources ne sont pas disponibles dans ce logiciel en configuration 2D axisymétrique et, surtout, ils ne sont pas strictement identiques aux opérateurs mis en œuvre dans le calcul itératif du logiciel. En conséquence, les calculs menés pour tester cette nouvelle implémentation n'ont pas pu converger.

Pourtant, les très bons résultats obtenus sur la modélisation de la solidification montrent que cette approche avec maillage glissant est valide et efficace sur un problème analogue au problème de la ségrégation : en effet, les équations qui régissent le transport de chaleur et le transport d'espèces sont assez similaires. Comme la résolution de la première est complètement intégrée dans le fonctionnement du solveur natif de Star-CCM+, tandis que la deuxième nécessite l'introduction de termes définis par l'utilisateur avec des outils qui se révèlent mal appropriés, on peut très légitimement penser qu'une intégration directe au sein du solveur de la formulation proposée pour la ségrégation permettrait de corriger les erreurs identifiées, tout en évitant de ralentir le calcul pour laisser l'utilisateur accéder aux variables internes au cours du calcul. Le logiciel Star-CCM+ ne permettant pas de modifier directement le fonctionnement du solveur, cette implémentation n'a pas pu être réalisée au cours de ces travaux.

Par ailleurs, il existe un autre désavantage connu de la méthode enthalpique par rapport à la méthode multi-domaines à maillage déformable : le champ de vitesse dans la phase liquide est impacté par l'amortissement des vitesses dans la zone de transition solide/liquide. Or, la méthode de maillage glissant proposée dans ces travaux permet d'optimiser la construction du maillage dans le domaine et de raffiner plus précisément la zone proche de l'interface. Ainsi, grâce à cette méthode, il est possible de limiter l'épaisseur de la zone de transition en densifiant le maillage près de l'interface. Ainsi, on pourrait étudier et vérifier, de manière complémentaire à ces travaux, que la réduction de l'épaisseur de la zone de transition, rendue possible grâce à cette méthode, permet bien de limiter l'impact négatif de l'amortissement des vitesses dans la phase liquide. Cependant, avec le logiciel utilisé, la technologie « Flowstop » permettant d'annuler complètement les vitesses dans la partie solide n'est pas compatible avec le maillage glissant proposé. Il faudrait donc au préalable trouver une solution pour éliminer l'écoulement résiduel dans la phase solide pour pouvoir s'intéresser plus précisément au champ de vitesse pour le modèle développé dans ces travaux.

Pour finir, la thèse récente de Marc Chatelain [Chatelain, 2016] conclue sur l'existence d'un réel besoin aujourd'hui d'une meilleure description de l'interface solide/liquide pour les méthodes enthalpiques, pour réaliser le suivi de front et pour calculer les couches limites et la ségrégation au niveau de l'interface. La méthode proposée dans le présent travail permet d'apporter une réponse prometteuse à ce besoin. Les études menées dans cette thèse peuvent finalement être vues comme une démonstration de faisabilité, en vue de travaux pour une meilleure intégration et implémentation de la méthode afin d'exploiter ses avantages comparatifs. Cette perspective suppose cependant de bénéficier d'un accès plus ou moins privilégié au code interne du logiciel StarCCM+ : sa réussite nécessite donc une collaboration avec les développeurs du logiciel.

