



HAL
open science

Contribution à la simulation numérique des procédés à haute température

Bernard Dussoubs

► **To cite this version:**

Bernard Dussoubs. Contribution à la simulation numérique des procédés à haute température : Développer des outils de recherche pour des applications industrielles. Matériaux. Université de Lorraine, 2021. tel-03476584v2

HAL Id: tel-03476584

<https://hal.science/tel-03476584v2>

Submitted on 25 Nov 2022

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.

Copyright

École Doctorale CM2P – spécialité Science des Matériaux

*HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES
DE L'UNIVERSITÉ DE LORRAINE*

*CONTRIBUTION À LA SIMULATION NUMÉRIQUE DES
PROCÉDÉS À HAUTE TEMPÉRATURE :
Développer des outils de recherche pour des applications
industrielles*

Présentée par

Bernard DUSSOUBS

Ingénieur de Recherche Hors Classe, expert en calcul scientifique

Soutenue publiquement le 1^{er} décembre 2021 devant la commission d'examen composée de :

Corinne CHAMPEAUX	Pr IRCER, Université de Limoges, Limoges	Rapporteure
Isabelle CHARPENTIER	DR CNRS, ICube, Strasbourg	Rapporteure
Hervé DUVAL	Pr LGPM, Centrale Supélec, Gif-sur-Yvette	Rapporteur
Silvère AKAMATSU	DR CNRS, Institut des Nanosciences de Paris, Paris	Examineur
Marie DEBACQ	IGR SayFood, AgroParis Tech, Thiverval Grignon	Examinatrice
Emilie GAUDRY	Pr IJL, Université de Lorraine, Nancy	Examinatrice
Abdellah KHARICHA	Pr associé, Montanuniversität Leoben, Leoben	Examineur
Alain JARDY	DR CNRS, IJL, Université de Lorraine, Nancy	Parrain scientifique
Denis ABLITZER	Pr IJL, Université de Lorraine, Nancy	Invité
Isabelle CRASSOUS	Ingénieur R&D Expert, Framatome CRC, UGINE	Invitée

À Sophie

*The promise is broken, you go on living
It steals something from down in your soul
And when the truth is spoken, and it don't make no difference
Something in your heart goes cold*

B. Springsteen, The Promise, 1977-78

SOMMAIRE

<u>Remerciements.....</u>	<u>7</u>
<u>Liste des figures.....</u>	<u>9</u>
<u>Introduction</u>	<u>11</u>
A. La grande histoire	11
B. Et une plus petite.....	13
C. Références de l'introduction.....	14
<u>Dossier Administratif</u>	<u>15</u>
A. Curriculum Vitae	15
B. Enseignement, formation	17
C. Administration	17
D. Thèses codirigées ou dans lesquelles j'ai été plus particulièrement impliqué	18
E. Masters dirigés (participation aux jurys correspondants)	19
F. Activités de valorisation et de transfert – Expertise.....	19
G. Rayonnement scientifique	20
<u>Liste des Publications.....</u>	<u>21</u>
<u>Activités de Recherche.....</u>	<u>29</u>
A. Simulation tridimensionnelle du procédé de projection par plasma thermique	29
B. Simulation du procédé d'hydrofluoration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure	39
C. Simulation des procédés d'élaboration des alliages	71
C.1. Modélisation du bombardement électronique dans un four BE	71
C.2. Modélisation des procédés de refusion.....	85
C.3. Modélisation de la solidification et établissement d'un benchmark numérique.....	129
D. Conclusion – Synthèse de mes activités de recherche	147
E. Synthèse de mes principaux développements de codes et de méthodes numériques....	149
<u>Projet de Recherche</u>	<u>151</u>
A. Simulation fine des procédés d'élaboration des alliages par ESR (ou VAR)	151
B. Développement de modèles de changement d'échelle / de dimension	155
C. Simulation du mouvement des grains / gouttes dans un écoulement turbulent	156
D. À moyen terme.....	157
E. Références du projet de recherche	159
<u>Pièces jointes</u>	<u>161</u>
<i>Autorisation d'inscription à l'HDR de l'Université de Lorraine</i>	

REMERCIEMENTS

Au moment d'attaquer la dernière page à être rédigée dans ce document, mais souvent la première à être lue, je vais commencer par présenter mes excuses à toutes celles et ceux qui, du fait d'un nombre de neurones allant décroissant, auront été oublié(e)s, bien malgré moi.

J'exprime ma sincère gratitude à Mmes Corinne Champeaux et Isabelle Charpentier, ainsi qu'à M. Hervé Duval, pour avoir accepté d'examiner ce travail et d'en être les rapporteurs, tâche ô combien difficile vus les choix (assumés par l'auteur certes mais à tout le moins discutables) que j'ai pu effectuer. Je les remercie pour l'ensemble de leurs commentaires forts pertinents, et plus généralement pour les collaborations fructueuses que nous avons eues dans différents domaines.

Je suis reconnaissant à Mmes Marie Debacq et Émilie Gaudry, et à MM. Silvère Akamatsu et Abdallah Kharicha d'avoir accepté de faire partie du jury de cet HDR. Les échanges lors de la soutenance furent nourris et extrêmement intéressants ; c'est aussi grâce à eux. Je ne doute pas que nous aurons l'occasion de nous revoir, professionnellement ou pas, dans le futur, et j'en suis heureux.

Mme Isabelle Crassous et M. Denis Ablitzer n'ont peut-être administrativement reçu que le titre d'invités dans ce document, mais ils sont pour moi membre à part égale des examinateurs et rapporteurs dans le jury. Qu'ils reçoivent ici les remerciements qu'ils méritent. J'en profite pour souligner le soutien dont Denis Ablitzer a fait preuve à mon égard en étant le premier à m'inciter à soutenir l'HDR. Il était bien normal qu'il fût là pour juger de la pertinence de ses conseils ! Quant à Isabelle, je ne désespère pas de l'avoir motivée pour à son tour franchir le pas !

Alain Jardy a joué avec efficacité le rôle de parrain, sans même me faire une offre que je ne pourrais pas refuser. Je l'en remercie humblement, sans me targuer de pouvoir le remplacer.

Les travaux présentés ici sont issus de collaborations avec plusieurs personnes, et n'ont pu aboutir que grâce à elles, et avec elles. Je tiens donc à signaler combien j'ai apprécié travailler, apprendre, progresser avec Mathilde Hugo et Jérémy Chaulet, mes deux doctorants préférés, et avec Sabine Denis, Armelle Vardelle, Jean-Pierre Bellot, Hervé Combeau, Pierre Fauchais, Dominique Gobin, Fabrice Patisson, enseignants-chercheurs dont les qualités scientifiques et pédagogiques ne sont plus à démontrer.

Mes activités étant menées depuis longtemps au LSG2M, puis à l'IJL, cela m'a laissé un peu de temps pour tisser des liens avec beaucoup de gens. Parmi les anciens, citons Léa Décultot, Liliane Machepy, Josette Omé, Laurence Strohmeier, Valentine Weber, Francesco Giannangeli. Loïc Mangin ; dans les actuels, je pense à Caroline Barjon, Géraldine Georges, Manon Jehl, Sophie Klein, Lucie Morville, Amandine Reiter, Martine Tailleur, Julien Banos, Julien Jourdan, Grégory Marcos, Thibault Quatravaux, Thomas Poullain et toute l'équipe ERMIONE (Patricio Francisco, Olivier Franzin, Francis Kosior, Christian Senet, Laurent Serrat), sans oublier quelques Directeurs anciens et futurs et membres de la direction du laboratoire : Séverine Rollet, Pierre Archambault, Thierry Belmonte, Jean-Marie Dubois, François Montaigne.

Une partie de mes recherches s'inscrit dans le cadre du Club SOLAR. J'ai pu y rencontrer des partenaires d'une rare compétence, comprenant bien les aléas d'un travail de recherche malgré la pression du résultat inhérente à une activité industrielle. Les discussions avec eux sont toujours extrêmement enrichissantes. Qu'il me soit permis de citer, outre Isabelle Crassous, Dominique Carcey-Collet, Jessica Escaffre, Faustine Leclerc, Sandra Ryberon, Sylvain Charmond, Jonathan Dairon, Vincent Descotes, Alexis Gaillac, Pascal Guérin, Stéphane Hans, Julien Jourdan, Yvon Millet, Andrew Wilson.

J'ai également été impliqué depuis longtemps dans le projet du Mésocentre EXPLOR, ce qui m'a permis de collaborer entre autres avec Isabelle Charpentier et Gérald Monard, que je remercie ici.

Un collègue de la section 15 du Comité National du CNRS nous a dit récemment une chose très juste : on sort meilleur du Comité National qu'on y est rentré. Je ne peux que souscrire, ayant pendant un premier mandat côtoyé des collègues brillants, mais également ouverts à leur environnement et humains, loin de l'idée du scientifique dans sa bulle. Que tous sachent combien ce mandat a pu m'être agréable grâce à eux. J'ai donc choisi de rejouer pour un second, avec des collègues certes largement renouvelés mais qui s'annoncent dans la droite ligne de leurs prédécesseurs.

Mes autres activités m'ont amené à bien des rencontres, que ce soit au niveau enseignement, jurys divers, réseau Calcul Scientifique du CNRS, Université de Lorraine, action syndicale. Pour le coup, j'adresse un salut amical à tou(te)s. Je me permettrai de citer seulement Émilie Gaudry et Thierry Verdel côté enseignement ; Violaine Louvet, Armelle Michau et Romaric David côté réseau Calcul ; Florence Bouchet-Moneret, Joëlle Thiery, Emmanuel Maujean, Gilles Mourot et Fabrice Orel au SNPTES ; Isabelle Baptista à l'Université de Lorraine.

Enfin j'aimerais terminer par celle qui partage ma vie, Sophie, car elle a la lourde tâche de me supporter, dans tous les sens du terme, au quotidien. En ce qui la concerne, développer ce que je voudrais lui dire prendrait un second volume. Vous me permettrez donc de m'arrêter là pour ce document.

LISTE DES FIGURES

- Figure 1 : Domaine de calcul utilisé.
- Figure 2 : Distribution des particules d'alumine et de fer au niveau du substrat, lorsque les deux poudres sont injectées a) par le même injecteur ; b) chacune par un injecteur.
- Figure 3 : Représentation schématique du four LC.
- Figure 4 : Carte de température dans le four LC.
- Figure 5 : Isovaleurs dans la zone d'hydrofluoruration verticale a) fraction massique d'UF4, b) température °C. Cas de référence.
- Figure 6 : Isovaleurs dans la zone d'hydrofluoruration verticale a) fraction massique d'UF4, b) température °C. Cas où le débit d'entrée de HF est augmenté de 20% par rapport au cas de référence.
- Figure 7 : Motifs dessinés par les canons à électrons, cas de référence.
- Figure 8 : Motifs dessinés par les canons à électrons, cas d'un incident.
- Figure 9 : Carte du puits liquide en surface de la sole froide dans le cas de référence (gauche) et après 10 secondes d'interruption du canon n°2 (droite).
- Figure 10 : Profil médian en aluminium le long de la sole froide, en surface.
- Figure 11 : Schéma du procédé ESR.
- Figure 12 : Puissance volumique générée dans le laitier par effet Joule ($W.m^{-3}$) sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière.
- Figure 13 : Comparaison de la puissance générée sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière (simulations) et de la puissance mesurée expérimentalement.
- Figure 14 : Cartes de température dans le laitier et le puits liquide du lingot sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière. 50% (haut) et 90% (bas) du temps total de refusion, les iso-valeurs 0,01 0,5 et 0,99 de la fraction liquide sont également représentées.
- Figure 15 : Temps local de solidification dans le lingot secondaire ESR, sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière.
- Figure 16 : Évolution du coefficient de traînée des gouttes en fonction du nombre de Reynolds.
- Figure 17 : Norme de vitesse du laitier et vecteurs vitesse dans le laitier (normalisés et moyennés sur le temps) pour des gouttes d'un diamètre de a) 1 mm, b) 5 mm, c) 10 mm.
- Figure 18 : Différence de température entre les gouttes et le laitier (moyennée sur le temps) pour des gouttes d'un diamètre de a) 1 mm, b) 5 mm, c) 10 mm.
- Figure 19 : Comparaison de l'écoulement du laitier calculé par SOLECS pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en appliquant le modèle d'interactions gouttes-laitier.
- Figure 20 : Comparaison de la température du laitier calculée par SOLECS pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en appliquant le modèle d'interactions gouttes-laitier (cas d'une électrode d'acier refondue à 10 kgmin^{-1}).
- Figure 21 : Représentation synthétique du modèle d'interactions gouttes/puits liquide.
- Figure 22 : Température dans le laitier et le puits liquide et profil du puits liquide pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en utilisant les modèles d'interactions gouttes-laitier et gouttes-puits.

- Figure 23 : *Évolution en fonction du nombre de mailles (dans un maillage 1D) de l'écart entre la vitesse obtenue selon différents schémas de discrétisation et la vitesse exacte (solution analytique, 1,2414 mms-1).*
- Figure 24 : *Domaine de calcul pour la simulation 2D.*
- Figure 25 : *Cartes de macroségrégation dans la cavité à $t = 400$ s (maillage 60×60). a) discrétisation analytique de la perméabilité ; b) interpolation harmonique de la perméabilité ; c) évaluation de la perméabilité à partir de l'interpolation de la fraction liquide ; d) interpolation linéaire de la perméabilité.*
- Figure 26 : *Cartes de macroségrégation dans la cavité à $t = 400$ s pour 3 maillages différents.*
- Figure 27 : *Formation au cours du temps de gouttelettes au bas de l'électrode lors de la refusion ESR. La couleur correspond à l'intensité de la densité de courant électrique [4].*
- Figure 28 : *Expériences sur la dynamique des fluides et la fragmentation d'un mélange métal-silice. (a) Croissance avec entraînement turbulent pour un nombre de Reynolds de 2.10^3 . (b) Fragmentation d'un volume de solution aqueuse de sel de NaI (colorée en bleu) libérée dans de l'huile de silicone, pour un nombre de Weber de 3.10^3 et un nombre de Reynolds de 2.10^4 . (c) Gros plans correspondant aux carrés de (b). Des instabilités de Rayleigh – Taylor à petite échelle sont apparentes dans le premier [5].*
- Figure 29 : *Évolution de la Vitesse de fusion, du courant, de la résistance et de la puissance dans une fusion ESR pilotée à vitesse de fusion constante.*
- Figure 30 : *Résultats de l'optimisation obtenue pour définir des HEA : la contribution de la solution solide (CSSR) est tracée en fonction de la masse volumique ; en couleur est symbolisé le critère PIF. Les histogrammes présentent la répartition des alliages optimaux selon les trois objectifs, suivant l'axe auquel ils sont adossés (de gauche à droite : CSSR, masse volumique, critère PIF). À chaque barre correspond un nombre d'alliages [17].*

INTRODUCTION

NB : Les références citées ci-dessous sont spécifiques à l'introduction et regroupées à la fin de celle-ci.

A. La grande histoire

On s'accorde à dire que la première véritable simulation numérique réalisée le fut, sans que cela ne doive nous étonner, dans un contexte militaire (et plus précisément dans le domaine de la physique nucléaire). En 1953, dans le cadre du projet Manhattan, J. Von Neumann et S. Ulam, rejoints par E. Fermi et J.R. Pasta, souhaitaient simuler le comportement des neutrons lors des réactions en chaîne dans des armes explosives basées sur la fission. Pour arriver à cela, ils décidèrent d'utiliser une méthode inventée quelques années plus tôt, en 1947, par N. Metropolis, et dont le nom faisait allusion aux jeux de hasard pratiqués dans la Principauté éponyme : la méthode de Monte-Carlo [1].

L'expérience numérique en question, programmée en 1955, a longtemps porté le nom de Fermi-Pasta-Ulam (FPU), rappelant les principaux acteurs impliqués dans le projet : E. Fermi en tant que chercheur, J.R. Pasta comme informaticien et S. Ulam, un mathématicien [2].

Une 4^{ème} personne, la programmeuse M. Tsingou, est remerciée dans l'article mais pas citée comme auteur. Pourtant, son rôle fut essentiel pour programmer la machine utilisée pour les calculs, le MANIAC 1 (pour Mathematical Analyzer, Numerical Integrator, and Computer), ordinateur basique (puissance de 10 000 opérations par seconde) construit sous la direction de N. Metropolis et basé sur l'architecture de Von Neumann (i.e. un modèle où une structure de stockage unique est utilisée pour conserver à la fois les instructions, les données et les résultats du calcul. De fait, cet ordinateur était le premier à utiliser un programme mémorisé). Cette architecture, bien qu'obsolete, est tout de même ce qui permet, par la possibilité de traiter des instructions de la même manière que des données, d'écrire des compilateurs (et de permettre la réplication des virus informatiques, mais ceci est une autre histoire...). Du fait que sans elle, rien n'aurait été possible, M. Tsingou a vu son nom associé à la méthode en 2008 (devenue donc FPUT depuis lors) ¹.

La simulation consistait à reproduire le comportement de 64 masses formant une corde vibrante et reliées entre elles par des ressorts dont l'allongement n'est pas linéairement proportionnel aux forces qui s'exercent sur eux.

Pour cela, la trajectoire d'une masse i , déterminée via une méthode de différences finies centrées, est perturbée par une anharmonicité d'ordre 2 ou 3, comme illustré dans les équations (1) et (2)² :

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \alpha[(x_{i+1} - x_i)^2 + (x_i - x_{i-1})^2] \quad (1)$$

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \beta[(x_{i+1} - x_i)^3 + (x_i - x_{i-1})^3] \quad (2)$$

D'après la mécanique statistique, si la corde est excitée dans un de ses modes propres, elle va d'abord se charger en énergie, laquelle va se transmettre dans les autres modes du fait de l'équirépartition de cette grandeur. Mais ce n'est pas ce que les auteurs observèrent. Un beau jour, l'ordinateur fonctionna plus longtemps que prévu et le résultat de la simulation obtenue montra que l'énergie se répartissait dans certains modes propres et revenait dans le mode initial avant de se rediffuser ! Ce paradoxe, et sa résolution, entre autres par Kolmogorov, résultera dans la mise au point de la théorie des solitons et de celle du chaos dynamique. Rien que ça.

¹ Un article intéressant sur M. Tsingou est consultable à l'adresse suivante. On pourra y consulter son algorithme, retrouvé dans sa cave : <https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2020/04/refdp202067p26.pdf>

² Pour les fêrus d'équations : profitez-bien de celles-ci, il n'y en aura pas d'autres dans le manuscrit... Mais vous en trouverez un bon nombre dans les articles insérés.

Au-delà de son aspect historique, cette histoire contient tous les éléments que l'on retrouve dans la simulation numérique « moderne » :

- Un problème à résoudre lié à une application pratique (à la finalité certes discutable...), trop compliqué pour être traité analytiquement,
- Un développement de code qui est une affaire pluridisciplinaire : physicien, mathématicien, informaticien, développeur, etc.
- Le besoin d'avoir une architecture informatique adaptée,
- La comparaison indispensable à l'expérience,
- Un calcul qui ne s'arrête pas comme prévu et un résultat qui n'est pas celui que l'on attend !

En ce qui concerne le dernier point, évidemment ce n'est pas une généralité... On appréciera toutefois l'attitude des auteurs, qui n'ont pas rejeté d'emblée le résultat numérique alors que rien ne leur permettait de penser qu'il fut valide. À contrario, ils ne sont pas partis du principe que ce qui est issu de la machine est forcément correct, alors que la théorie se trompe. Leur approche, bien au contraire, a consisté à comparer les résultats, à s'interroger sur l'apparent paradoxe obtenu, et à faire progresser les connaissances scientifiques en se nourrissant de ce qu'ils avaient obtenu.

Mon propos n'est pas de raconter l'histoire de la simulation numérique, mais d'illustrer que même si aujourd'hui, un tel outil nous paraît évident d'utilisation (du moins il est évident que certains puissent l'utiliser), c'est encore quelque chose de relativement jeune. D'autant que dans les années 50, la simulation informatique n'était pas « utile » : elle prenait trop de temps pour produire des résultats, nécessitait trop de personnel qualifié et coûtait trop cher. Par ailleurs, les résultats étaient souvent ambigus. Tant que les ordinateurs ne gagneraient pas en puissance et en simplicité d'utilisation, elle n'était pas vouée à un large développement. Il fallait déjà pouvoir « dialoguer » avec la machine via un langage de programmation. Les premiers efforts en ce sens étaient ceux de A. Turing, dès 1936 (interrompus en 1954 du fait d'une pomme mal passée). Mais c'est sans doute K. Zuse qui mit au point le premier langage de « haut niveau » avec le Plankalkül en 1943-45 [3], bientôt suivi par A-0 System (langage de l'UNIVAC, 1951) et FORTRAN (J. Backus, 1954) [4].

En 1961, Gordon présenta lors d'une conférence un article sur le premier simulateur de systèmes à usage général (GPSS) [5]. Une des premières applications de cet outil permit à la Fédération de l'aviation américaine de diffuser des informations météorologiques. Matériel et logiciel étaient fournis par la société IBM, qui produisait des machines de calcul depuis 1944. Des grandes entreprises commencèrent à développer les premiers groupes de simulation (Boeing, Martin Marietta, Hughes Aircraft, Exxon etc.), et en 1968, une conférence sur les applications de la simulation se déroula à New York, et s'installa sur une base annuelle. Les premiers travaux en simulation des procédés de J. Szekely datent également de cette date.

À l'aube des années 70, la simulation commença à être enseignée dans les universités, mais la perspective de passer de longues heures devant un terminal à attendre la fin hypothétique d'un programme pour constater des bugs n'enchantait guère les étudiants ! Néanmoins, les utilisations de la simulation allaient croissant. Signe de maturité (?) : une table ronde à la Conférence sur les applications de la simulation de 1978, sur les échecs de la simulation et comment s'en prémunir.

Au début des années 80, la simulation numérique demeurait extrêmement compliquée de l'avis général, réservée aux experts, et le temps de programmation et de débogage la rendait toujours beaucoup plus longue que l'expérience qu'elle voulait simuler ! Pourtant, le début de la démocratisation du PC n'allait plus tarder, et avec elle un foisonnement de matériels et logiciels permettant de la mettre en œuvre avec bien plus de facilité qu'auparavant. L'émergence du PC personnel, à partir de 1982, et de compilateurs grand public (Pascal et Turbo Pascal, C puis C++, Fortran moderne), allaient permettre à plus d'entreprises de se lancer dans la simulation.

Dans le domaine académique également, les travaux se multiplièrent. Zoomons très fortement sur ce qui va nous intéresser dans la suite de ce document. Au Laboratoire de Sciences et Génie des Matériaux et Métallurgie (LSG2M), un des laboratoires dont est issu l'IJL, A. Jardy [6], F. Patisson [7] et J.P. Bellot [8] réalisèrent les premières thèses dans le domaine de la simulation numérique des procédés sous la direction de D. Ablitzer. Au Laboratoire de Matériaux Céramiques et Traitements de Surfaces (LMCTS) à Limoges, A. Vardelle [9] s'intéressait à la simulation numérique des procédés de projection par plasma thermique. Ces travaux datent d'une trentaine d'années, sont inspirés de ceux de J. Szekely, et s'appuient largement sur la bible du numéricien appliquant la méthode des volumes finis : l'ouvrage *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* de S. Patankar [10]. Les simulations n'étaient pas forcément rapides, les codes fonctionnaient sous un terminal,

sur des stations de travail Unix et systèmes VAX/VMS. Mais des systèmes industriels commencèrent à pouvoir être modélisés, même si cela restait encore sous une forme simple.

Nouveauté de cette décennie : à côté de l'approche consistant à écrire des codes « maison » adaptés à une problématique donnée, une autre approche a vu le jour. On allait utiliser des codes commerciaux pour s'éviter une partie de la complexité du codage/langage. En 1981, le premier logiciel de mécanique des fluides numérique fut mis sur le marché : PHOENICS, pour Parabolic, Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series, développé par la société CHAM. Ce logiciel sera utilisé au LSG2M par E. Hess pour simuler le comportement du bain dans un four à bombardement électronique [11].

Les années 90 virent la puissance des machines de calcul s'envoler. Le Top 500 des supercalculateurs vit le jour en 1993. Les activités de simulation numérique se multiplièrent, aussi bien dans les laboratoires universitaires que dans les bureaux de recherche des entreprises. Les formations dans le domaine du calcul commencèrent à être mises en place dans certaines universités. Bref, la simulation numérique se démocratisa.

B. Et une plus petite

C'est dans ce contexte que j'ai débuté mes activités dans le domaine, lors de mon DEA en 1994, suivi d'une thèse de doctorat obtenue en 1998. Je travaillais au LMCTS (Laboratoire de Matériaux Céramiques et Traitements de Surfaces, devenu aujourd'hui IRCER, à l'Université de Limoges), dans l'équipe Plasmas, Lasers, Matériaux du Pr. P. Fauchais, sous la direction du Pr. A. Vardelle. La partie de l'équipe dont je faisais partie s'intéressait au procédé de dépôt de céramiques sur des surfaces par plasma à pression atmosphérique, en conjuguant méthodes expérimentales originales (mesure de vitesse de particules via une « feuille laser ») et simulation numérique, essentiellement 2D. Ma thèse a constitué la première approche par une modélisation tri-dimensionnelle, elle fait l'objet de la *partie A dans le chapitre portant sur mes activités de recherche*.

A l'issue de cette thèse, je suis arrivé au LSG2M en 1999, dans l'équipe « procédés d'élaboration » du Pr. D. Ablitzer, pour un stage post-doctoral de 3,5 ans. On m'a confié le développement et l'exploitation d'un code simulant le procédé d'hydrofluoruration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure dans un four à lit coulant. Je développe cette étude dans la *partie B du même chapitre*. A partir de 2000, j'ai en parallèle commencé à travailler avec A. Jardy sur le développement du code de calcul SOLAR (SOLIDIFICATION d'un Lingot refondu à l'ARc), dans le domaine des procédés pyrométallurgiques.

Mon stage post-doctoral terminé, par le transfert et la formation aux partenaires industriels du code de calcul issu de ces travaux, le Directeur du LSG2M m'a proposé un poste d'ingénieur de recherche en calcul scientifique, poste transversal partagé entre 3 équipes de recherche du laboratoire : l'équipe « procédés d'élaboration » bien sûr, mais également les équipes « solidification » et « microstructures et contraintes ». À cette occasion, j'ai dû acquérir de nouvelles compétences aussi bien scientifiques que numériques, les méthodes et outils étant différents de ceux que j'avais déjà utilisés auparavant.

J'ai été titularisé sur un poste permanent en 2006, suite à la réussite au concours d'ingénieur de recherche en calcul scientifique ouvert cette année-là à l'INPL. J'ai poursuivi mon activité dans le domaine de la simulation depuis lors, en travaillant sur différents procédés. La *partie C dans le chapitre portant sur mes activités de recherche* en illustre quelques exemples. Je me suis plus particulièrement impliqué dans le domaine de la simulation du procédé ESR (Electro-Slag Remelting), puisque j'ai co-dirigé 2 thèses dans ce domaine (et fortement participé à une 3^{ème}). Je suis actuellement porteur d'un projet sur le thème dans le cadre du Plan de Relance, qui pourrait déboucher sur 2 stages post-doctoraux consécutifs de 18 mois chacun dont je serai responsable.

Une tentative de synthèse de ces différentes activités se trouve dans les *parties D et E du chapitre Activités de recherche*.

En parallèle, la fusion de plusieurs laboratoires, dont le LSG2M, se profilant (effective au 1^{er} janvier 2009 pour donner naissance à l'Institut Jean Lamour), j'ai animé le groupe de travail visant à mettre en place un service informatique et calcul assurant le meilleur niveau de service aux utilisateurs du futur laboratoire, et une véritable maîtrise de notre Système d'Information. J'ai pris la responsabilité de cette équipe à la création de l'IJL.

À partir de 2011, j'ai également porté avec 2 collègues de la future Université de Lorraine (née au 1^{er} janvier 2012), G. Monard, Pr. au SRSMC, et I. Charpentier, CR CNRS au LEM3, le projet de mésocentre

de calcul lorrain EXPLOR. Initialement présenté au PIA2 dans la catégorie Equipex, le projet a été classé (un des 3 seuls en Lorraine) quoique non financé. EXPLOR a finalement vu officiellement le jour en 2014 suite à un financement dans le cadre du Plan lorrain, et j'en ai assuré l'administration provisoire en 2020-2021.

Depuis mon arrivée à l'Université je n'ai jamais cessé d'assurer des enseignements, d'abord dans le cadre d'un monitorat, puis de vacances. J'interviens toujours à ce jour, comme chargé de cours, assistant de TD, encadrant de stages de BUT 2 jusqu'à Master 2.

Je suis enfin impliqué dans un certain nombre d'activités collectives, élu au CA de l'Université depuis sa création, représentant des personnels en Commission Paritaire d'Établissement, élu C au Comité National du CNRS en section 15 (Chimie des Matériaux) et commission interdisciplinaire 55 (Science et données), mais aussi sous-directeur du LSG2M entre 2007 et 2009.

Tous ces aspects sont présentés, avec les différentes activités associées, dans le *chapitre Dossier Administratif* qui ouvre ce document.

Enfin, la partie la plus intéressante de ce manuscrit, ou du moins la plus novatrice (je l'espère) réside dans le chapitre *Projet de Recherche* qui esquissera quelques pistes de travail sur lesquelles je souhaiterais m'engager à l'avenir, à court et moyen terme.

C. Références de l'introduction

- [1] N. Metropolis, S. Ulam : The Monte Carlo Method, *Journal of the American Statistical Association*, 44 (247), 335-341 (1949).
- [2] E. Fermi, J.R. Pasta, S. Ulam : Studies of Nonlinear Problems. *Collected Papers of Enrico Fermi, Vol. 2, The University of Chicago Press, 977-988* (1965).
- [3] K. Zuse : Über den allgemeinen Plankalkül als Mittel zur Formulierung schematisch-kombinativer Aufgaben, *Archiv der Mathematik*, **1**, 441-449 (1948).
- [4] J. Backus : Specifications for The IBM Mathematical Formula Translating System FORTRAN, *Internal Report IBM (1954)*. Consultable en ligne à l'adresse : <https://archive.computerhistory.org/resources/text/Fortran/102679231.05.01.acc.pdf>
- [5] J. Reitman : A Concise History of the Ups and Downs of Simulation, *Proceedings of the 20th conference on Winter simulation, 1-6* (1988). <https://doi.org/10.1145/318123.318130>
- [6] A. Jardy : thèse de doctorat de l'INPL, 1984
- [7] F. Patisson : Modélisation physico-chimique et thermique de l'opération d'agglomération des minerais de fer, thèse de doctorat de l'INPL, 1987.
- [8] J.P. Bellot : Étude et modélisation physico-chimique et thermique de l'opération de grillage agglomérant des minerais sulfurés de zinc, thèse de doctorat de l'INPL, 1989.
- [9] A. Vardelle : Etude numérique des transferts de chaleur, de quantité de mouvement et de masse entre un plasma d'arc à la pression atmosphérique et des particules solides, thèse de doctorat de l'Université de Limoges, 1987.
- [10] S.V. Patankar : Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, *Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences*, CRC Press, 1980.
- [11] J.P. Bellot, E. Hess, S. Hans and D. Ablitzer : A Comprehensive Simulation of the Electron Beam Cold Hearth Refining of titanium Alloys, *Proceedings of the 1997 International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting, Sante Fe, NM*, 166-178 (1997).

DOSSIER ADMINISTRATIF

« Blondin, tu veux me faire une farce avoue-le ?
- Ca c'est pas une farce, c'est une corde... »

Le bon, la brute et le truand, 1966

A. Curriculum Vitae

ETAT CIVIL

Bernard **DUSSOUBS**

Né le 12 octobre 1970 à **LIMOGES** (87), nationalité française

IGRHC Calcul Scientifique à l'Institut Jean Lamour (site ARTEM, 2 allée André Guinier, BP 50840, 54011 NANCY CEDEX), Université de Lorraine

Téléphone : 03.72.74.26.20

Adresse électronique : bernard.dussoubs@univ-lorraine.fr

DIPLÔMES ET TITRES UNIVERSITAIRES

- **Doctorat en "Science des Matériaux Céramiques et Traitements de Surface"**
Mention Très Honorable avec Félicitations du Jury
Modélisation 3D du procédé de projection plasma : influence des conditions d'injection de la poudre et des paramètres de projection sur le traitement et la répartition des particules dans l'écoulement.
Soutenu le 26 juin 1998 à LIMOGES
- **Diplôme d'Etudes Approfondies en "Matériaux Céramiques et Traitements de Surface"**, Faculté des Sciences de Limoges, septembre 1994 – *Mention Très Bien – Classement : 1^{er}*.
Étude numérique de la solidification et du refroidissement d'une particule projetée par plasma.

LANGUES ÉTRANGÈRES

- **Anglais** courant
- **Russe** pratiqué comme 2^{ème} langue au collège et au lycée

EXPÉRIENCE PROFESSIONNELLE

- depuis septembre 2002 : **Ecole des Mines de NANCY, LSG2M** puis **IJL** (janvier 2009)
Institut Jean Lamour - NANCY (54).
Ingénieur de recherche, Chef de projet ou expert en calcul scientifique.
Vacataire à l'Ecole des Mines de Nancy.
Chef de projet, responsable du Centre de Compétences ERMIONE (6 personnes)
 - ✓ Gestion administrative et budgétaire du CC
 - ✓ Réalisation des entretiens annuels et de l'évaluation des personnels membres
 - ✓ Représentation du CC auprès des instances
 - ✓ Coordination de la mise en place du Système d'Information de l'UMR.**Expert en calcul scientifique**
 - ✓ Maîtrise et développement d'outils théoriques pour les travaux de modélisation des procédés d'élaboration, traitement du métal liquide, solidification des alliages

- ✓ Mise en œuvre de techniques numériques, de logiciels de simulation et d'outils de visualisation
 - ✓ Expertise pour les activités de recherche (conseil sur le choix des méthodes, développement de programmes de calcul scientifique, transfert de technologies informatiques vers les chercheurs)
 - ✓ Maîtrise et maintien des logiciels "maison" et commerciaux d'un Département de l'IJL ; développement d'applications spécifiques dans ces derniers, intégration de nouveaux composants
 - ✓ Transfert et valorisation des logiciels développés en interne vers les partenaires industriels ainsi qu'assistance auprès de ces partenaires
 - ✓ Formation des étudiants et doctorants, soutien aux filières d'enseignement ; diffusion de l'information au sein de l'IJL
- ✓ septembre 2020 à juillet 2021 : **Université de Lorraine**
- Administrateur provisoire du mésocentre lorrain EXPLOR 2020-2021)**
- ✓ Gestion du budget et des personnels du mésocentre
 - ✓ Participation au GT définissant les évolutions du mésocentre
 - ✓ Membre du Directoire du mésocentre
- mars 1999 à septembre 2002 : **Ecole des Mines de NANCY, LSG2M**
Laboratoire de Science et Génie des Matériaux et de Métallurgie - NANCY (54).
Chercheur post-doctoral.
Vacataire à l'Ecole des Mines de NANCY.
- octobre 1998 - décembre 1998 : **ADER – LPC**
Association pour le Développement de l'Enseignement et de la Recherche en Limousin Poitou-Charentes - LIMOGES (87).
Rapport d'enquête sur le devenir des doctorants financés par l'ADER-LPC pendant leur thèse.
- octobre 1997 – août 1998 : **LMCTS**
Laboratoire de Matériaux Céramiques et Traitements de Surface - LIMOGES (87).
Chercheur en formation dans le cadre du doctorat.
ATER en Physique à la Faculté des Sciences de LIMOGES.
- octobre 1994 - septembre 1997 : **LMCTS**
Laboratoire de Matériaux Céramiques et Traitements de Surface - LIMOGES (87).
Chercheur en formation dans le cadre du doctorat.
Moniteur en Physique à la Faculté des Sciences de LIMOGES.

ACTIVITÉS D'ENCADREMENT/RESPONSABILITÉ D'ÉQUIPE

- Co-directions de thèse : 3 thèses soutenues
- Encadrement de DEA/DESS/Master 2 : 10
- Responsable d'une équipe de 6 personnes : 1 T CNRS, 1 ASI UL, 1 IGE UL, 2 IR CNRS, 1 IGR UL

PRODUCTION SCIENTIFIQUE

- Publications dans des journaux/revues avec comité de lecture : 39
- Comptes-rendus de congrès sans comité de lecture : 19
- Communications orales : 21
- Rapport de contrats : 20
- Index h = 15

RESPONSABILITÉS COLLECTIVES

- Sous-directeur du LSG2M, en charge du fonctionnement technique (2007-2008)

- Responsable de l'équipe informatique/calcul scientifique de l'IJL (2009-)
- Membre de jurys de concours ITRF et ITA CNRS (2008-). Expert de jury ITRF (2008-)
- Membre du Comité National du CNRS, Section Chimie des Matériaux (15) et Section Interdisciplinaire (52) (2016-)
- Porteur du projet EXPLOR de mésocentre lorrain de calcul scientifique (2013-2016). Administrateur provisoire du mésocentre (2020-2021)
- Membre du Comité de Pilotage du Réseau Calcul Scientifique (2009-)
- Membre du Comité d'organisation du congrès "International Symposium on Liquid Metal Processing and Casting", Nancy, septembre 2007 et septembre 2011
- Membre élu au Conseil du LSG2M et au Conseil de la Fédération Jean Lamour (2005-2009).
- Membre du Conseil d'Administration de l'INPL puis de l'Université de Lorraine (2007-)
- Membre de la Commission Paritaire d'Etablissement de l'INPL (2008-2011) puis de l'Université de Lorraine (2015-2018)
- Membre du Conseil de l'Ecole Doctorale C2MP (2018-)

B. Enseignement, Formation

- Monitorat + ½ ATER à l'Université de Limoges dans le cadre de la thèse (1994-1998) : 3x64h TD +96H TD en 1^{er} (DEUG A et B) et 2^{ème} cycle (Maîtrise EER) : TD et TP de physique, optique, thermodynamique.
- Vacations (1999-) en tant que chargé de TD à Mines Nancy (50 élèves de L3 et M1 par an) : 60 h TD en moyenne/an, en :
 - ✓ Statistique : bases de la statistique inférentielle, probabilités et variables aléatoires, loi normale, contrôle et estimation statistique, régression linéaire, introduction à l'analyse des données, au data mining et big-data.
 - ✓ Physique statistique : approche statistique de la physique, ensembles microcanonique, canonique et grand canonique, thermodynamique classique et statistique, gaz parfait classique, théorie cinétique des gaz, phénomènes de transport, statistiques de Fermi-Dirac et Bose-Einstein, rayonnement (corps noir), gaz de photons, gaz parfait de fermions et bosons, propriétés des solides semi-conducteurs.
 - ✓ Simulation Numérique : cet enseignement transversal apporte les bases nécessaires au développement et à l'utilisation de codes de mécanique des fluides numérique, outil aujourd'hui indispensable à l'ingénieur pour comprendre et optimiser des installations industrielles, où les écoulements turbulents couplés à la thermique et aux transferts de matière jouent un rôle essentiel. Le code Fluent a été choisi pour l'ensemble des TD.
- Chargé de cours (2016-) en Master ISAM-IAE (25 élèves de M2) : 25 h TD en moyenne/an, en statistique : base de la statistique inférentielle, probabilités et variables aléatoires, loi normale, contrôle et estimation statistique, régression linéaire, analyse de données.
- Encadrement régulier de groupes d'étudiants de Mines Nancy (stages de recherche de 3 à 6 mois en M1 ou M2) : formations environnement, énergie et procédés, simulation numérique.
- Encadrement de 7 stagiaires de l'IUT informatique Charlemagne (Nancy) sur le développement d'interfaces de logiciels de calcul scientifique (2000-2008, 2017-2020).
- Formation des utilisateurs du laboratoire sur des logiciels de simulation numérique.
- Membre du projet "Statistique pour l'Ingénieur": mise en ligne d'un cours interactif de statistique à destination des élèves admis sur titre en 2^{ème} année de l'Ecole des Mines de Nancy. Chargé de la rédaction et de la mise en ligne d'exercices interactifs en javascript.