Bibliographie

- Avnaim, M.H., Levy, A., Mikhailovich, B., Ben-David, O., Azulay, A., 2016. Comparison of 3D Multi-Domain and Single-Domain Models for the Horizontal Solidification Problem.
- Barat, C., Duffar, T., Dussere, P., Garandet, J.P., 1999. Chemical Segregation in Vertical Bridgman Growth of GaInSb Alloys. *Crystal Research and Technology* 34, 449–456.
[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-4079\(199904\)34:4<449::AID-CRAT449>3.0.CO;2-2](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-4079(199904)34:4<449::AID-CRAT449>3.0.CO;2-2)
- Battaglioli, S., McFadden, S., Robinson, A.J., 2017. Numerical simulation of Bridgman solidification of binary alloys. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 104, 199–211.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.08.030>
- Bellet, M., Combeau, H., Fautrelle, Y., Gobin, D., Rady, M., Arquis, E., Budenkova, O., Dussoubs, B., Duterrail, Y., Kumar, A., Gandin, C.A., Goyeau, B., Mosbah, S., Založnik, M., 2009. Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys. *International Journal of Thermal Sciences* 48, 2013–2016.
<https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2009.07.024>
- Bellmann, M.P., Lindholm, D., Sørheim, E.A., Mortensen, D., M'Hamdi, M., 2013. 3D dynamic simulation of heat transfer and melt flow in an inductively heated crystallization furnace for mc-silicon with PID temperature control. *Journal of Crystal Growth* 383, 119–125.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2013.08.022>
- Bellmann, M.P., Meese, E.A., 2011. Effect of steady crucible rotation on the segregation of impurities in vertical Bridgman growth of multi-crystalline silicon. *Journal of Crystal Growth* 333, 1–6.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2011.08.004>
- Bellmann, M.P., Meese, E.A., Arnberg, L., 2010. Impurity segregation in directional solidified multi-crystalline silicon. *Journal of Crystal Growth* 312, 3091–3095.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2010.07.052>
- Bennon, W.D., Incropera, F.P., 1987. A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems—I. Model formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 30, 2161–2170. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(87\)90094-9](https://doi.org/10.1016/0017-9310(87)90094-9)
- Bianchi, A.-M., Fautrelle, Y., Etay, J., 2004. *Transferts thermiques*. PPUR presses polytechniques.
- Black, A., Medina, J., Piñeiro, A., Dieguez, E., 2012. Optimizing seeded casting of mono-like silicon crystals through numerical simulation. *Journal of Crystal Growth* 353, 12–16.
<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2012.04.033>
- Bourasseau, S., 2015. Contribution to a mesh refinement method based on the adjoint vector for the computation of aerodynamic outputs (Theses). Université Nice Sophia Antipolis.
- Boussaa, R., 2014. Etude de l'influence de la convection naturelle lors de la solidification des métaux purs et des alliages métalliques binaires : expériences et simulations. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1.
- Boutet, G., 1999. Utilisation du diagnostic Seebeck pour le suivi des phénomènes interfaciaux en solidification et fusion dirigée : application à une expérience spatiale. PhD thesis, Université Paris VI.
- Cablea, M., 2015. Numerical and experimental studies of magnetic field effects on solidification of metallurgical silicon for photovoltaic applications. PhD thesis, Grenoble Alpes.