C. Administration

- Responsable du Centre de Compétence ERMIONE de l'IJL depuis 2009 (Ensemble de Ressources et de Moyens pour l'Informatique et les Outils NumériqEs), qui regroupe

- l'ensemble des personnels BAP E de l'Unité. En charge du budget du Centre de Compétences (250 k€/an), encadrement de 5 personnels BIATSS (niveau T à IGR).
- Membre du bureau exécutif du GDR Calcul et du réseau métier Calcul Scientifique du CNRS (2009-2013). Porteur et coorganisateur, pour le réseau Calcul, d'une Ecole Thématique (calcul parallèle dans le domaine des plasmas) en collaboration avec le réseau métier Plasmas Froids, octobre 2011, Autrans. Co-organisateur du CEMRACS 2012 (17^{ème} Centre d'Eté Mathématique de Recherche Avancée en Calcul Scientifique) sur le thème des méthodes numériques et algorithmes pour architectures hautes performances, 16 juillet au 24 août 2012, Marseille (100 participants). Membre du Comité de Pilotage du réseau Calcul (2014-).
 - Participant à l'organisation du congrès "International Symposium Liquid Metal Processing and Casting", Nancy, Septembre 2003, et membre du comité d'organisation des éditions 2007 et 2011 (chargé entre autres du budget du congrès – 80 k€ environ, des demandes de subventions aux partenaires industriels et aux collectivités locales, du site web, du programme scientifique, de l'organisation locale et de l'intendance/facilitation au cours de celui-ci, etc.), Nancy, 2003, 2007 et 2011. Le Congrès réunit à chaque fois entre 110 et 140 personnes venant de 15 à 20 pays différents.
 - Coordinateur avec un collègue PR de l'UL et une collègue CR CNRS du projet de mésocentre lorrain dans le domaine du calcul scientifique EXPLOR. J'animais un groupe de travail au sein duquel 17 laboratoires lorrains étaient représentés ; j'ai coordonné la rédaction d'un projet EQUIPEX2 (classé 62^{ème}/274). J'ai été co-responsable de la structure de coordination EXPLOR créée en novembre 2016 à l'UL (dotée d'un budget Pacte Lorraine de 2,7 M€), en charge de l'animation scientifique, de la coordination des ingénieurs calcul de l'Université au sein de la Maison de la Simulation. J'ai été également administrateur provisoire de la structure (2020-2021), en charge du budget de fonctionnement (20 k€/an) et de l'encadrement d'un IGR.
 - Sous-directeur du laboratoire LSG2M (devenu par fusion avec 4 autres laboratoires l'IJL au 1^{er} janvier 2009), chargé du fonctionnement interne du laboratoire (2007-2008).
 - Coordinateur du Club Solar (2002-), regroupant les industriels utilisateurs du logiciel Solar (Titanium Corporation TIMET, Centre de Recherche Composants de Framatome, Aubert et Duval, APERAM) ainsi que les développeurs du code à l'Institut Jean Lamour. Le but du club est de mettre en commun les développements des codes et les expériences d'utilisation des partenaires industriels.

D. Thèses codirigées ou dans lesquelles j'ai été plus particulièrement impliqué

1. A. Malik : Simulation Tridimensionnelle des Procédés d'Elaboration et de Solidification, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 28 février 2012. Directeur H. Combeau, PR UL, IJL (*co-direction à 33%*). Durée de la thèse : 4 ans. A. Malik est désormais membre du comité de développement de la formation au sein de la société SAEINDIA (Inde).
2. M. Hugo : Modélisation de la Refusion ESR d'Aciers Spéciaux et Superalliages Base Nickel, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 25 juin 2014. Directeur A. Jardy, DR CNRS, IJL (*co-direction à 50%*). Durée de la thèse : 4 ans. M. Hugo est désormais ingénieur développeur chez Sopra Banking Software (France).
3. J. Chaulet, Modélisation du Procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur : Représentation des transferts énergétiques métal-laitier, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 11 mai 2021. Directeur A. Jardy, DR CNRS, IJL (*co-direction à 50%*). Durée de la thèse : 3 ans. J. Chaulet est désormais ingénieur R&D Upstream Process chez APERAM (France).
4. J. Jourde : Modélisation numérique du four à lit coulant réalisant la conversion du trioxyde d'uranium en tétrafluorure, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, 2000. Directeur D. Ablitzer, PR INPL, LSG2M.
5. N. Houti : Étude de l'influence du mouvement et de la croissance des grains équiaxes sur la macroségrégation en coulée semi-continue d'aluminium, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, 2005. Directeur H. Combeau, Pr INPL, LSG2M.
6. V. Weber : Simulation numérique du procédé de refusion sous laitier électroconducteur, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, 2008. Directeur D. Ablitzer, Pr INPL, LSG2M.

7. L. Mangin : Étude et simulation des processus de déformation au chauffage de tubes d'acier : prise en compte des couplages fluide-thermique-métallurgie-mécanique, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, 2010. Directeur S. Denis, PR INPL, IJL.
8. L. Décultot : Étude et modélisation du procédé de refusion par plasma d'arc en creuset froid (PAMCHR) d'alliages de titane pour des applications aéronautiques, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 2021. Directeur J.P. Bellot, Pr. UL, IJL.

E. Masters dirigés

1. B. Rouaiguia : Développement d'un pré-processeur et d'un post-processeur pour l'interface de saisie du logiciel SOLAR, Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré, septembre 2002. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
2. N. Benziane : Mise en place d'une démarche maintenance d'intégration des nouveaux équipements sur le périmètre prestataires chez LEGRAND Limoges (87), Rapport de stage entreprise 3ème année, FITI MGP, Ecole des Mines de Nancy, INPL, septembre 2002. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
3. S. Santos : Améliorations apportées à l'interface d'un logiciel de simulation numérique : SOLAR, Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré, septembre 2003. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
4. K. Mouzouri : Interface graphique du logiciel de simulation numérique SOLAR : de la version 3.3 à la version 4.0, Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré, septembre 2004. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
5. D. Donnot : L'interface graphique de SOLAR version 4.1, Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré, septembre 2005. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
6. D. Diarrassouba : L'interface graphique de SOLAR version 4.5, Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI, septembre 2009. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
7. O. N'Diaye : L'interface graphique de SOLAR version 4.6, Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI, septembre 2010. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
8. T. Amoussa : L'interface graphique de SOLAR version 5.0, Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI, septembre 2011. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
9. B. Benmessaoud : L'interface graphique de SOLAR version 5.1, Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI, septembre 2012. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.
10. A. Elsayed : L'interface graphique de SOLAR version 5.2, Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI, septembre 2013. Direction à 100%. Durée du stage : 6 mois.

F. Activités de valorisation et de transfert – Expertise

- Encadrement d'une ingénieure d'études sur le développement de codes de calcul scientifique et de leurs interfaces (2013-2016).
- Formation des utilisateurs industriels du code simulant le procédé d'hydrofluoruration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure d'uranium, à COGEMA Pierrelatte (4 jours) (2002).
- Formation des utilisateurs industriels sur le logiciel Solar et son interface. Assistance téléphonique aux utilisateurs et maintenance du code (2003-).
- Transfert auprès de la société TRANSVALOR d'un module de calcul de l'évolution microstructurale au cours de la trempe d'un acier fer-carbone (2004).

- Comparaison des résultats des versions 2.5 et 3.6.2 du code Solid, simulant la solidification des aciers (2005).
- Comparaison des résultats des versions 3.4 et 3.8 du programme Cône 2D sous différents systèmes d'exploitation (2006).
- Intervention sur le couplage Fluent-Sysweld dans le cadre de la thèse de L. Mangin sur le cintrage des tubes d'aciers (en collaboration avec Vallourec).
- Intervention sur le développement d'un modèle du procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur dans le cadre de la thèse de V. Weber (en collaboration avec Aubert et Duval).
- Porteur du projet de labellisation qualité du CC ERMIONE en tant qu'Infrastructure de recherche dans le cadre du projet INFRA+ de l'I-SITE LUE.
- Expert BAP E pour les jurys de concours ITRF et ITA CNRS, catégorie calcul scientifique (2008-).

G. Rayonnement scientifique

- Membre du Comité National du CNRS (section 15, Chimie des Matériaux et Commission Interdisciplinaire CID 52) (2016-).
- Auteur de 39 publications de rang A, dont 24 dans des journaux internationaux (h-index : 15).
- Reviewer régulier pour la revue en ligne Metals (membre du Reviewer Board de la revue).

LISTE DES PUBLICATIONS

Publications - journaux	3	5	16	24
Comptes-rendus de congrès avec comité de lecture	3	3	9	15
Comptes-rendus de congrès sans comité de lecture	6	1	12	19
Communications orales	7	2	12	21
Posters	2	0	3	5
Ouvrages scientifiques			2	2
Rapports scientifiques		10	10	20
Rapports de stage		3	14	17
Thèses (soutenues et en cours)			3	3
TOTAL	21	24	81	126

Les colonnes 2, 3 et 4 correspondent aux 3 périodes couvrant respectivement DEA + thèse (1994-1998), post-doctorat (1999-2002), poste d'IGR calcul scientifique (2002).

PUBLICATIONS**Publications dans des journaux**

- P1 A. Vardelle, N.J. Themelis, B. Dussoubs, M. Vardelle, P. Fauchais : Transport and Chemical Rate Phenomena in Plasma Sprays, présenté à la *Fourth European Conference on Thermal Plasma Processes (TPP4)*, 15-18 July 1996, Athens, Greece (Conférence invitée), et publiée dans *Journal of High Temperature Material Processes*, 1 (3), 295-314 (1997). 20 pages.
- P2 A. Vardelle, P. Fauchais, B. Dussoubs, N.J. Themelis : Heat Generation and Particle Injection in a Thermal Plasma Torch, presented at the *13th International Symposium on Plasma Chemistry*, Beijing, China, August 1997 (Conférence invitée), publié dans *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 18 (4), 551-578 (1998). 28 pages.
- P3 M. Leylavergne, A. Vardelle, B. Dussoubs, N. Goubot : Comparison of Plasma Sprayed Coatings Produced in Argon or Nitrogen Atmosphere, *Journal of Thermal Spray Technology* 7 (4), 527-536 (1998). 10 pages.
- P4 B. Dussoubs, G. Mariaux, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais : D.C. Plasma Spraying: Effect of Arc Root Fluctuations on Particle Behavior in the Plasma Jet, *Journal of High Temperature Material Processes*, 3 (2-3), (1999). 12 pages.
- P5 P. Fauchais, A. Vardelle, M. Vardelle, B. Dussoubs : Quo Vadis Plasma Spraying ?, *Journal of Thermal Spray Technology* 10 (1), 44-66 (2001). 23 pages. Egalement publié dans *Proceedings of the 16th International Thermal Spray Conference*, Conférence inaugurale, Singapour, 28-31 May 2001, (Ed.) C.C. Berndt, (Pub.) ASM International, 1-34 (2001).
- P6 B. Dussoubs, A. Vardelle, G. Mariaux, N.J. Themelis, P. Fauchais : Modeling of Plasma Spraying of Two Powders, *Journal of Thermal Spray Technology* 10 (1), 105-110 (2001). 6 pages.
- P7 P. Fauchais, A. Vardelle, M. Vardelle, K.-I Li, B. Dussoubs, N.J. Themelis : Controlling Particle Injection in Plasma Spraying *Journal of Thermal Spray Technology* 10 (2), 267-284 (2001). 18 pages. *JTST Best Paper Award 2001*.
- P8 B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Mathematical Modelling of Uranium Dioxide Conversion in a Moving Bed Furnace, *Powder Technology* 128 (2-3), 168-177 (2002). 10 pages.
- P9 B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modelling of a moving bed furnace for the production of uranium tetrafluoride Part 1: Formulation of the model, *Chemical Engineering Science*. 58 (12), 2617 - 2627 (2003). 11 pages.
- P10 B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modelling of a moving bed furnace for the production of uranium tetrafluoride Part 2: Application of the model, *Chemical Engineering Science*. 58 (12), 2629 - 2642 (2003). 14 pages.
- P11 H. Combeau, B. Appolaire, B. Dussoubs, N. Houti : Prediction of the Macro and Microstructures of Solidification in DC Casting of Aluminium, *Aluminium* 80 (6), 614-619 (2004). 6 pages.
- P12 Y.Wang, B. Appolaire, S. Denis, P. Archambault, B. Dussoubs : Study and Modelling of Microstructural Evolutions and Thermomechanical Behaviour during the Tempering of Steel, *Int. J. Microstructure and Materials Properties* 1 (2), 197-207 (2006). 10 pages.

- P13 V.Weber, A. Jardy, B. Dussoubs, D. Ablitzer, S. Rybéron, V. Schmitt, S. Hans, H. Poisson, : A Comprehensive Model of the Electroslag Remelting Process: Description and Validation, *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science* 40B (3), 271-280 (2009) 10 pages.
- P14 A. Kumar, B. Dussoubs, M. Zaloznik, H. Combeau : Effect of Discretization of Permeability Term and Mesh Size on Macro- and Meso-segregation Predictions, *Journal of Physics D : Applied Physics* 42 (10) (2009), article 105503, DOI: 10.1088/0022-3727/42/10/105503. 13 pages.
- P15 L. Mangin, B. Dussoubs, S. Denis, J-P. Bellot : Modelling and experimental study of the deformation of steel parts during heating, *Journal of Heat Treatment and Materials*, 64 (2), 89-93 (2009). 5 pages.
- P16 M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Zaloznik : Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys, *International Journal of Thermal Sciences* 48 (11), 2013-2016 (2009), DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2009.07.024. 4 pages.
- P17 B Dussoubs, A Vardelle, P. Fauchais : 3D modeling of the plasma co-spraying of two dissimilar materials, *High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes*, 15 (1), 39-50 (2011). 11 pages.
- P18 V. De Felice, I. Daoud, B. Dussoubs, A. Jardy, J.P. Bellot : Numerical modelling of inclusion behaviour in a gas-stirred ladle, *ISIJ International*, 52 (7), 1273-1280 (2012). 9 pages.
- P19 A. Jardy, P. Chapelle, A. Malik, J.P. Bellot, H. Combeau, B. Dussoubs : The arc behaviour and Cathode Melting Process during VAR: an Experimental and Numerical Study, *ISIJ International*, 53 (2), 213-220 (2013). 9 pages.
- P20 J.P. Bellot, V. De Felice, B. Dussoubs, A. Jardy, S. Hans : Coupling of CFD and PBE calculations to simulate the behavior of an inclusion population in a gas-stirring ladle, *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*, 45 (1), 13-21 (2014). 9 pages.
- P21 M. Hugo, A. Jardy, B. Dussoubs, J. Escaffre, H. Poisson : Mathematical Modeling of the Mold Current and Its Influence on Slag and Ingot Behavior during ESR, *Journal for Manufacturing Science and Production*, 15 (1), 79–88 (2015). 10 pages.
- P22 M. Hugo, A. Jardy, B. Dussoubs, J. Escaffre, H. Poisson : Influence of the Mold Current on the Electroslag Remelting Process, *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*, 47 (4), 2607-2622 (2016). 16 pages.
- P23 J. Chaulet, A. Kharicha, S. Charmond, B. Dussoubs, S. Hans, M. Wu, A. Ludwig, A. Jardy : A 2D Multiphase Model of Drop Behavior during Electroslag Remelting, *Metals*, 10, 490 ; <https://doi.org/10.3390/met10040490> (2020). 16 pages.
- P24 J. Haag, J. Martens, B. Dussoubs, A. Jardy, J.P. Bellot : Analysis of the Thermal Transfers in a VASM Crucible: Electron Beam Melting Experiment and Numerical Simulation, *Metals*, 10, 1152 ; <https://doi:10.3390/met10091152> (2020) 20 pages.

Publications dans des comptes-rendus de congrès avec comité de lecture

- P25 B.Dussoubs, A. Vardelle, D. Gobin, P. Fauchais : Solidification et refroidissement d'une gouttelette projetée par plasma : détermination de la vitesse de trempe, Actes du Congrès 1995 de la Société Française de Thermique, Poitiers, 361-366 (1995). 6 pages.
- P26 B. Dussoubs, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais : Modelling of a Plasma Spray System, *Proceedings of the Fourth International Thermal Plasma Processes Conference*, Athens Greece, 15-18 July 1996, (ed.) P. Fauchais, (Pub) Begell House, 861-869 (1997). 9 pages.
- P27 B. Dussoubs, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais : 3-D Modelling of plasma spray processing : Effect of Spray Parameters on Particle Spray Pattern and Offset Position, *Proceedings of the Fifth International Thermal Plasma Processes Conference*, St Petersburg, Russia, 13-17 July 1998, (eds.) P. Fauchais and J. Amouroux, (Pub) Begell House, 461-469 (1999). 8 pages.
- P28 M. Vardelle, B. Dussoubs, A. Vardelle, P. Fauchais, T.J. Roemer, R.A. Neiser, M.F. Smith : Influence of Injector Geometry on Particle Trajectories : Analysis of Particle Dynamics in the Injector and Plasma Jet, *Proceedings of the 15th International Thermal Spray Conference*, 25-29 Mai 1998, Nice, 887-894 (1998). 8 pages.
- P29 B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modélisation mathématique de la conversion de l'oxyde d'uranium dans un four à lit coulant, *Actes du Colloque Science et Technologie des Poudres*, 3-5 avril 2001, Nancy. Coordinateur Hervé Muhr, Récents Progrès en Génie de Procédés : Science et Technologie des Poudres (Pub.) Lavoisier Technique et Documentation, 15-2001 (77), 551-556 (2001). 6 pages.
- P30 B. Dussoubs, F. Patisson, J. Jourde, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Simulation d'un four à lit coulant pour la production de tétrafluorure d'uranium, *Actes du 8^{ème} Congrès Francophone de Génie des Procédés*, 17-19 octobre 2001, Nancy. Coordinateurs A. Latifi, J. Boudrant et D. Tondeur, Récents Progrès en Génie de Procédés : information, modélisation, simulation et optimisation (Pub.) Lavoisier Technique et Documentation, 15-2001 (82), 211-219 (2001). 8 pages.
- P31 B. Dussoubs, J.P. Bellot, G. Reiter, J. Flinspach : Numerical Simulation of the EBCHR Operation for Working Towards Optimization and Process Control, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Santa Fe, Etats Unis, 19-21 September 2005, (eds.) P. D. Lee et al., (Pub) ASM International, 233-242 (2005). 10 pages.

- P32 F. Patisson, B. Dussoubs, D. Ablitzer : Using Sohn's Law Of Additive Reaction Times For Modeling A Multiparticle Reactor: The Case Of The Moving Bed Furnace Converting Uranium Trioxide Into Tetrafluoride, *Proceedings of the Sohn International Symposium on Advanced Processing of Metals and Materials*, San Diego, Etats Unis, 27-31 August 2006, (Pub) TMS (2006). CD-Rom. 13 pages.
- P33 B. Dussoubs, J.P. Bellot, U. Biebricher, M. Mede : Modeling and Empirical Results of Aluminum Evaporation in an EBCHR Melt of Ti-6-4, *Proceedings of the International Conference on High-Power Electron Beam Technology*, Reno, Etats-Unis, October 2006, (Ed.) M. Neumann, (Pub.) Von Ardenne Anlagentechnik GmbH. CD-Rom. 10 pages.
- P34 J.P. Bellot, I. Daoud, B. Dussoubs, A. Jardy : Simulation de la flottation dans les poches de traitement d'acier liquide, *Actes du Congrès 2009 de la Société Française de Thermique*, Nice, (2009). 6 pages.
- P35 M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Zaloznik : Benchmark sur la simulation des macroségrégations lors de la solidification d'un alliage : première synthèse, *Actes du Congrès 2010 de la Société Française de Thermique*, Le Touquet, 493-498 (2010). 6 pages.
- P36 A. Kumar, B. Dussoubs, M. Zaloznik, H. Combeau : Influence of Discretization of Permeability Term and Mesh Size on the Prediction of Channel Segregations, *3rd International Conference on Advances in Solidification Processes*, Aachen, Allemagne, 7-10 June 2011. 6 pages.
- P37 A. Malik, B. Dussoubs, P. Chapelle, J.P. Bellot, H. Combeau, A. Jardy : Numerical Simulation of the Melting of the Consumable VAR Electrode – 2D and 3D Effects, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Nancy, France, 25-28 Septembre 2011. 8 pages
- P38 S. Denis, J.P. Bellot, J.F. Douce, L. Mangin, B. Dussoubs, E. Gautier : Numerical Modelling of Heat Treatment: Fluid Flow-Thermal-Metallurgical-Mechanical Couplings, *Proceedings of the Quenching and Control of Distortion Conference*, September 10-13, 2012, Chicago, IL, Etats-Unis.
- P39 J. Chaulet, A. Kharicha, B. Dussoubs, S. Charmond, A. Jardy, S. Hans : DNS and Engineering Modeling of the Electroslag Remelting Process, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Birmingham, Grande-Bretagne, 08-11 Septembre 2019. 10 pages

Publications dans des comptes-rendus de congrès sans comité de lecture

- P39 A.C. Leger, M. Vardelle, A. Vardelle, B. Dussoubs, P. Fauchais : Splat Formation : Ceramic Particles on Ceramic Substrate, *Proceedings of the 8th National Thermal Spray Conference*, 11-15 September 1995, Houston, TX, USA, 169-174 (1995). 6 pages.
- P40 B. Dussoubs, A. Vardelle, K-I Li, M. Vardelle, P. Fauchais : Injection and Trajectories of Particles in D.C. Plasma Spray Processes, *Proceedings of the 12th International Symposium on Plasma Chemistry*, 21-25 August 1995, Minneapolis, MN, USA, 1343-1348 (1995). 6 pages.
- P41 B. Dussoubs, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais, N.J. Themelis : Computational and Experimental Analysis of Particle Injection and Trajectories in a Plasma Spray Process, *Proceedings of the 13th International Symposium on Plasma Chemistry*, 18-22 August 1997, Beijing, China, 2056-2061 (1997). 6 pages.
- P42 B. Dussoubs, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais : Computational Analysis of a Three-Dimensional Plasma Spray Jet, *Proceedings of the International Conference on Phenomena in Ionized Gases XXIII*, 17-22 July 1997, Toulouse, France. 2 pages.
- P43 B. Dussoubs, A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais, N.J. Themelis : Computational Analysis of a Three-Dimensional Plasma Spray Jet, *Proceedings of the 1st Unified Thermal Spray Conference*, 15-18 September 1997, Indianapolis, IN, USA, 557-565 (1997). 9 pages
- P44 M. Leylavergne, A. Vardelle, B. Dussoubs, N. Goubot : Comparison of Plasma Sprayed Coatings Produced in Argon or Nitrogen Atmosphere, *Proceedings of the 1st Unified Thermal Spray Conference*, 15-18 September 1997, Indianapolis, IN, USA, 459-465 (1997). 7 pages.
- P45 B. Dussoubs, F. Patisson, D. Ablitzer, J. Jourde, J.L. Houzelot : Steady-state Numerical Simulation of a Moving Bed Furnace, *Poster Proceedings of the J.K. Brimacombe Conference*, 1-4 October 2000, Vancouver, BC, Canada, 193-205 (2000). 12 pages.
- P46 Y.Wang, B. Dussoubs, B. Appolaire, S. Denis, P. Archambault, G. Cailletaud : Modélisation du traitement thermique de revenu d'aciers, *Comptes-rendus du 33^{ème} Congrès du traitement thermique et de l'ingénierie des surfaces*, A3TS, Reims, 17-19 juin 2005.
- P47 Y.Wang, B. Appolaire, S. Denis, P. Archambault, B. Dussoubs : Study and Modelling of Microstructural Evolutions and Thermomechanical Behaviour during the Tempering of Steel, *Proceedings of the 1st International Conference on Distortion Engineering*, Bremen, Germany, 14-16 September 2005.
- P48 J.P. Bellot, B. Dussoubs, G. Reiter, J. Flinspach : A Comprehensive Numerical Modelling of the Electron Beam Cold Hearth Refining and Ingot Consolidation of Ti Alloys, *Proceedings of the XITC'05 2005', Xi'an International Titanium Conference*, Xi'an, China, 16-19 October 2005. 6 pages.
- P49 L. Mangin, B. Dussoubs, S.Denis, J-P. Bellot : Modelling and experimental study of the deformation of steel parts during heating, *Proceedings of the 2nd International Conference on Distortion Engineering*, Bremen, 17-19 September 2008. 8 pages.

- P50 A. Kumar, B. Dussoubs, M. Zaloznik, H. Combeau : Effect of Discretization of Permeability Term and Mesh Size on Macro- and Meso-segregation Predictions, *Proceedings du 19^{ème} Congrès Français de Mécanique*, Marseille, 24-28 août 2009. 6 pages.
- P51 H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Zaloznik : Formation de macroségrégations pendant la solidification d'un alliage Sn-Pb : Synthèse des premiers résultats d'un benchmark, *Actes du Congrès Matériaux 2010*, Nantes, octobre 2010. 6 pages.
- P52 J.P. Bellot, I. Daoud, B. Dussoubs, A. Jardy : Projet CIREM : simulation du comportement des inclusions dans les poches de traitement d'acier liquide, *Actes du Congrès Matériaux 2010*, Nantes, 2010. 6 pages.
- P53 H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, S. Mosbah, T. Quatruvaux, M. Rady, C.-A. Gandin, B. Goyeau, M. Zaloznik : A Numerical Benchmark on the Prediction of Macro-segregation in Binary Alloys, *TMS 2011, 140th Annual Meeting and Exhibition*, Las Vegas, Etats-Unis, 27 February – 3 March 2011. 8 pages.
- P54 H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Rady, C. A. Gandin, M. Zaloznik : First analysis of a numerical benchmark for 2D columnar solidification, *Conférence STEELSIM*, Düsseldorf (Allemagne), June 2011. 4 pages.
- P55 H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, S. Mosbah, T. Quatruvaux, M. Rady, C.-A. Gandin, B. Goyeau, M. Zaloznik : Analysis of a numerical benchmark for columnar solidification of binary alloys, *TMS 2011, 140th*. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2012. 33:012086. 8 pages.
- P56 M. Hugo, B. Dussoubs, A. Jardy, J. Escaffre, H. Poisson : Impact of the solidified slag skin on the current distribution during electroslag remelting, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Austin, TX, Etats-Unis, 22-25 September 2013. 9 pages.
- P57 J. Chaulet, A. Kharicha, B. Dussoubs, S. Charmond, A. Jardy, S. Hans : DNS and Engineering Modeling of the Electroslag Remelting Process, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Birmingham, Grande Bretagne, 08-11 September 2019. 10 pages.

COMMUNICATIONS ORALES ET POSTERS

Présentations orales

- C1 B. Dussoubs, A. Vardelle, K-I Li, M. Vardelle, P. Fauchais : Comparison Between Single and Double Flow Injectors In Plasma Spraying Process, *8th National Thermal Spray Conference*, 11-15 September 1995, Houston, TX, USA, (1995).
- C2 B. Dussoubs, A. Vardelle, P. Fauchais : Projection par plasma d'arc, conférence présentée à la journée scientifique *Les outils informatiques et la simulation numérique dans le domaine des matériaux*, dans le cadre du groupe de travail "Génie des Procédés d'Elaboration des Matériaux - GPEIMat", organisé par le GFPG et la SF2M, jeudi 23 Mai 1996, ENSCP Paris.
- C3 A. Vardelle, B. Dussoubs, M. Vardelle, P. Fauchais, N.J. Themelis : Transport and Chemical Rate Phenomena in Plasma Spray, *Gordon Conference on Plasma Chemistry*, Tilton, NH, USA, August 1996 (Conférence invitée).
- C4 A. Vardelle, M. Vardelle, P. Fauchais, C. Robert, B. Dussoubs : Impact and Solidification of Plasma-Sprayed Particles, *MRS Conference*, Boston, NJ, USA, December 1997 (Conférence invitée).
- C5 M. Vardelle, B. Dussoubs, A. Vardelle, P. Fauchais : Projection plasma : influence des fluctuations du pied d'arc sur l'injection et le traitement d'un matériau pulvérulent, *3^{èmes} journées d'études sur la fluctuation des arcs dans les plasmatrons*, Bourges, 27-28 avril 1998.
- C6 P. Fauchais, A. Vardelle, M. Vardelle, B. Dussoubs : Quo Vadis Plasma Spraying ?, conférence invitée inaugurale du *15th International Thermal Spray Conference*, Nice, 25-29 May 1998 (publié dans le *Journal of Thermal Spray Technology*).
- C7 B. Dussoubs, A. Vardelle, G. Mariaux : Modélisation tridimensionnelle d'un système de projection plasma à l'aide du logiciel ESTET 3.2. Club EDF les Renardières, 26 novembre (1998).
- C8 B. Dussoubs : Quelques aspects de la simulation numérique des fours à lits coulants utilisés dans la conversion des oxydes d'uranium. Réunion du club simulation numérique, ENSIC Nancy, 18 décembre 2000.
- C9 B. Dussoubs, F. Patisson : Modèle du four à lit coulant LC06 COMURHEX Malvés. Avancement des travaux de mars 1999 à juin 2002. Séminaire de formation sur le logiciel four LC, COMURHEX Pierrelatte, 01-05 juillet 2002.
- C10 B. Dussoubs, J.P. Bellot : Simulation of the EBCHR Remelting of Ti6-4 using CHAOS Code, Réunion LSDG2M-ALD, Hanau (Allemagne), 4 mars 2004.
- C11 S. Denis, B. Dussoubs, Y. Wang : Utilisation de Zebulon pour la simulation de la trempe et du revenu des aciers austénitiques, réunion du club Zebulon, 7 décembre 2004, Paris.

- C12 Y. Wang, S. Denis, P. Archambault, B. Dussoubs : Etude et modélisation de l'effet du revenu sur les évolutions des microstructures, du comportement thermomécanique et des contraintes résiduelles de trempe, Réunions de travail du Simulforge, Paris, 16 mars 2004, 16 septembre 2004, 08 mars 2005.
- C13 J.P. Bellot, B. Dussoubs, G. Reiter, J. Flinspach : Simulation numérique du procédé de refusion par bombardement électronique, Séminaire du LSG2M, 12 janvier 2006.
- C14 B. Dussoubs, J.P. Bellot : Comparison between Numerical Results with Data of Melting Trials Performed by ALD, reunion ALD – LSG2M, 22 février 2006, Hanau (Allemagne).
- C15 B. Dussoubs : La simulation numérique au LSG2M, Séminaire du LSG2M, 8 juin 2006.
- C16 L. Mangin, B. Dussoubs, J.P. Bellot, S. Denis : Etude expérimentale et modélisation des processus de déformation de produits en acier au cours du chauffage, Journées MECAMAT 2008, 2 avril 2008, Paris.
- C17 H. Combeau, M. Bellet, Y. Fautrelle, D. Gobin, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Rady, C. A. Gandin, M. Založnik : First analysis of a numerical benchmark for 2D columnar solidification, Conférence STEELSIM, Düsseldorf (Allemagne), June 2011.
- C18 J.P. Bellot, S. Denis, B. Dussoubs, J.F. Douce, L. Mangin : Coupling of Numerical Simulations of Fluid Flow and Steel Bodies during Heat Treatments, CFD Days ArcelorMittal, Maizières-les-Metz, 31 janvier 2012.
- C19 B. Dussoubs : EXPLOR: Equipment for Scientific Computing in Lorraine, A mid-scale computing centre, CFD Days ArcelorMittal, Maizières-les-Metz, 02 février 2012.
- C20 B. Dussoubs : Le mésocentre lorrain EXPLOR, Montage du projet et GreenIT, Journées scientifiques mésocentres et France grilles, Paris, 2 octobre 2012.
- C21 B. Dussoubs : Les bibliothèques de calcul scientifique, application au domaine des plasmas, Journées du Réseau Plasmas Froids, La Rochelle, 23 octobre 2014

Posters

- C22 B. Dussoubs, C. Robert, A.C. Leger : Solidification d'une lamelle projetée par plasma, poster pour les *1ères Journées des Jeunes Chercheurs Céramistes*, 9-11 Février 1995, l'Arbresles.
- C23 M. Vardelle, B. Dussoubs, P. Fauchais : Dispositif de contrôle en ligne d'une installation de projection thermique industrielle, *Réunion du Club EDF "Chimie des Hautes Températures"*, jeudi 4 décembre 1997, Chatou.
- C24 V. Weber, A. Jardy, B. Dussoubs, D. Ablitzer, S. Hans, S. Ryberon : Simulation numérique du procédé de refusion sous laitier électroconducteur, *Réunion de l'Ecole Doctorale EMMA*, 11 mai 2006, Nancy.
- C25 A. Malik, H. Combeau, A. Jardy, B. Dussoubs, F. Kosior : STRIPES : un logiciel de simulation tridimensionnelle des procédés d'élaboration et de la solidification, *Réunion de l'Institut Carnot ICEEL*, 19 mai 2010, Nancy.
- C26 A. Malik, H. Combeau, A. Jardy, B. Dussoubs, F. Kosior : Simulation tridimensionnelle des procédés d'élaboration et de la solidification, *Réunion de l'Ecole Doctorale EMMA*, 10 juin 2010, Nancy.

OUVRAGES SCIENTIFIQUES

- O1 S. Descombes, B. Dussoubs, S. Faure, L. Gouarin, V. Louvet, M. Massot, V. Miele (Eds.), *Proceedings of CEMRACS 2012*, Marseille, 16 juillet - 24 août 2012, ESAIM, 43, 2013.
- O2 B. Dussoubs : Science des Matériaux Numérique, *Magazine de l'Académie Lorraine des Sciences n°6 : les matériaux de demain*, septembre 2017. 1 page.

RAPPORTS SCIENTIFIQUES

- R1 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modélisation numérique du four à lit coulant LC06 pour la production d'UF₄ : Raccordement entre les différentes zones et description de la zone intermédiaire, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, décembre 1999. 44 pages.
- R2 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modélisation numérique du four à lit coulant LC06 pour la production d'UF₄ : Influence du dépolymériseur et utilisation de fluorure d'hydrogène dilué, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, juin 2000. 28 pages.
- R3 B. Dussoubs, A. Génin, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Simulation du four à lit coulant pour la production d'UF₄ : Injection d'HF aqueux en bas de la zone d'hydrofluoration verticale, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, septembre 2000. 27 pages.
- R4 A. Jardy, B. Dussoubs, D. Ablitzer : Use of the Enhanced Solar Code to Simulate a Ti-6-4 Melt, *Rapport d'avancement TIMET - LSG2M*, décembre 2000. 33 pages.
- R5 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Progression Optimale de Température dans les fours à lit coulant LC06, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, mai 2001. 43 pages.
- R6 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Simulation du four à lit coulant LC06 : Injection de réactif gazeux en ZFV2, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, septembre 2001. 48 pages.

- R7 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Simulation du four à lit coulant LC06 : Remplacement de l'ammoniac injecté en zone de réduction par un mélange hydrogène azote, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, juin 2002. 26 pages.
- R8 B. Rouaiguia, B. Dussoubs, A. Jardy : Améliorations de l'interface de saisie du logiciel SOLAR, *Rapport d'avancement LSG2M*, juin 2002. 8 pages.
- R9 B. Rouaiguia, B. Dussoubs, A. Jardy : Recent Improvement of the SOLAR Interface, *Rapport d'avancement TIMET - LSG2M*, juillet 2002. 7 pages.
- R10 B. Dussoubs, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Prise en compte de nouvelles réactions chimiques dans la zone de réduction du modèle de four à lit coulant LC06, *Rapport d'avancement COMURHEX - LSGC - LSG2M*, novembre 2002. 54 pages.
- R11 B. Dussoubs, R. Larue, JP. Bellot : Simulation of the EBCHR Remelting of Ti64 using CHAOS Code, *Rapport d'avancement ALD - LSG2M*, novembre 2004. 95 pages.
- R12 B. Dussoubs, H. Combeau : Benchmark du code SOLID – Comparaison des versions 2.5 et 3.6.2, *Rapport présenté à la réunion du Club des utilisateurs de SOLID*, novembre 2005. 55 pages.
- R13 B. Dussoubs (sous la coordination de) : Projet de création d'un Centre de Compétences Sciences Numériques, Institut Jean Lamour, *Rapport fourni dans le dossier "Institut Jean Lamour" porté par Jean Marie Dubois et fourni à nos tutelles*, décembre 2005. 85 pages.
- R14 B. Dussoubs, S. Denis : Trempe d'un cylindre d'austénite – Comparaison des résultats de Sysweld et Zebulon, , *Rapport pour le Centre des Matériaux, Ecole des Mines de Paris*, mars 2006. 10 pages.
- R15 B. Dussoubs, H. Combeau : Programme Cone 2D – Comparaison des versions, *Rapport pour la société SCC*, avril 2006. 24 pages.
- R16 B. Dussoubs, S. Denis : Trempe d'un cylindre de 900°C à 20°C avec transformation martensitique, *Rapport adressé au Pr. Martha Guerrero, Universidad de Nuevo Leon, Laboratorio de Ingeniería de Materiales, Mexique*, avril 2006. 15 pages.
- R17 B. Dussoubs, S. Denis : Trempe d'un cylindre d'austénite – Comparaison des résultats de Sysweld et Zebulon, partie 2, *Rapport pour le Centre des Matériaux, Ecole des Mines de Paris*, mai 2006. 16 pages.
- R18 B. Dussoubs, S. Denis : Utilisation du logiciel ZeBuLoN au LSG2M, 2002 – 2008, *Rapport pour le Centre des Matériaux, Ecole des Mines de Paris*, juillet 2008. 11 pages.
- R19 B. Dussoubs, A. Kumar, H. Combeau : Analyse statistique des cartographies de composition dans le cadre du benchmark du projet SMACS : quelques pistes, *Rapport pour le groupe de projet SMACS*, janvier 2009. 21 pages.
- R20 B. Dussoubs, F. Patisson : Effet des caractéristiques physiques des boulets entrant dans le four LC06 sur la conversion en dioxyde d'uranium, *Rapport AREVA-IJL*, février 2011. 55 pages.