Bibliographie

- Carozzani, T., Gandin, C.-A., Digonnet, H., Bellet, M., Zaidat, K., Fautrelle, Y., 2013. Direct Simulation of a Solidification Benchmark Experiment. *Metall and Mat Trans A* 44, 873–887. <https://doi.org/10.1007/s11661-012-1465-1>
- CD-adapco, 2016. Spotlight on... Overset Meshes Star-CCM+ v11.02.
- CD-adapco, Siemens, 2016. Star-CCM+ 11.02 - User Guide.
- Chan, W.M., 2009. Overset grid technology development at NASA Ames Research Center. *Computers & Fluids* 38, 496–503. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2008.06.009>
- Chatelain, M., 2016. Modélisation des phénomènes de transport solutal et étude d'un dispositif de brassage pour la purification du silicium photovoltaïque. PhD thesis, INSA Lyon.
- Chatelain, M., Albaric, M., Pelletier, D., Botton, V., 2015. Solute segregation in directional solidification: Scaling analysis of the solute boundary layer coupled with transient hydrodynamic simulations. *Journal of Crystal Growth* 430, 138–147. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2015.08.013>
- Chatelain, M., Rhouzlane, S., Botton, V., Albaric, M., Henry, D., Millet, S., Pelletier, D., Garandet, J.P., 2017. Towards wall functions for the prediction of solute segregation in plane front directional solidification. *Journal of Crystal Growth* 475, 55–69. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2017.05.019>
- Cougherty, F.C.B., J. L. Steger, 1985. On applications of chimera grid schemes to store separation.
- Delannoy, Y., 2012. Purification of silicon for photovoltaic applications. *Journal of Crystal Growth, 5th International Workshop on Crystal Growth Technology* 360, 61–67. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2011.12.006>
- Delannoy, Y., Barvinschi, F., Duffar, T., 2007. 3D dynamic mesh numerical model for multi-crystalline silicon furnaces. *Journal of Crystal Growth, Proceedings of the Fifth Workshop on Modeling in Crystal Growth* 303, 170–174. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2006.12.075>
- Delannoy, Y., Zaidat, K., 2012. Modeling the segregation of impurities during solidification with turbulent electromagnetic stirring. Conference: Elaboration by Proceeding Materials 2012, At Beijing, Volume: *Journal of Iron and Steel Research V* 19, p217.
- Derby, J.J., 2016. Fluid dynamics in crystal growth: The good, the bad, and the ugly. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials* 62, 286–301. <https://doi.org/10.1016/j.pcrysgrow.2016.04.015>
- Favier, J., Garandet, J., Rouzaud, A., Camel, D., 1994. Mass-Transport Phenomena During Solidification in Microgravity - Preliminary-Results of the 1st Mephisto Flight Experiment. *J. Cryst. Growth* 140, 237–243. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90517-7](https://doi.org/10.1016/0022-0248(94)90517-7)
- Favier, J.J., Rouzaud, A., 1986. Experimental study of morphological and convective instabilities: The MEPHISTO space program. *Advances in Space Research* 6, 111–122. [https://doi.org/10.1016/0273-1177\(86\)90192-4](https://doi.org/10.1016/0273-1177(86)90192-4)
- Garandet, J.P., Alexander, J.I.D., Corre, S., Favier, J.J., 2001. Composition variations induced by g-jitter in Bridgman growth of Sn–Bi alloys in microgravity. *Journal of Crystal Growth* 226, 543–554. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)01410-5](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)01410-5)

- Garandet, J.P., Corre, S., Kaddeche, S., Alboussière, T., 2000. The influence of convection on the duration of the initial solute transient in alloy crystal growth. *Journal of Crystal Growth* 209, 970–982. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(99\)00630-2](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(99)00630-2)
- Garandet, J.P., Kaupp, N., Pelletier, D., 2012a. The effect of lid driven convective transport on lateral solute segregation in the vicinity of a crucible wall. *Journal of Crystal Growth* 361, 195–200. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2012.09.026>
- Garandet, J.P., Kaupp, N., Pelletier, D., Delannoy, Y., 2012b. Solute segregation in a lid driven cavity: Effect of the flow on the boundary layer thickness and solute segregation. *Journal of Crystal Growth* 340, 149–155. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2011.11.071>
- Garandet, J.P., Praizey, J.P., VanVaerenbergh, S., Alboussiere, T., 1997. On the problem of natural convection in liquid phase thermotransport coefficients measurements. *Phys. Fluids* 9, 510–518. <https://doi.org/10.1063/1.869215>
- Gasperino, D., Bliss, M., Jones, K., Lynn, K., Derby, J.J., 2009. On crucible effects during the growth of cadmium zinc telluride in an electrodynamic gradient freeze furnace. *Journal of Crystal Growth* 311, 2327–2335. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2009.01.141>
- Ghezal, E.A., Nehari, A., Lebbou, K., Duffar, T., 2012. Observation of Gas Bubble Incorporation during Micropulling-Down Growth of Sapphire. *Crystal Growth & Design* 12, 5715–5719. <https://doi.org/10.1021/cg301232r>
- Haddad, F.Z., Garandet, J.P., Henry, D., BenHadid, H., 2001. Solidification in Bridgman configuration with solutally induced flow. *Journal of Crystal Growth, Proceedings of the Third International Workshop on Modeling in Crystal Growth* 230, 188–194. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(01\)01355-0](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(01)01355-0)
- Hisamatsu, S., Matsuo, H., Nakano, S., Kakimoto, K., 2009. Numerical analysis of the formation of Si₃N₄ and Si₂N₂O during a directional solidification process in multicrystalline silicon for solar cells. *Journal of Crystal Growth* 311, 2615–2620. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2009.02.018>
- Hyun Kim, D., Brown, R.A., 1991. Modelling of the dynamics of HgCdTe growth by the vertical Bridgman method. *Journal of Crystal Growth* 114, 411–434. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(91\)90058-D](https://doi.org/10.1016/0022-0248(91)90058-D)
- Iwan, J., Alexander, D., Garandet, J.-P., Favier, J.-J., Lizée, A., 1997. g-Jitter effects on segregation during directional solidification of tin-bismuth in the MEPHISTO furnace facility. *Journal of Crystal Growth* 178, 657–661. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(97\)00141-3](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(97)00141-3)
- Kaddeche, S., Garandet, J.P., Barat, C., Hadid, H.B., Henry, D., 1996. Interface curvature and convection related macrosegregation in the vertical Bridgman configuration. *Journal of Crystal Growth* 158, 144–152. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(95\)00316-9](https://doi.org/10.1016/0022-0248(95)00316-9)
- Kaddeche, S., Garandet, J.P., Henry, D., Hadid, H.B., Mojtabi, A., 2015. On the effect of natural convection on solute segregation in the horizontal Bridgman configuration: Convergence of a theoretical model with numerical and experimental data. *Journal of Crystal Growth* 409, 89–94. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2014.10.009>
- Kaddeche, S., Hadid, H.B., Henry, D., 1994. Macrosegregation and convection in the horizontal Bridgman configuration I. Dilute alloys. *Journal of Crystal Growth* 135, 341–353. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(94\)90761-7](https://doi.org/10.1016/0022-0248(94)90761-7)