RAPPORTS DE STAGE

- R21 O. Perrin : Modification d'un programme de visualisation des résultats issus d'un modèle de four à lit coulant, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université Nancy 2*, juin 2000.
- R22 B. Rouaiguia : Développement d'un pré-processeur et d'un post-processeur pour l'interface de saisie du logiciel SOLAR, *Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré*, septembre 2002.
- R23 N. Benziane : Mise en place d'une démarche maintenance d'intégration des nouveaux équipements sur le périmètre prestataires chez LEGRAND Limoges (87), *Rapport de stage entreprise 3^{ème} année, FITI MGP, Ecole des Mines de Nancy, INPL*, septembre 2002.
- R24 S. Santos : Améliorations apportées à l'interface d'un logiciel de simulation numérique : SOLAR, *Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré*, septembre 2003.
- R25 J. Truchot : Création d'une interface graphique de visualisation de structures de solidification, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université Nancy 2*, juin 2004.
- R26 K. Mouzouri : Interface graphique du logiciel de simulation numérique SOLAR : de la version 3.3 à la version 4.0, *Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré*, septembre 2004.
- R27 D. Donnot : L'interface graphique de SOLAR version 4.1, *Rapport DESS Compétence Complémentaire Informatique, ISIAL, Université Henri Poincaré*, septembre 2005.
- R28 F. Martorello : L'interface graphique de SOLAR version 4.3, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université Nancy 2*, juin 2007.
- R29 D. Diarrassouba : L'interface graphique de SOLAR version 4.5, *Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI*, septembre 2009.
- R30 O. N'Diaye : L'interface graphique de SOLAR version 4.6, *Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI*, septembre 2010.
- R31 T. Amoussa : L'interface graphique de SOLAR version 5.0, *Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI*, septembre 2011.

- R32 B. Benmessaoud : L'interface graphique de SOLAR version 5.1, *Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI*, septembre 2012.
- R33 A. Elsayed : L'interface graphique de SOLAR version 5.2, *Rapport Master Compétence Complémentaire Informatique, Faculté des Sciences Orsay, Université Paris XI*, septembre 2013.
- R34 D. Claude : L'interface graphique de SOLAR version 5.5, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université de Lorraine*, juin 2017.
- R35 G. Toussaint : L'interface graphique de SOLAR version 5.6, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université de Lorraine*, juin 2018.
- R36 F. Spatz : L'interface graphique de SOLAR version 5.7, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université de Lorraine*, juin 2019.
- R37 B. Bardet : L'interface graphique de SOLAR version 5.8, *Rapport DUT Informatique, IUT Charlemagne, Université de Lorraine*, septembre 2020.

THÈSES CODIRIGÉES

- T1 A. Malik : Simulation Tridimensionnelle des Procédés d'Elaboration et de Solidification, *Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine*, 28 février 2012.
- T2 M. Hugo : Modélisation de la Refusion ESR d'Aciers Spéciaux et Superalliages Base Nickel, *Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine*, 25 juin 2014.
- T3 J. Chaulet : Modélisation du Procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur : Représentation des transferts énergétiques métal-laitier, *Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine*, 11 mai 2021.

ACTIVITÉS DE RECHERCHE

*Je me disais que j'allais écouter vos théories, les rejeter,
puis ne garder que la mienne. Comme d'habitude*

Dr. G. House, 2009

Mes activités de recherche s'inscrivent dans le cadre de la simulation numérique des procédés d'élaboration au sens large, à haute température (traitements de surface, synthèse des matériaux, procédés pyrométallurgiques et solidification des alliages métalliques), pour des matériaux aussi bien céramiques que métalliques.

NB : dans la mesure où chaque étude présentée ci-dessous est accompagnée d'une publication au moins, je n'en résume que les grandes lignes et je renvoie le lecteur à l'article pour plus de détails et pour les références associées.

A. Simulation tridimensionnelle du procédé de projection par plasma thermique (P1-7, P17, P25-28, P40-44, C1-7 ; P6 incluse ci-après)

Dans un premier temps, j'ai travaillé au cours de ma thèse (1994-1998) sur la modélisation tridimensionnelle du procédé de projection par plasma thermique à l'aide d'un logiciel commercial, ESTET (pour Ensemble de Simulation Tridimensionnelle des Ecoulements Turbulents). Ce code fortran était développé par la société Simulog en relation avec le Centre de Recherche d'EDF Renardières, et nous disposions des sources afin de pouvoir adapter celui-ci à notre problématique de recherche.

C'est dans les années 80 que les transferts de chaleur et de quantité de mouvement entre un écoulement à haute température et une particule unique ont commencé à être étudiés numériquement. Rapidement, les chercheurs ont conclu qu'il fallait prendre en compte un certain nombre de phénomènes dans un plasma thermique : des effets de couche limite, l'effet Knudsen, les modifications de coefficients de traînée ou la vaporisation par exemple. L'injection ponctuelle des particules, en général en 1 ou 2 points orthogonalement à l'écoulement de plasma, ainsi que la turbulence de l'écoulement et ses interactions avec le(s) jet(s) porteur(s) de particules, nécessitent une simulation tridimensionnelle pour se rapprocher des conditions expérimentales.

Ma thèse était la première tentative de simulation en 3D du procédé au sein de l'équipe plasmas du LMCTS, avec le choix d'utiliser un code commercial tridimensionnel (devant la difficulté de développer un code « maison » pour représenter l'ensemble des phénomènes) mais adaptable par l'utilisateur au procédé qu'il souhaite décrire. Mes interventions ont principalement concerné :

- Le calcul des propriétés thermodynamiques et de transport dans des gammes de températures pouvant aller de la température ambiante jusqu'à 15 000 K pour les gaz de projection (Ar, Ar-He, Ar-H₂, Ar-H₂-He et N₂-H₂). Ceci nécessitait d'une part de tenir compte des phénomènes de dissociation des molécules et d'ionisation des atomes, d'autre part d'adapter des lois de mélange pour les différentes espèces,
- Le calcul des trajectoires de particules au sein de l'écoulement,
- La simulation des interactions entre un jet à haute température, donc de densité très faible, avec un autre jet, ou avec l'air ambiant, nettement plus froid et plus dense.

Les principaux points de la thèse ont porté sur :

- L'interaction du jet de plasma avec le gaz ambiant, le gaz porteur de poudre et la cible,
- L'influence des conditions de projection sur le traitement de la poudre pour des conditions industrielles de projection,

- L'étude de l'injection, qui a montré les limitations des modèles bidimensionnels pour prédire correctement la position et la taille de la tâche d'impact des particules sur le substrat,
- L'effet, sur le traitement des particules, des fluctuations du jet induites par le mouvement du pied d'arc dans la tuyère (à l'aide d'un modèle bidimensionnel transitoire additionnel).

Lors de chaque étape du développement de la simulation, une comparaison des résultats numériques aux mesures effectuées sur des jets de plasma au laboratoire a permis de valider le code dans le cadre de la projection par plasma thermique.

À titre d'exemple, il a été possible de comparer l'effet de la position du lieu d'injection sur la répartition des particules au niveau du substrat lorsqu'on injecte deux matériaux différents. La figure 1 présente le domaine de calcul utilisé : l'entrée des gaz du plasma est à gauche, le substrat à droite, positionné à 100 mm. L'injection des poudres peut se faire soit par un seul injecteur perpendiculaire au jet de plasma, soit par 2 injecteurs en regard (le domaine est tridimensionnel, mais seul le plan contenant les injecteurs est présenté ici).

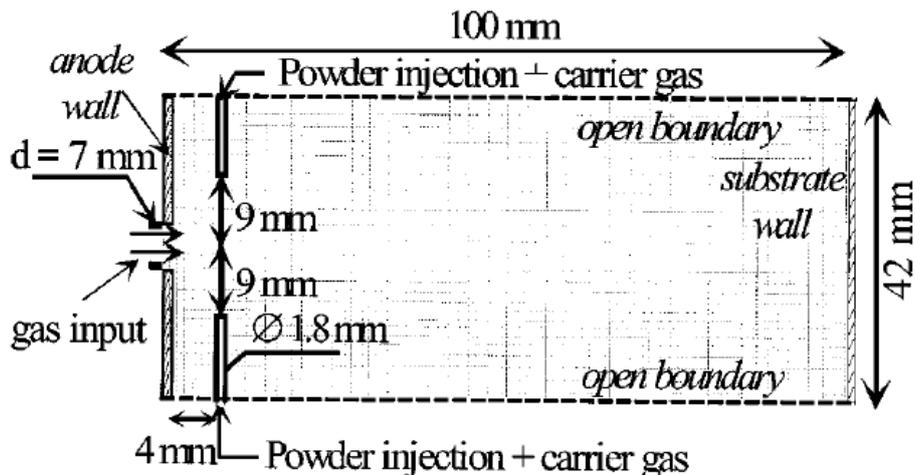
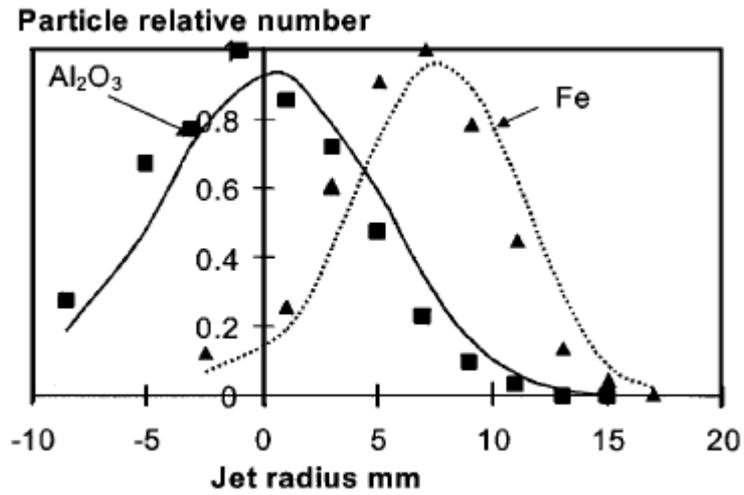


Figure 1 : Domaine de calcul utilisé.

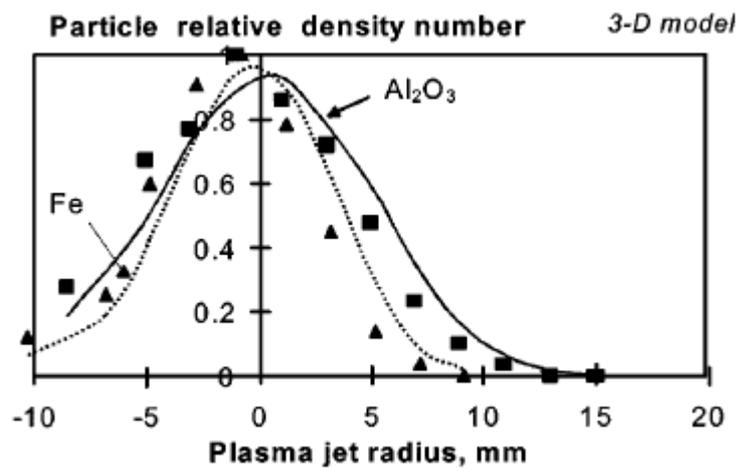
Les figures 2 a) et b) présentent la distribution des particules dans le plan correspondant à la figure 1, respectivement selon que les 2 poudres (alumine et fer) sont injectées par le même injecteur (situé en haut), ou que chacune est injectée par un des deux injecteurs.

Dans le cas a), les particules sont mélangées au départ, mais du fait de la densité plus grande de celles de fer, leur pénétration dans le plasma au point d'injection est plus importante, d'où un décalage entre les distributions au niveau du substrat.

Dans le cas b), le débit de gaz porteur des particules peut être adapté pour chaque type de matériau. En conséquence, il est possible de faire se superposer les deux distributions au niveau du substrat.



a)



b)

Figure 2 : Distribution des particules d'alumine et de fer au niveau du substrat, lorsque les deux poudres sont injectées a) par le même injecteur ; b) chacune par un injecteur.

On notera dans cette activité quelques constantes qui se maintiendront dans mes activités de modélisation postérieures : la nécessité de pouvoir adapter, lorsqu'on l'utilise, un code généraliste. Ce dernier permet certes de s'affranchir de la complexité de développement, pour par exemple traiter les problèmes tridimensionnels, mais n'est utilisable pour simuler les procédés complexes que si on peut « entrer » au sein de celui-ci ses propres lois et codes de traitement ; également la nécessité de simuler des procédés à différentes échelles en utilisant des lois de passage entre ces différentes échelles.

Ci-après est inséré l'article suivant :

B. Dussoubs, A. Vardelle, G. Mariaux, N.J. Themelis, P. Fauchais : Modeling of Plasma Spraying of Two Powders, *Journal of Thermal Spray Technology* 10 (1), 105-110 (2001). 6 pages.

Pour des raisons de copyright, les publications ne peuvent pas être incluses dans le document téléchargeable en ligne

B. Simulation du procédé d'hydrofluoration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure (P8-10, P29-30, P32, P45, C8-9 ; P9-10 incluses ci-après)

Par la suite, j'ai été recruté au LSG2M, à l'École des Mines de Nancy, au sein de l'équipe « procédés d'élaboration » afin de développer (1999-2002) un code simulant le procédé d'hydrofluoration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure dans un four à lit coulant, étape postérieure à la purification du minerai et préalable à son enrichissement, dans la filière française d'élaboration du combustible nucléaire civil. Cette action, débutée en 1995, a d'abord consisté à modéliser dans sa globalité et sa complexité un réacteur de génie des procédés utilisé à une échelle industrielle. Entre autres difficultés de cette modélisation, on peut citer la taille (9 m de long avec une partie verticale et une autre horizontale, pour 0,25 à 0,5 m de diamètre pour l'ensemble du réacteur) et surtout les différentes échelles impliquées (le réacteur est partiellement rempli de boulets d'une taille moyenne de 2 cm, chacun siège de réactions gaz-solide), la complexité de l'écoulement (le solide descend par gravité dans le réacteur, et rencontre à contre-courant du fluorure d'hydrogène gazeux), les différentes réactions mises en jeu (réduction d'une part, hydrofluoration d'autre part qui est par ailleurs fortement exothermique), l'hostilité du milieu (températures élevées, radioactivité, présence de fluorure d'hydrogène gazeux) qui empêche des mesures in-situ, etc.

La figure 3 présente le four LC. Dans la première zone (zone de réduction), du trioxyde d'uranium est introduit sous forme de boulets qui rencontrent à contre-courant un flux d'ammoniac craqué. A la fois par calcination et par réduction à l'hydrogène issu du craquage de l'ammoniac, UO_3 se transforme en U_3O_8 . Une seconde réduction conduit au dioxyde d'uranium UO_2 .

Dans la deuxième partie du four (zone d'hydrofluoration verticale puis zone d'hydrofluoration horizontale), les boulets de dioxyde d'uranium rencontrent cette fois du fluorure d'hydrogène à contre-courant. Une réaction d'hydrofluoration conduit à former le tétrafluorure d'uranium UF_4 en sortie de four. Ce dernier sera transformé ultérieurement en hexafluorure UF_6 à l'usine de Pierrelatte, étape ultime avant l'enrichissement de l'uranium. Des moufles sont disposés dans différentes zones du four afin de réchauffer localement les produits. Dans la zone d'hydrofluoration verticale, un échangeur de chaleur évite une trop grande élévation de température du fait de l'exothermicité de la réaction d'hydrofluoration.

L'opération des fours sur le site industriel de la société partenaire Comurhex, filiale de Framatome, était déjà optimisée, mais fortement basée sur la compétence des opérateurs qui se transmettaient des règles génération après génération (par exemple, en cas de montée en température trop forte dans une zone d'hydrofluoration, les boulets peuvent se ramollir et boucher la descente des suivants, d'où un accroissement du phénomène par la stagnation des boulets réagissant. Les opérateurs savaient alors qu'il fallait taper avec un maillet sur les parois du four afin de forcer la descente des boulets). Par ailleurs, les boulets sortant du four pouvaient afficher un taux de conversion de 95% et plus, mais un gain de 1% de conversion dans les 5% les plus difficiles à atteindre, pouvait se traduire par un gain financier non négligeable. Un modèle du procédé, capable de prédire le comportement des fours de façon globale, et pouvant par la suite être utilisé pour l'optimisation du procédé (à fins de gains de taux de conversion) ou pour une étude des effets de telle ou telle modification des conditions d'utilisation (limitation des émissions d'ammoniac liées à la réaction de réduction en entrée du four) pouvait s'avérer extrêmement utile.

Le modèle développé fait intervenir plusieurs échelles : la simulation du réacteur global est réalisée grâce à une méthode aux volumes finis en 2 dimensions dans sa partie verticale. La partie horizontale, traversée par une vis sans fin pour l'extraction du solide, est, elle, modélisée via une approche de type systémique (succession de réacteurs parfaitement agités). Pour ne pas avoir à modéliser chaque boulet indépendamment de ses voisins à l'intérieur du réacteur, une loi de temps caractéristiques additifs permet de modéliser les réactions à cette échelle.