Bibliographie

- König-Haagen, A., Franquet, E., Pernot, E., Brüggemann, D., 2017. A comprehensive benchmark of fixed-grid methods for the modeling of melting. *International Journal of Thermal Sciences* 118, 69–103. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2017.04.008>
- Kosec, G., Šarler, B., 2014. Simulation of macrosegregation with mesosegregates in binary metallic casts by a meshless method. *Engineering Analysis with Boundary Elements, Mesh reduction methods for industrial applications* 45, 36–44. <https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2014.01.016>
- Kurz, W., Fisher, D.J., 1986. *Fundamentals of solidification*. Trans Tech Publications.
- Lance, Y., 2014. Contribution à la modélisation de procédés de croissance cristalline, application au procédé Kiropoulos.
- Mitric, A., Duffar, T., Diaz-Guerra, C., Corregidor, V., Alves, L.C., Garnier, C., Vian, G., 2006. Growth of Ga(1-x)InxSb alloys by Vertical Bridgman technique under alternating magnetic field. *Journal of Crystal Growth, The 16th American Conference on Crystal Growth and Epitaxy The 12th Biennial Workshop on OMVPEACCGE 16 OMVPE 12* 287, 224–229. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2005.10.101>
- Mokhtari, F., Bouabdallah, A., Zizi, M., Alemany, A., 2006. Crystal growth in the process of modified Czochralski. *Magnetohydrodynamics* 42.
- Mokhtari, F., Bouabdallah, A., Zizi, M., Hanchi, S., Alemany, A., 2009. Combined effects of crucible geometry and Marangoni convection on silicon Czochralski crystal growth. *Crystal Research and Technology* 44, 787–799. <https://doi.org/10.1002/crat.200800580>
- Motakef, S., 1990. Interference of buoyancy-induced convection with segregation during directional solidification: Scaling laws. *Journal of Crystal Growth* 102, 197–213. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(90\)90903-X](https://doi.org/10.1016/0022-0248(90)90903-X)
- Moudjed, B., Botton, V., Henry, D., Hadid, H.B., Garandet, J.-P., 2014a. Scaling and dimensional analysis of acoustic streaming jets. *Physics of Fluids (1994-present)* 26, 093602. <https://doi.org/10.1063/1.4895518>
- Moudjed, B., Botton, V., Henry, D., Millet, S., Garandet, J.-P., Hadid, H.B., 2014b. Oscillating acoustic streaming jet. *Applied Physics Letters* 105, 184102. <https://doi.org/10.1063/1.4901319>
- Schreck, E., Perić, M., CD-adapco, 2013. *Overset Grids in Star-CCM+: Methodology, Applications and Future Developments*.
- Smith, V.G., Tiller, W.A., Rutter, J.W., 1955. A Mathematical Analysis of Solute Redistribution During Solidification. *Can. J. Phys.* 33, 723–745. <https://doi.org/10.1139/p55-089>
- Sonda, P., Yeckel, A., Daoutidis, P., Derby, J.J., 2005. Hopf bifurcation and solution multiplicity in a model for destabilized Bridgman crystal growth. *Chemical Engineering Science* 60, 1323–1336. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.10.006>
- Stelian, C., Delannoy, Y., Fautrelle, Y., Duffar, T., 2005. Bridgman growth of concentrated GaInSb alloys with improved compositional uniformity under alternating magnetic fields. *Journal of Crystal Growth, Proceedings of the 14th International Conference on Crystal Growth and the 12th International Conference on Vapor Growth and Epitaxy* 275, e1571–e1578. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2004.11.222>

- Stelian, C., Delannoy, Y., Fautrelle, Y., Duffar, T., 2004. Solute segregation in directional solidification of GaInSb concentrated alloys under alternating magnetic fields. *Journal of Crystal Growth*, Proceedings of the Fourth International Workshop on Modeling in Crystal Growth 266, 207–215. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2004.02.047>
- Stelian, C., Duffar, T., 2017. Modeling Interface Shape in Czochralski Growth of Sapphire Crystals. *Crystal Research and Technology* 52, 1700176. <https://doi.org/10.1002/crat.201700176>
- Stelian, C., Duffar, T., 2004. Modeling of thermosolutal convection during Bridgman solidification of semiconductor alloys in relation with experiments. *Journal of Crystal Growth*, Proceedings of the Fourth International Workshop on Modeling in Crystal Growth 266, 190–199. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2004.02.045>
- Stelian, C., Duffar, T., Nicoara, I., 2003. Comparison between numerical simulation and experimental measurement of solute segregation during directional solidification. *Journal of Crystal Growth* 255, 40–51. [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(03\)01199-0](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(03)01199-0)
- Stelian, C., Plaza, J. I., Barvinschi, F., Duffar, T., Sentailler, J. I., Dieguez, E., Nicoara, I., 2001. Modeling the Solute Segregation in Vertical Bridgman Growth by Using Free-Surface Technique. *Cryst. Res. Technol.* 36, 651–661. [https://doi.org/10.1002/1521-4079\(200108\)36:7<651::AID-CRAT651>3.0.CO;2-R](https://doi.org/10.1002/1521-4079(200108)36:7<651::AID-CRAT651>3.0.CO;2-R)
- Stelian, C., Volz, M.P., Derby, J.J., 2009. On favorable thermal fields for detached Bridgman growth. *Journal of Crystal Growth* 311, 3337–3346. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2009.03.043>
- Tavernier, V., Millet, S., Henry, D., Botton, V., Boutet, G., Garandet, J.-P., 2017. An efficient 1D numerical model adapted to the study of transient convecto-diffusive heat and mass transfer in directional solidification. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 110, 209–218. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.03.021>
- Tiller, W.A., Chalmers, B., Rutter, J.W., Jackson, K.A., 1953. The redistribution of solute atoms during the solidification of metals. *Acta Metallurgica* 1, 428–437.
- Versteeg, H.K., 1995. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Approach*. Longman Scientific & Technical.
- Voller, V.R., 2008. An enthalpy method for modeling dendritic growth in a binary alloy. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 51, 823–834. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.04.025>
- Voller, V.R., Brent, A.D., Prakash, C., 1989. The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 32, 1719–1731. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90054-9](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90054-9)
- Wagner, C., 1954. Theoretical analysis of diffusion of solutes during the solidification of alloys. *JOM* 6, 154–160. <https://doi.org/10.1007/BF03397992>
- Wilson, L.O., 1978. On interpreting a quantity in the burton, prim and slichter equation as a diffusion boundary layer thickness. *Journal of Crystal Growth* 44, 247–250. [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(78\)90199-9](https://doi.org/10.1016/0022-0248(78)90199-9)
- Zhang, N., Park, H.G., Derby, J.J., 2013. Simulation of heat transfer and convection during sapphire crystal growth in a modified heat exchanger method. *Journal of Crystal Growth* 367, 27–34. <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2013.01.011>