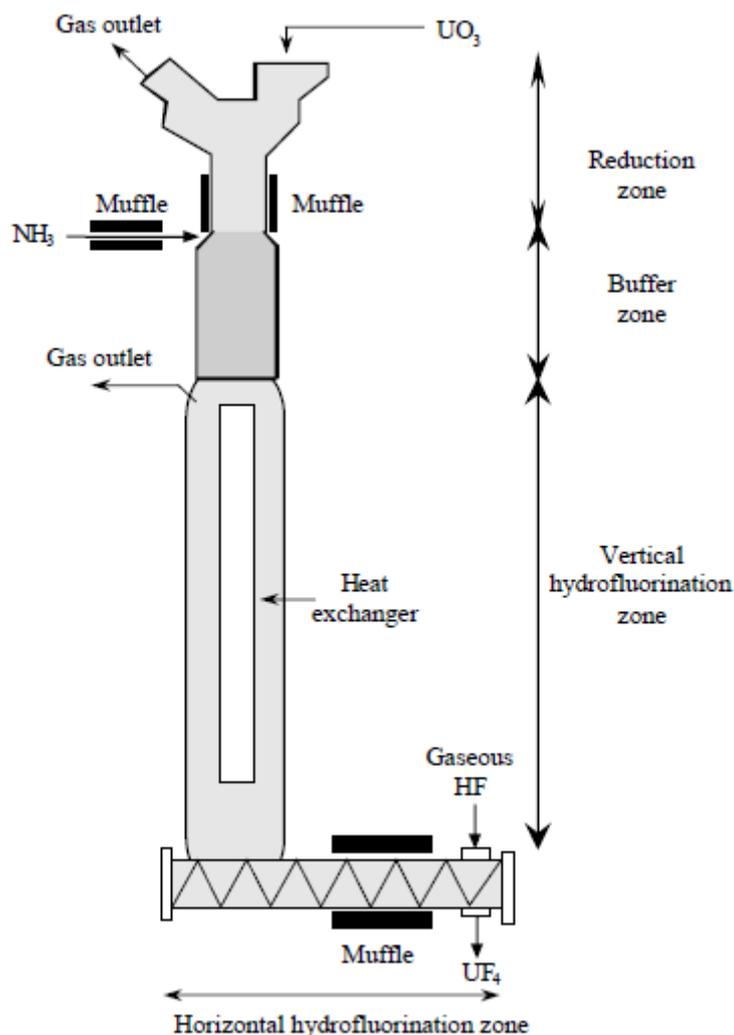


Figure 3 : Représentation schématique du four LC

La figure 4 présente un résultat typique issu des simulations, à savoir la carte de température dans les différentes zones du four. La zone de température élevée en haut de la zone de réduction est le lieu de la première réduction ($UO_3 \rightarrow U_3O_8$). En bas de cette zone, la température décroît nettement, du fait qu'une partie de la vapeur d'eau produite par la réaction d'hydrofluoration dans la zone inférieure est injectée dans la zone de réduction.

Dans la zone d'hydrofluoration, la réaction correspondante est très exothermique, mais le pic de température est situé plutôt en bas de la zone verticale. En effet, du fait du contre-courant, les boulets d' UO_2 peu ou pas converti en haut rencontrent peu de fluorure d'hydrogène car ce dernier, injecté en sortie du four, a déjà été consommé en amont. À contrario, le gaz « frais » entrant dans le four rencontre des boulets proches de leur sortie et déjà fortement convertis. Dans les deux cas, la réaction se produit faiblement. C'est donc dans une zone intermédiaire qu'elle est la plus forte, quand des boulets encore peu convertis rencontrent suffisamment de gaz n'ayant pas encore réagi.

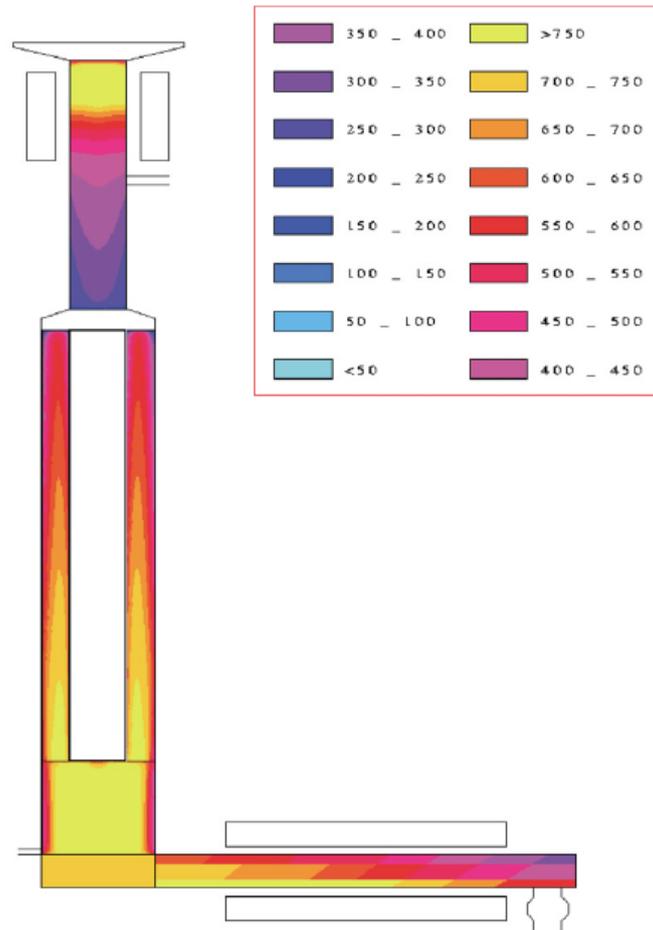


Figure 4 : Carte de température dans le four LC

Les résultats obtenus par le modèle ont été comparés aux rares mesures expérimentales disponibles : profils axiaux de température en conditions nominales de fonctionnement, taux de conversion moyen des boulets en sortie de four, etc. Par la suite, des cartographies globales de température et de taux de conversion, entre autres, ont permis de mettre en lumière certaines caractéristiques : dans la zone verticale, la conversion n'est pas constante radialement, elle est plus importante près des parois, dans les zones les plus froides. Par ailleurs, une optimisation de la conversion passe par la rencontre des boulets peu transformés avec du gaz « frais » disponible. Or la construction même du four fait que le gaz frais rencontre des boulets très convertis (en sortie de four) et qu'à contrario, en entrée, les boulets peu convertis rencontrent le gaz résiduel qui a traversé tout le lit. Notre modélisation a ainsi pu proposer des pistes d'optimisation du procédé, via des injections transversales de gaz réactif : son injection dans les zones plus chaudes permet d'abaisser localement la température, ce qui favorise la conversion. Un four moins long peut alors produire un tétrafluorure en plus grande quantité. Ceci a été corroboré par des essais menés sur un des fours de l'usine de Malvésí, et les injections transversales ont d'ailleurs été adoptées industriellement.

Je présente ci-dessous un exemple d'utilisation du modèle : l'étude des effets de la variation de certains paramètres opératoires, ici le débit de HF entrant dans le four.

La figure 5 montre les isovaleurs de fraction massique de tétrafluorure d'uranium et de température dans un cas de référence, alors que sur la figure 6, on observe les mêmes résultats si le débit d'entrée de fluorure d'hydrogène est augmenté de 20%.

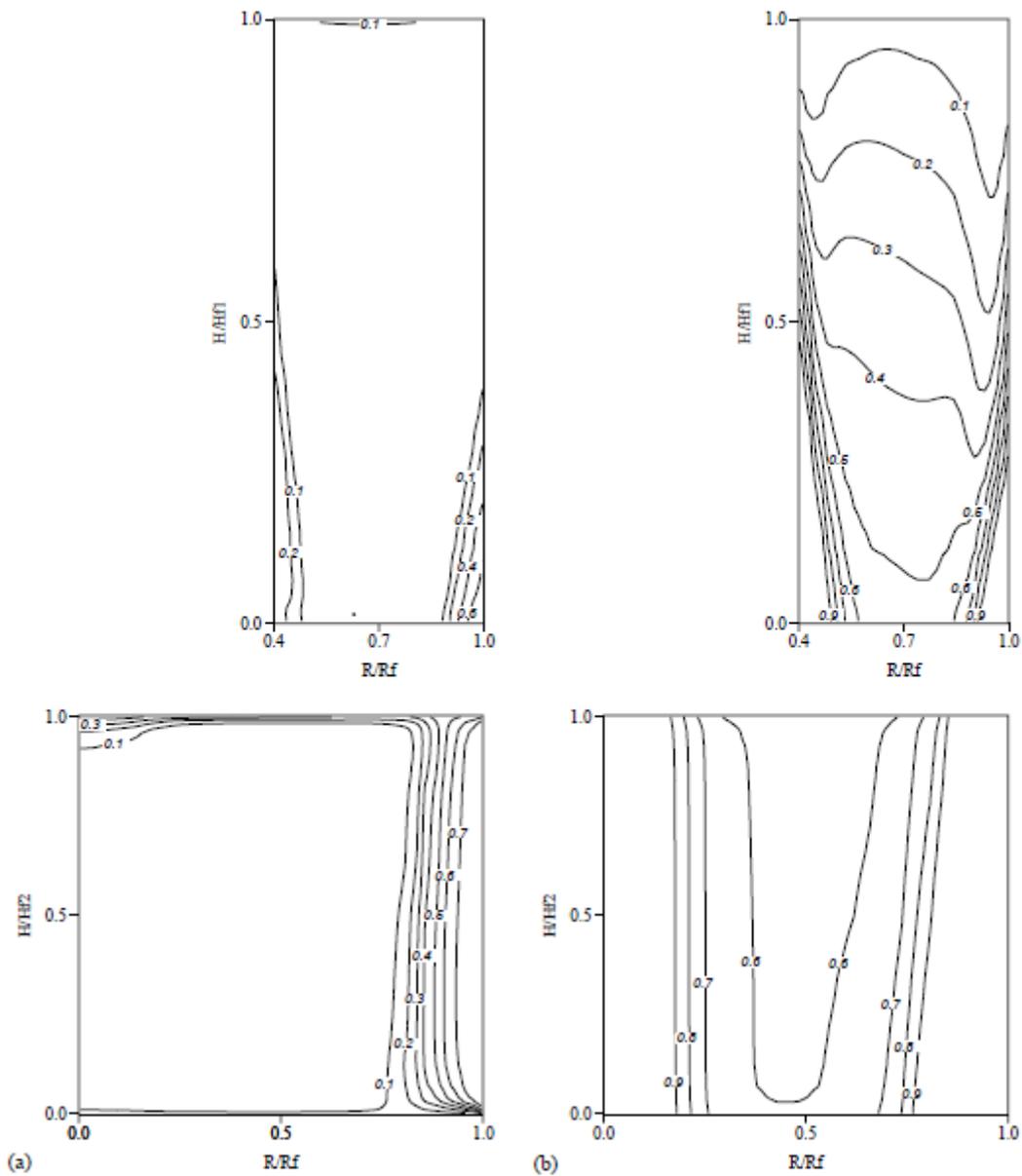


Figure 5 : Isovaleurs dans la zone d'hydrofluoruration verticale a) fraction massique d' UF_4 , b) température $^{\circ}C$. Cas de référence.

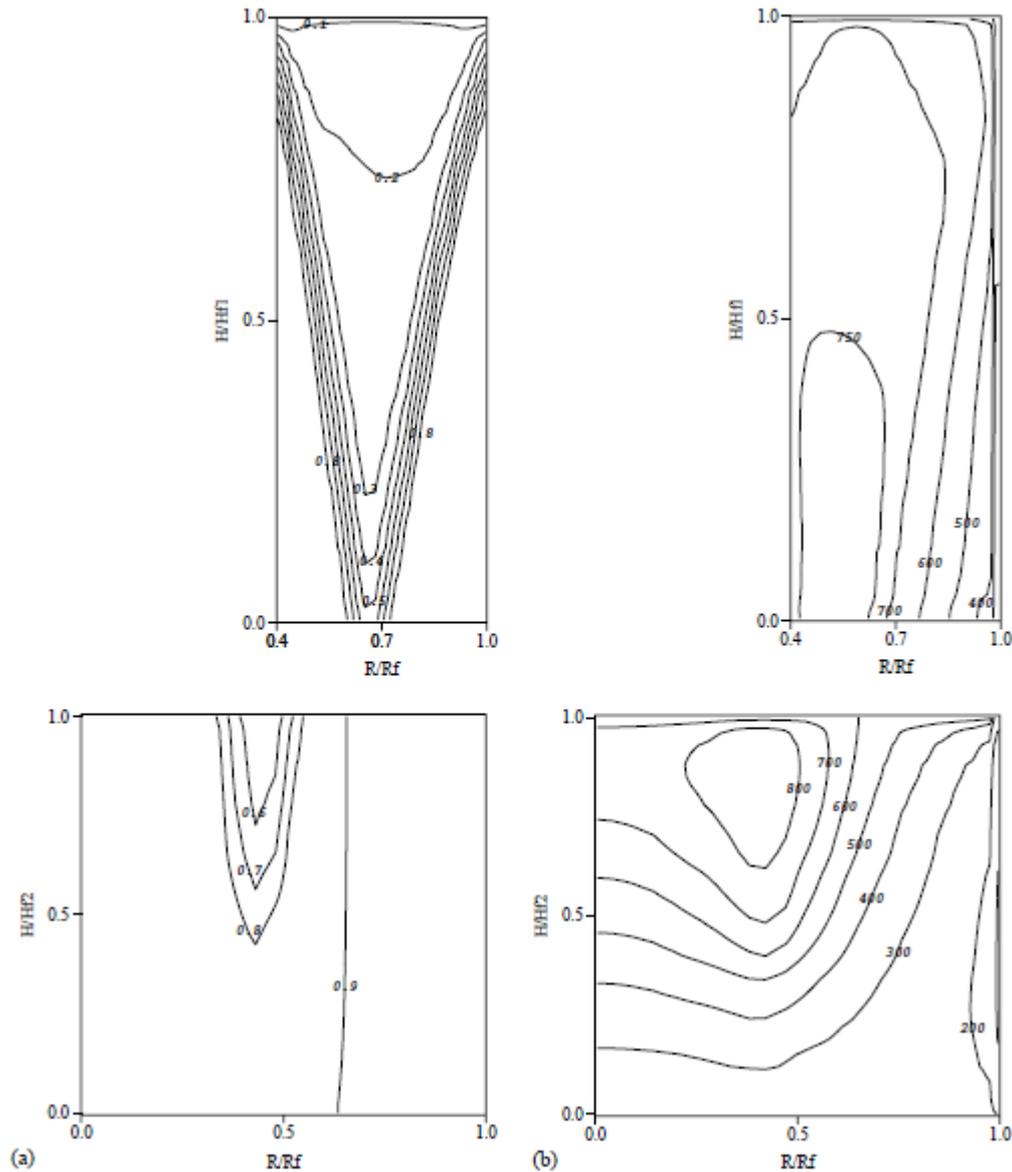


Figure 6 : Isovaleurs dans la zone d'hydrofluoruration verticale a) fraction massique d'UF₄, b) température °C. Cas où le débit d'entrée de HF est augmenté de 20% par rapport au cas de référence.

Dans les conditions de fonctionnement de référence, le débit de fluorure d'hydrogène entrant dans la zone d'hydrofluoruration verticale ne dépasse que légèrement la quantité stœchiométrique requise pour une conversion complète du dioxyde d'uranium. Comme on peut le voir sur la figure 6, un excès de HF favorise la conversion dans la zone d'hydrofluoruration verticale. En bas de cette zone, la fraction massique moyenne d'UF₄ est plus élevée de 12% par rapport à celle dans le cas de référence. De la même façon, le long de la paroi extérieure du four, plus froide et où la conversion est plus importante, du HF reste disponible jusqu'à une hauteur plus élevée, entraînant ainsi un plus grand écart à l'équilibre, et donc un taux d'hydrofluoruration plus élevé.

On pourrait donc considérer cette augmentation d'apport en gaz comme bénéfique à la conversion (à relativiser toutefois du fait de la présence plus importante de HF dans les gaz rejetés en regard de sa nocivité). Mais étonnamment, on constate que la fraction massique d'UF₄ à la sortie du four est inférieure à celle du cas de référence ! Ce résultat surprenant s'explique par le comportement des réactifs dans la zone de réduction.

En effet, si on augmente le débit de gaz en entrée, toutes choses égales par ailleurs, le débit de gaz provenant de la zone d'hydrofluoruration et entrant par le bas de la zone de réduction augmente aussi, ce qui réduit la température dans cette zone, et défavorise la réduction. Les boulets entrant en zone d'hydrofluoruration sont donc moins convertis en UO₂. Ceci révèle la forte interdépendance entre les zones. Si une augmentation du débit d'entrée de HF est une solution envisageable pour

favoriser la production d'UF₄, il faut donc faire attention à réduire le débit gazeux entrant dans la zone de réduction depuis la zone d'hydrofluoration.

Nous avons également mené une étude sur la faisabilité du remplacement de l'ammoniac partiellement craqué en zone de réduction par un mélange hydrogène-azote nettement moins nocif. Les calculs ont montré que ce remplacement est possible, mais à condition d'introduire suffisamment d'hydrogène pour assurer la réduction complète du trioxyde d'uranium, et de réduire la température, qui n'est plus diminuée du fait de l'absence de craquage endothermique.

Nous avons eu l'occasion, lors de cette étude, de développer un code de calcul d'une part très intéressant sur un plan de recherche, à la fois pour les problématiques numériques que nous avons dû résoudre et pour les connaissances scientifiques que nous avons acquises, et d'autre part directement appliqué à des problématiques industrielles et utilisable dans le secteur aval. Le code a d'ailleurs été transféré aux utilisateurs industriels lors d'une semaine de formation sur site que j'ai menée. Il a par la suite été utilisé comme outil prédictif par les ingénieurs de l'usine.

Dans cette étude, on retrouve l'aspect multi-échelle et l'utilisation de lois de passage entre ces échelles, mais cette fois nous avons entièrement développé un code « maison » dédié, qui fait intervenir des approches à la fois mécanistique et systémique. Enfin, le modèle simule un réacteur à l'échelle industrielle, pour lequel les possibilités de mesure sont rares et le développement d'une maquette à l'échelle du laboratoire extrêmement compliqué.

Ci-après sont insérés les articles suivants :

B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modelling of a moving bed furnace for the production of uranium tetrafluoride Part 1: Formulation of the model, *Chemical Engineering Science*. 58 (12), 2617 – 2627 (2003). *11 pages*.

B. Dussoubs, J. Jourde, F. Patisson, J.L. Houzelot, D. Ablitzer : Modelling of a moving bed furnace for the production of uranium tetrafluoride Part 2: Application of the model, *Chemical Engineering Science*. 58 (12), 2629 – 2642 (2003). *14 pages*.

C. Simulation des procédés d'élaboration des alliages

Mes activités actuelles portent principalement sur la modélisation des procédés pyrométallurgiques (élaboration par bombardement électronique, refusion à l'arc sous vide et sous laitier électroconducteur). Là aussi, des codes de calcul du procédé permettent à la fois de faire progresser les activités de recherche tout en étant partagés avec nos partenaires industriels au sein d'un club d'utilisateurs.

C.1 Modélisation du bombardement électronique dans un four BE (P31, P33, P48, C10 ; P31 incluse ci-après)

La demande de produits métallurgiques toujours plus performants nécessite un très bon contrôle du traitement des alliages afin de :

- Réduire la présence des éléments résiduels tels que l'oxygène et l'azote,
- Maitriser la quantité de défauts (porosité, inclusions, etc.),
- Mieux contrôler la composition de l'alliage avec une macroségrégation minimisée dans le lingot solidifié.

Ces objectifs peuvent certes être atteints en améliorant les procédés standards de traitement et de refusion des métaux liquides, mais également en développant de nouvelles techniques de traitement. Dans ce cadre, les procédés de fusion et d'affinage dans un four BE ont été développés particulièrement au début des années 90 et présentent un fort intérêt notamment dans le cas des alliages de titane en raison de leurs capacités à éliminer les défauts de type hard-alpha.

Dans la technique EBCHR (pour Electron Beam Cold Hearth Refining), les étapes de raffinage et de solidification sont séparées : un premier canon à électrons fait fondre la charge, qui peut prendre diverses formes (lingot, éponge, etc.). Le métal fondu s'écoule dans un creuset peu profond refroidi à l'eau (sole froide ou cold hearth), où un ou plusieurs canons à électrons maintiennent la température du métal liquide. À l'autre extrémité de la sole froide, le métal fondu s'écoule par une lèvre dans un moule en cuivre refroidi à l'eau pour former le lingot secondaire. L'une des fonctions majeures de la première étape est de séparer les inclusions plus lourdes de celles plus légères que l'alliage liquide, tout en augmentant le temps de séjour dans le bain de ces dernières, qui ont un point de fusion élevé, afin d'assurer leur dissolution complète. Ces opérations sont effectuées sous un vide poussé afin d'assurer le bon fonctionnement des canons à électrons et d'éviter la contamination de l'alliage.

Le procédé de fusion par faisceau d'électrons présente plusieurs avantages :

- Séparation des étapes d'affinage (dans la sole froide) et de solidification (lingot secondaire),
- Élimination efficace des éléments volatils tels que le chlore et l'hydrogène (du fait du vide poussé) et des inclusions,
- Bonne maîtrise du flux d'énergie du faisceau d'électrons en termes de puissance et de localisation,
- Flexibilité de l'alimentation en matériau (lingot, éponge ou ferrailles).

A contrario, le principal inconvénient du procédé consiste en des pertes importantes d'éléments d'alliage tels que l'aluminium (par volatilisation). Ceci peut conduire à une pollution des parois de la chambre et peut rendre difficile le contrôle de la composition chimique du lingot coulé. De plus, si les canons à électrons sont un atout du procédé, leurs paramètres de contrôle sont difficiles à optimiser (motif, fréquence de balayage et focalisation).

La modélisation mathématique s'est avérée un outil puissant, à la fois pour l'analyse des processus et pour l'optimisation des paramètres de fonctionnement. Une modélisation numérique du comportement hydrodynamique, thermique et solutal de l'alliage de titane, dans la sole froide et dans la lingotière, a été développée à l'Institut Jean Lamour afin de contrôler la volatilisation des éléments d'alliage et d'améliorer la capacité du procédé pour l'élimination des défauts de type hard-alpha.

Mon travail a été consacré à la première partie (sole froide) à travers une collaboration avec la société allemande ALD, fabricant de fours BE. Contrairement à la modélisation du lingot dans la deuxième partie, il n'y a pas de symétrie évidente dans le procédé, une modélisation en 3 dimensions est donc nécessaire. Nous nous sommes orientés vers le logiciel Ansys Fluent. Il a toutefois été nécessaire de

l'adapter à notre problématique, en développant un certain nombre d'UDF (User Defined Functions, fonctions développées en langage C et pouvant ensuite être compilées et liées au programme lors de son exécution).

Ces développements ont permis entre autres de représenter de façon réaliste le balayage en régime transitoire du faisceau d'électrons. Les simulations, menées aussi bien sur le four pilote du laboratoire que sur des fours de type industriel, ont montré que l'écoulement du métal est réduit à un mince film de liquide ne représentant en moyenne que 15% de la profondeur totale du métal dans la sole froide. La zone cible du faisceau est soumise à un flux local élevé, qui à son tour produit un fort gradient de température dans cette zone. L'évaporation en éléments d'alliage peut être évaluée, et donc la compensation nécessaire pour assurer la composition nominale après solidification peut être déterminée.

La figure 7 présente les deux parties du procédé ainsi que les motifs des canons à électrons dans un cas de référence. L'entrée de matière est perpendiculaire à la sole froide, le métal « tombant » au niveau de la zone rectangulaire rouge. 2 canons dessinent des motifs rectangulaires sur la sole, un 3^{ème} chauffe le creuset (motif circulaire) et dessine une ellipse (en bleu ciel) sur la sortie de la sole. L'écoulement se fait de la gauche vers la droite.

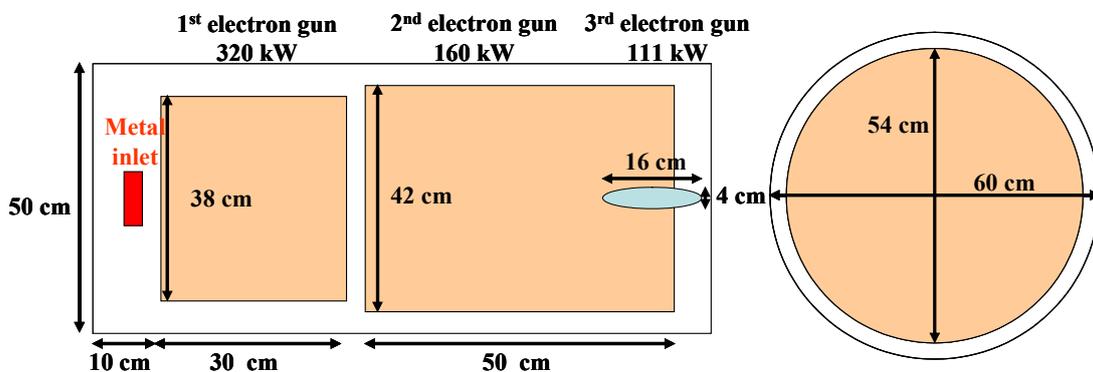


Figure 7 : Motifs dessinés par les canons à électrons, cas de référence.

Des événements de fusion, tels que l'interruption du fonctionnement d'un canon (éventuellement compensée par le mouvement d'un autre canon) peuvent être représentés, et leur effet sur l'homogénéité du lingot final peut être déterminée, démontrant l'efficacité des modèles numériques pour simuler des cas de production réels.

À titre d'exemple, la figure 8 présente un accident par rapport au cas de référence de la figure 7 : le deuxième canon est arrêté, et le canon qui balaie le creuset et la sortie de la sole (en bleu clair) est utilisé pour dessiner des motifs en forme d'ellipses afin de conserver un canal central liquide permettant l'écoulement du métal fondu. La puissance de ce canon est augmentée à cette fin.

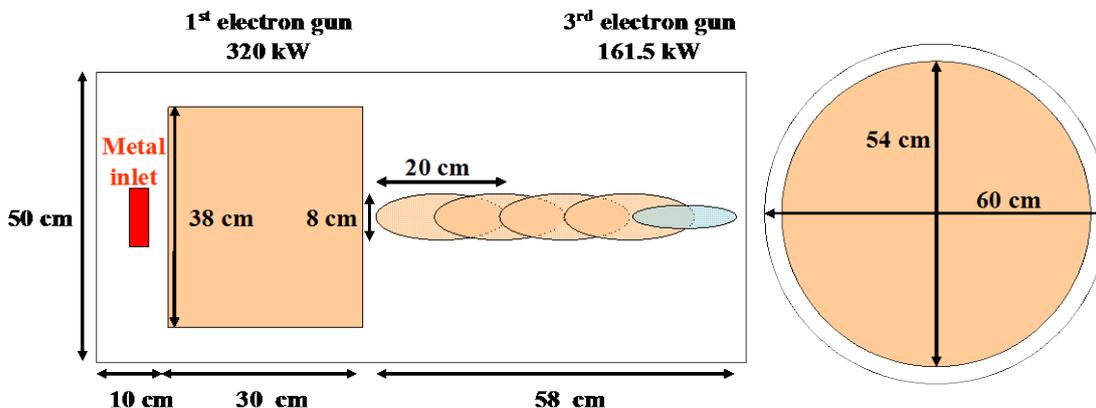


Figure 8 : Motifs dessinés par les canons à électrons, cas d'un incident.

On peut voir sur la figure 9 l'effet de cet incident 10 secondes après l'arrêt du canon.

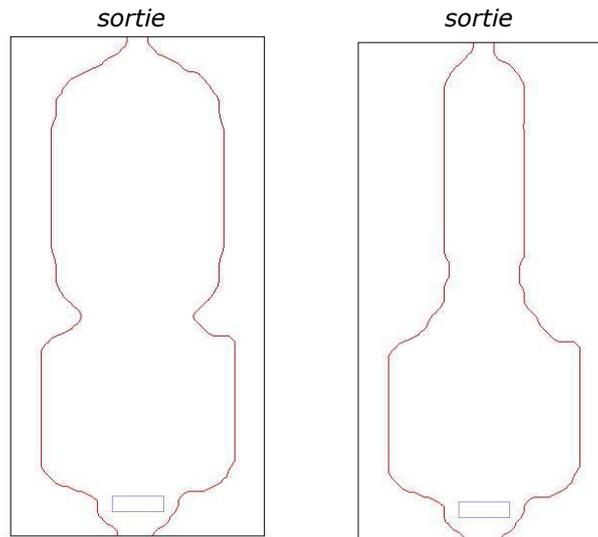


Figure 9 : Carte du puits liquide en surface de la sole froide dans le cas de référence (gauche) et après 10 secondes d'interruption du canon n°2 (droite).

Le rétrécissement rapide de la zone liquide est bien visible, et la composition de l'alliage en sortie du bain évolue rapidement. La figure 10 présente le profil médian en aluminium le long de la sole froide, en surface, dans le cas de référence et après 20 secondes d'interruption du canon n°2. On remarque la plus faible évaporation de l'aluminium dans la zone de sortie de la sole froide, ce qui a des conséquences importantes sur la composition du lingot coulé.

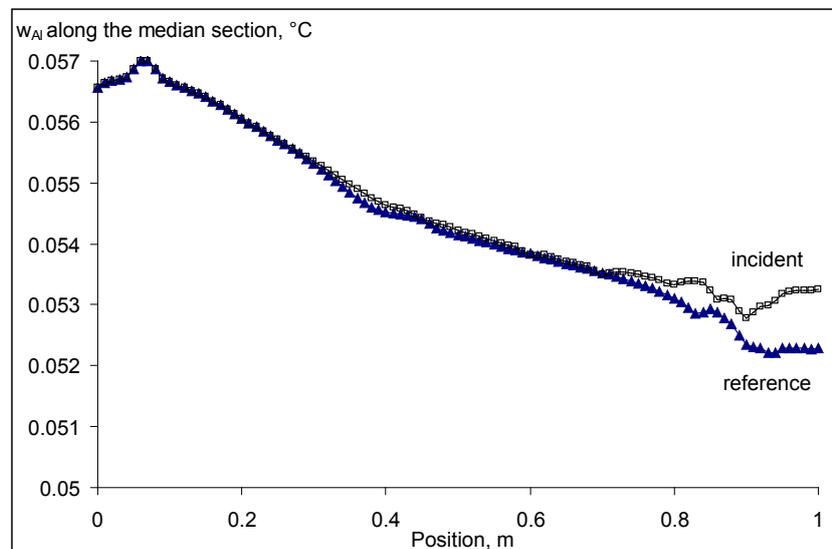


Figure 10 : Profil médian en aluminium le long de la sole froide, en surface.

Ci-après est inséré l'article suivant :

B. Dussoubs, J.P. Bellot, G. Reiter, J. Flinspach : Numerical Simulation of the EBCHR Operation for Working Towards Optimization and Process Control, *Proceedings of the Liquid Metal Processing and Casting Conference*, Santa Fe, Etats Unis, 19-21 September 2005, (eds.) P. D. Lee et al., (Pub) ASM International, 233-242 (2005). 10 pages.

*C.2 Modélisation des procédés de refusion
(P13, P19, P21-23, P37, P39, P56-57 ; P23 incluse ci-après)*

Les procédés de refusion à l'arc sous vide (VAR, pour Vacuum Arc Remelting) ou sous laitier électroconducteur (ESR, pour ElectroSlag Remelting) consistent à fondre un lingot primaire, appelé « électrode consommable » pour former un lingot secondaire de meilleure qualité. Ce dernier croît et se solidifie progressivement dans une lingotière refroidie par eau. Dans le cas du VAR, qui est opéré sous vide primaire et en courant continu, la source de chaleur correspond à un arc électrique qui éclate initialement entre le bas de l'électrode, qui joue le rôle de cathode, et le fond de la lingotière, qui correspond à l'anode. Les premières gouttes de métal liquide coulent au fond de la lingotière, et l'arc électrique se maintient par la suite entre le bas de l'électrode et le sommet du lingot, qui reste à l'état liquide. Le lingot croît au fur et à mesure de la fusion de l'électrode. Dans le procédé ESR, opéré en général en courant alternatif et à pression atmosphérique, la source de chaleur est un laitier fortement résistif (composé d'oxydes et de fluorures) qui couvre le lingot en cours de croissance (du fait de sa densité plus légère que celle du métal) et dans lequel l'électrode est plongée de quelques mm ou cm. L'effet Joule chauffe le laitier, et par contact avec ce dernier, le métal de l'électrode est fondu, les gouttes traversent le laitier où elles subissent un affinage chimique, et viennent s'accumuler dans le puits liquide du lingot en cours de croissance.

Dans les deux procédés, le lingot en cours de croissance est composé de 3 zones : la zone solide, qui se propage à partir des parois de la lingotière, la zone totalement liquide au sommet du lingot, maintenue dans cet état soit par l'arc électrique, soit par le contact avec le laitier, et une zone intermédiaire dite zone pâteuse, caractérisable par sa fraction volumique liquide.

À noter que dans le cas de l'ESR, une fine couche de laitier solidifié peut se retrouver emprisonnée entre la lingotière et le lingot métallique en croissance, formant ce qu'on nomme une peau de laitier, dont l'effet isolant est en général bénéfique sur les propriétés du produit.

Les lingots secondaires produits en VAR ou en ESR sont entre autres utilisés dans des applications critiques telles le nucléaire (alliages de zirconium), l'aéronautique ou la formule 1 (aciers ou superalliages, alliages de titane), etc. Il est possible d'obtenir, par une conduite fine de la vitesse de fusion et de la solidification des lingots, des produits de haute qualité. La modélisation de ces procédés, à l'échelle industrielle, est donc un outil très utile pour permettre aux industriels d'analyser et d'optimiser leurs procédés, de tester de nouvelles voies d'élaboration, de justifier auprès de leurs acheteurs de la qualité de leurs produits, de diminuer les coûts et les délais de mise au point de nouveaux produits, etc.

La mise au point de ces modèles nécessite de tenir compte des transferts couplés de chaleur et de quantité de mouvement, de la conservation des éléments d'alliage, des effets électromagnétiques, dans des alliages potentiellement complexes où la solidification joue un rôle majeur sur la structure obtenue.

La modélisation des procédés VAR et ESR remonte aux années 80 au LSG2M, notamment via les travaux d'A. Jardy. Le procédé VAR a ensuite fait l'objet de plus d'études, conduisant au modèle SOLAR (Solidification d'un Lingot refondu à l'ARc), qui est aujourd'hui considéré comme le plus avancé au monde dans son domaine. Ces travaux ont servi de base au développement d'un modèle analogue pour la simulation de l'ESR, SOLECS (Solidification d'un Lingot ESR et Solidification). Après avoir contribué au développement du modèle lors d'une première thèse, j'ai assuré le co-encadrement des deux dernières thèses sur le sujet. Celles-ci ont permis, après la mise au point du modèle général, d'étudier plus particulièrement deux phénomènes peu ou pas pris en compte dans les autres modèles : 1) le passage du courant dans la lingotière en cuivre. Le laitier solide est réputé isolant électriquement. Nous avons montré que ceci n'est pas toujours vrai, et qu'une quantité non négligeable de courant est susceptible de fuir dans la lingotière en fonction de la conductivité électrique et de l'épaisseur de la zone solide ; 2) l'effet des gouttes de métal. En effet, on considère habituellement que le métal au sommet du lingot est en équilibre avec le laitier au-dessus, l'interface entre les deux milieux restant plane et indéformable. Mais nos travaux prouvent que les gouttes de métal tombant de l'électrode ont tendance d'une part à se concentrer dans un rayon inférieur à celui de l'électrode, et d'autre part à avoir un impact sur une certaine profondeur de métal liquide du lingot du fait de leur inertie et de leur vitesse d'entrée dans le puits liquide de ce dernier.

À noter que depuis maintenant près de 20 ans, le développement des codes SOLAR et SOLECS plus récemment, est assuré principalement, dans le cadre de travaux de thèse, au sein d'un Club d'utilisateurs dont sont membres les sociétés Aubert et Duval (aciers et superalliages), Framatome (alliages de zirconium), Aperam (alliages base nickel) et TIMET (alliages de titane), ainsi que l'IJL. En

termes de conception et spécifications, je collabore avec 4 doctorants en moyenne, les oriente et les forme sur les méthodes numériques adaptées et le débogage des codes. J'assure également la « mémoire » des logiciels et je pilote le développement des codes (développement des interfaces graphiques, mise à jour des nouvelles versions des codes, etc.), en vue de produire un outil livrable annuellement aux partenaires industriels. Pour leur permettre d'être efficaces à l'utilisation de ces logiciels, je dispense avec A. Jardy la formation ad hoc auprès des ingénieurs utilisateurs. Nous maintenons également une « hotline » et apportons une aide à l'utilisation des logiciels et à l'interprétation de leurs résultats.

Cette fois encore, les réacteurs que nous simulons sont à l'échelle industrielle et ce sont des outils de production. La mise en place du Club et les relations de confiance établies avec nos partenaires permettent une instrumentation aussi poussée que possible de leurs fours lors de campagnes expérimentales que nous menons sur site, et également la refusion par ces partenaires de lingots d'essais, dans des conditions non standard, qui sont précieux pour valider nos modèles et pour nos activités de recherche.

Pour illustrer cette étude, je présenterai quelques résultats récents sur l'ESR obtenus dans le cadre des thèses de Mathilde Hugo et Jérémy Chaulet.

Dans ce procédé, un lingot primaire, également appelé électrode, est immergé dans un laitier liquide, composé de fluorure de calcium et de divers oxydes tels que la chaux, l'alumine ou la magnésie. Le courant électrique (généralement alternatif) qui alimente le système est dissipé par chauffage Joule lors de son écoulement à travers le laitier, du fait de la forte résistivité électrique de ce dernier. La chaleur est transférée par contact à l'électrode, qui fond ensuite progressivement, formant un film à sa base. Des gouttes de métal liquide vont se former, se détacher du film, et tomber à travers le laitier (dont la masse volumique est inférieure à celle du métal). Un lingot secondaire croît ainsi dans un moule en cuivre refroidi par un circuit d'eau. Il est constitué d'une partie solide, d'une zone pâteuse et d'une partie liquide dans laquelle les gouttes de métal liquide chutent. Un schéma du procédé est présenté sur la figure 11.