FOLIO ADMINISTRATIF

THESE DE L'UNIVERSITE DE LYON OPEREE AU SEIN DE L'INSA LYON

NOM : TAVERNIER

DATE de SOUTENANCE : 19/12/2018

Prénoms : Virgile, Yves, Marie

TITRE : Modélisation numérique de la solidification et de la ségrégation des impuretés lors de la croissance du silicium photovoltaïque à l'aide d'une méthode originale de maillage glissant

NATURE : Doctorat

Numéro d'ordre : 2018LYSEI120

Ecole doctorale : Mécanique, Energétique, Génie civil et Acoustique (MEGA)

Spécialité : Mécanique des fluides

RESUME : Les panneaux photovoltaïques ont pris ces dernières années une place importante dans le secteur de l'énergie. Les performances de ces panneaux dépendent notamment de la qualité et de l'homogénéité du silicium utilisé et des impuretés qu'il contient. Pour obtenir du silicium photovoltaïque, on peut utiliser un procédé de solidification dirigée afin d'obtenir un lingot de silicium de grade photovoltaïque à partir de silicium de grade métallurgique. Cette approche reste aujourd'hui difficile à simuler efficacement en raison de l'aspect multi-échelle du procédé et du suivi de l'interface mobile avec des transferts de masse et de chaleur à l'interface solide/liquide. Cette thèse présente la mise en œuvre d'une méthode originale de maillage glissant proposée pour réaliser un suivi adaptatif de l'interface mobile, afin d'améliorer l'efficacité des simulations. Dans un premier temps, la modélisation de la solidification dirigée d'un corps pur avec un tel maillage glissant est validée à l'aide d'une solution analytique dans une configuration diffusivo de référence. L'impact de la méthode proposée est ensuite étudié dans une configuration de type Bridgman vertical en présence de convection naturelle dans la phase liquide. Dans un second temps, on s'intéresse à la ségrégation des impuretés dans cette même configuration. Pour cela, on propose une modélisation spécifique du rejet d'impuretés à l'interface, et on étudie l'impact sur les simulations de la méthode de maillage glissant proposée. Les résultats et les gains de performance pour les simulations sont discutés en faisant varier des paramètres de calcul et par comparaison avec des données de la littérature.

MOTS-CLÉS : Simulation, Solidification, Ségrégation, Maillage glissant, Silicium photovoltaïque

Laboratoire (s) de recherche :

LMFA, CNRS / Université de Lyon / École Centrale de Lyon / Université Lyon 1 / INSA Lyon,
ECL, 36 Avenue Guy de Collongue, 69134 Ecully Cedex, France.

Directeur de thèse : Valéry Botton, Professeur INSA Lyon

Co-encadrante : Séverine Millet, Maître de Conférences UCBL Lyon 1

Co-encadrant : Mickael Albaric, Ingénieur de recherche CEA-INES

Président de jury : Pr. Thierry Duffar

Composition du jury : Pr. Thierry Duffar, Pr. Slim Kaddeche, Pr. Faïza Mokhtari, Dr. Carmen Stelian, Pr. Valéry Botton, Dr. Mickael Albaric, Dr. Séverine Millet