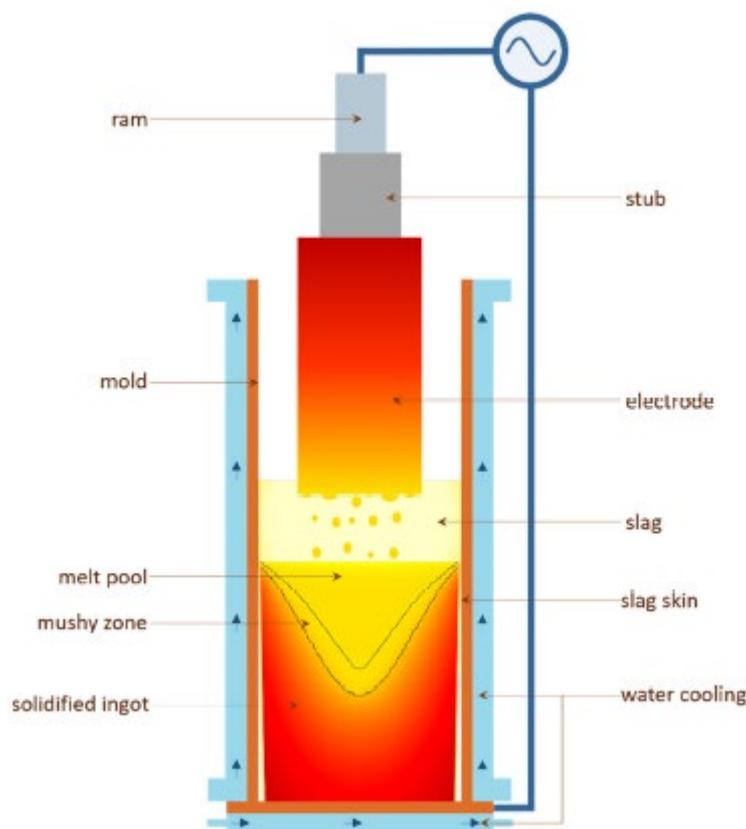


Figure 11 : Schéma du procédé ESR.

La thèse de Mathilde Hugo (2011-2014), reprenant le premier modèle développé par Valentine Weber (2005-2008) a porté sur l'intégration dans SOLECS d'un module électromagnétique prenant en compte

la possibilité de passage de courant entre le laitier et la lingotière au cours de la refusion ESR. En effet, des constatations expérimentales et des résultats de simulations numériques ont récemment remis en cause l'hypothèse classique d'isolation électrique parfaite du moule, à la base du calcul électromagnétique dans le modèle initial.

La première étape de l'étude a consisté à dériver une formulation de l'équation électromagnétique compatible avec la formulation aux volumes finis. La version initiale de cette équation, basée sur la variable champ magnétique H , n'était pas adaptée pour simuler le passage de courant vers la lingotière ; c'est en considérant une nouvelle formulation basée sur la fonction courant rH qu'il a été possible de représenter correctement le comportement électromagnétique au sein de milieux de conductivités électriques très différentes (laitier ou métal liquide/laitier solide/lingotière).

Nous avons implémenté cette nouvelle écriture d'abord au sein d'un modèle présentant une géométrie comparable à celle des refusions ESR, mais fortement simplifiée. Ceci a permis à la fois de valider cette formulation et d'étudier l'influence de la conductivité électrique et de l'épaisseur du laitier solidifié sur la répartition du courant et le comportement électromagnétique. Il a été ainsi montré, en régime permanent, que la valeur de la conductivité électrique du laitier solidifié a un impact considérable sur la proportion de courant dans la lingotière, d'où la nécessité de connaître la valeur précise de ce paramètre. L'effet d'une variation d'épaisseur du laitier solidifié est plus secondaire mais peut devenir important lorsque cette épaisseur diminue.

Toutefois, il n'existe pas, à ce jour et à notre connaissance, de valeurs expérimentales précises de conductivité électrique d'un laitier solidifié à haute température. Les valeurs que nous avons pu utiliser (typiquement entre 0,1 et 50, voire 100 $S.m^{-1}$) ont été rapportées dans la littérature. Avec celles-ci, la proportion de courant dans la lingotière n'est pas négligeable, même pour une faible conductivité électrique du laitier solidifié, rendant nécessaire sa prise en compte pour l'obtention de simulations « réalistes ». En effet, la réduction de la puissance générée par effet Joule au sein du laitier liquide qui en découle favorise la solidification du laitier au contact du moule refroidi. L'épaisseur de la peau de laitier en paroi du lingot est ainsi accrue, et la résistance thermique entre le lingot et la lingotière également. Les temps locaux de solidification du lingot secondaire risquent alors d'augmenter dans des proportions importantes.

Par ailleurs, ce travail a mis en évidence que les paramètres opératoires, ainsi que certaines propriétés thermophysiques du laitier, influent sur la distribution de courant dans le système. Ainsi, l'accroissement de la profondeur d'immersion de l'électrode au sein du laitier liquide réduit la proportion de courant au sein de la lingotière mais également la puissance dissipée par effet Joule au sein du laitier. Cependant, le modèle ne tenait pas compte de l'impact de ces changements sur la vitesse de fusion de l'électrode et ne prévoyait en conséquence pas d'influence majeure de ce paramètre sur la qualité finale du lingot.

Le taux de remplissage (rapport de la surface de l'électrode sur la surface interne de la lingotière) influence également la répartition du courant : plus il augmente et plus la proportion de courant qui pénètre dans la lingotière est élevée. L'accroissement de la section de l'électrode combinée avec l'intensification de ce phénomène de « fuite » est à l'origine d'une augmentation locale de la densité de courant au niveau de l'interface avec la paroi refroidie de la lingotière ; la solidification du laitier est freinée et les temps locaux de solidification du lingot sont réduits en conséquence.

La composition du laitier fluoré (nombre de moles équivalent d'alumine) joue également un rôle majeur sur l'efficacité du processus de fusion. Ce paramètre détermine la conductivité électrique du laitier - donc l'effet Joule généré - et va ainsi influencer sur l'épaisseur de peau de laitier et la vitesse de solidification du lingot.

Dans ce qui suit, je présente quelques résultats obtenus avec le modèle totalement couplé, où l'épaisseur de la peau de laitier solidifiée est calculée explicitement. Les résultats obtenus avec et sans prise en compte du passage du courant dans le moule sont comparés avec ceux d'une refusion d'acier réalisée par Aubert & Duval aux Ancizes. Celle-ci se décomposait en trois parties : 150 minutes de refusion à un courant de 18 kA et une vitesse de fusion de 10 $kg.min^{-1}$, 150 minutes à un courant de 16 kA et une vitesse de fusion de 6 $kg.min^{-1}$, puis une augmentation brutale de la profondeur d'immersion de l'électrode, et enfin un palier de 100 minutes à un courant de 19 kA et une vitesse de fusion de 8,5 $kg.min^{-1}$.

La figure 12 présente une comparaison de l'effet Joule généré dans le laitier, sans (à gauche) et avec (à droite) passage du courant dans le moule, pour deux moments différents de la refusion (50% du temps total de refusion en haut et 90% en bas). Lorsque le courant circule à travers le laitier solidifié, le chauffage par effet Joule dans le laitier liquide est moins homogène, du fait de sa diminution le long de l'interface laitier / moule. En raison de la fuite progressive du courant le long de cette paroi, la zone affectée par ce phénomène augmente avec la profondeur. Par conséquent, la puissance totale générée au sein du laitier par effet Joule est plus faible lorsque le moule n'est pas isolé, ce qu'on observe sur la figure 13, où une comparaison avec la puissance mesurée expérimentalement est également présentée. Si le creuset est supposé entièrement isolé, le modèle surestime la puissance générée lors de la refusion. Sinon, le chauffage résistif semble sous-estimé pendant la première partie de la refusion et légèrement surestimé pendant la deuxième. Ceci tendrait à montrer que la valeur utilisée pour la conductivité électrique du laitier solidifié n'est pas connue avec suffisamment de précision (ni forcément constante au cours de l'opération, sachant qu'ici nous la considérons égale à 1 S.m^{-1}) : la fraction du courant « perdu » vers le moule est trop élevée pendant la première partie de la refusion et trop faible pendant la deuxième. Au cours de la troisième partie de la refusion, le système de régulation a été déconnecté. La profondeur d'immersion n'est plus connue, ce qui explique les variations de la puissance générée et l'imprécision des résultats de la simulation.

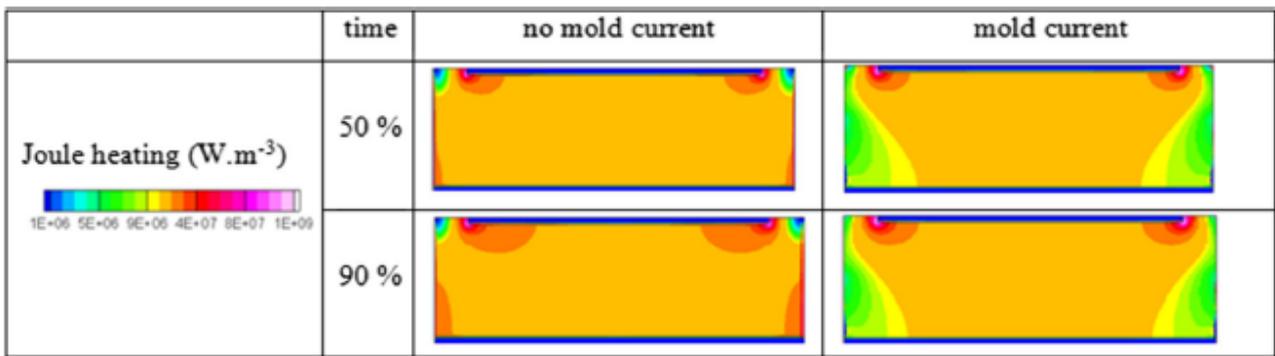


Figure 12 : Puissance volumique générée dans le laitier par effet Joule (W.m^{-3}) sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière.

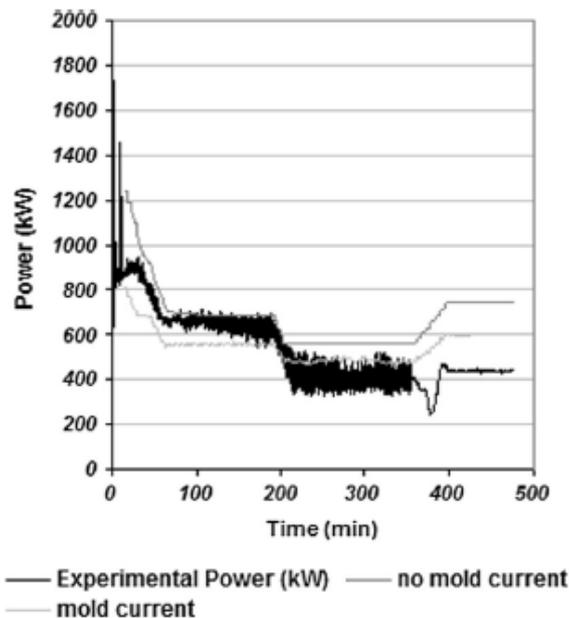


Figure 13 : Comparaison de la puissance générée sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière (simulations) et de la puissance mesurée expérimentalement.

La figure 14 présente les cartes de température calculées dans le laitier et le puits liquide du lingot sans (à gauche) et avec (à droite) passage du courant dans le moule, pour deux moments différents de la refusion (50% du temps total de refusion en haut et 90% en bas).

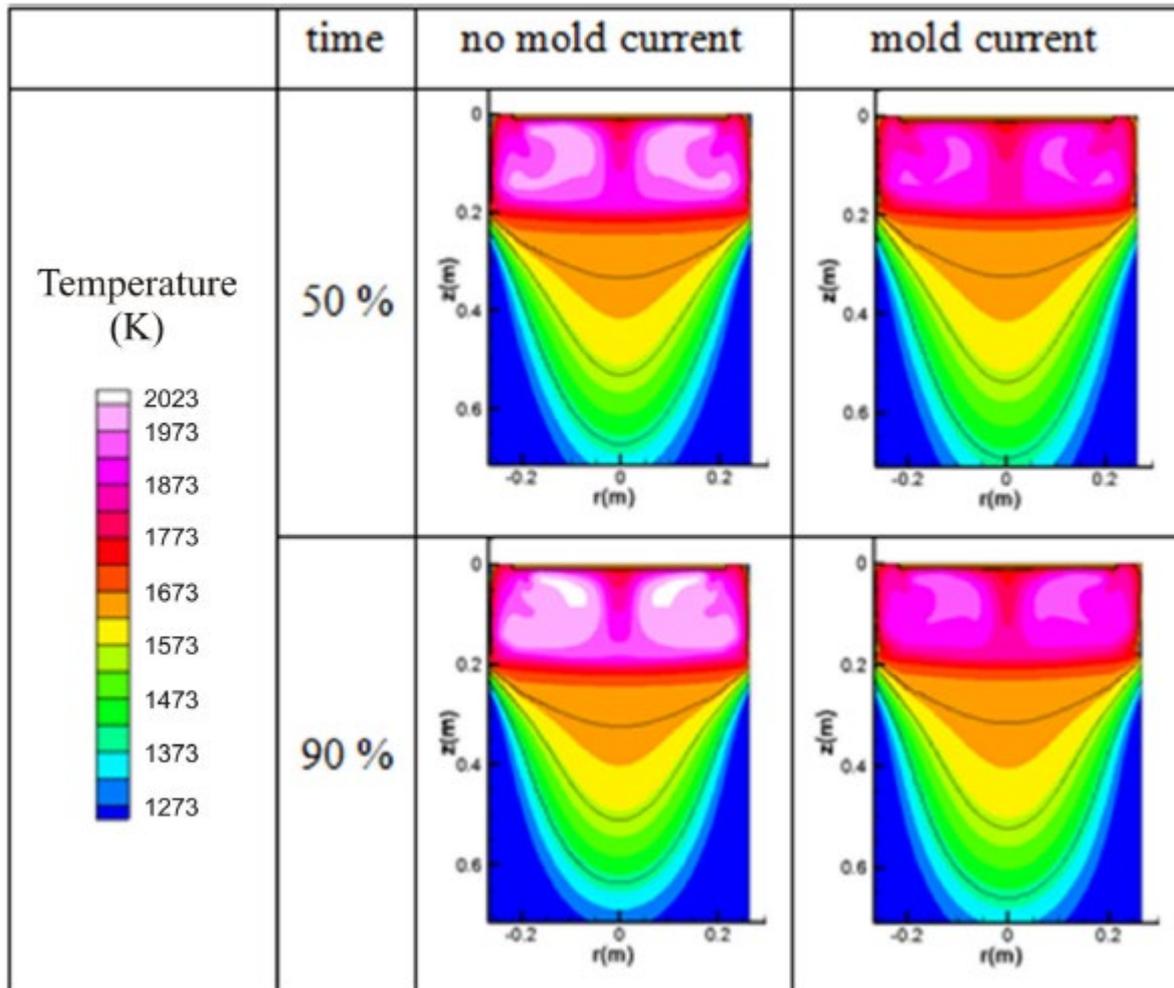


Figure 14 : Cartes de température dans le laitier et le puits liquide du lingot sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière. 50% (haut) et 90% (bas) du temps total de refusion, les iso-valeurs 0,01 0,5 et 0,99 de la fraction liquide sont également représentées.

Quand le courant peut traverser le moule, on observe une température du laitier plus basse en moyenne, du fait de la diminution de la puissance générée par le chauffage par effet Joule. Il en résulte une épaisseur de la couche de laitier solidifié qui augmente à l'interface laitier / lingot / moule. L'isolation électrique seulement partielle par le laitier solidifié a une influence majeure sur l'épaisseur calculée de la peau de laitier entourant le lingot: au fur et à mesure que le lingot monte, la quantité de laitier solide piégé et écrasé contre le moule est plus importante, conduisant à une peau de laitier plus épaisse et donc à un creusement du puits liquide, comme on peut le voir sur la figure 14, ce phénomène étant principalement une conséquence de la quantité de chaleur perdue à la paroi latérale. La résistance thermique due à la peau de laitier solide est proportionnelle à son épaisseur : le temps local de solidification calculé augmente donc lorsque le moule n'est pas supposé être complètement isolé, comme le montre la figure 15. Étant donné qu'il est généralement admis que l'occurrence de défauts de macroségrégation augmente avec ce temps de solidification, la qualité du lingot final prédite n'est donc pas aussi bonne avec ce modèle que dans la version antérieure supposant le moule électriquement isolé.

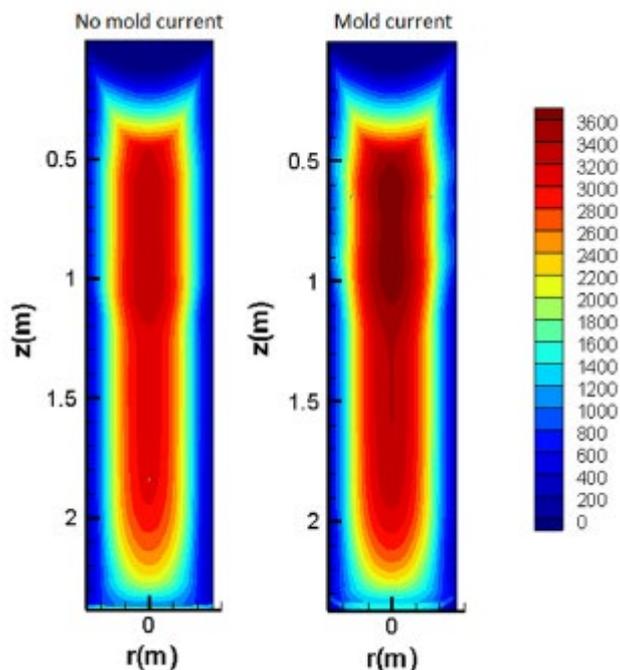


Figure 15 : Temps local de solidification dans le lingot secondaire ESR, sans et avec prise en compte du passage du courant dans la lingotière.

Malheureusement, même si ce modèle a montré son intérêt et sa capacité à représenter certains phénomènes qu'un modèle n'intégrant pas le passage du courant dans le moule ne peut pas simuler correctement, son utilisation dans la version transitoire entièrement couplée avec calcul explicite de l'épaisseur de la couche de laitier solidifié est toujours très réduite aujourd'hui. La faute à la nécessité d'utiliser des maillages très fins de la peau de laitier solidifié et de définir un niveau de convergence très faible pour l'équation électromagnétique. Ces deux paramètres ont pour effet de fortement grever le temps de calcul : une simulation en conditions industrielles, qui peut s'effectuer en quelques heures sur un PC de bureau sans prendre en compte le passage du courant dans le moule, voit son temps total passer à plusieurs semaines lorsque le passage du courant est pris en compte !

Il reste donc un travail important à mener sur l'accélération des simulations dans ces conditions, mais aussi sur la détermination expérimentale précise des valeurs de conductivité électrique à haute température des laitiers liquides et solidifiés, paramètre indispensable à l'obtention de simulations réalistes. Ceci pourrait permettre de remédier (au moins partiellement) à la surestimation de l'épaisseur de laitier solide. L'obtention d'épaisseurs calculées comparables à celles mesurées expérimentalement après démoulage du lingot est en effet indispensable pour déterminer de manière fiable la vitesse de solidification et utiliser le modèle de manière prédictive pour aider à l'amélioration de la qualité des produits.

Par ailleurs, un biais est introduit dans ce modèle par l'utilisation d'un profil de vitesse de fusion, fourni en donnée d'entrée et déduit du profil de fusion réel. Il ne tient donc pas compte de l'impact d'un paramètre testé sur l'énergie transmise à l'électrode par le laitier. L'utilisation d'une vitesse de fusion « recalculée » basée sur un bilan thermique au sein de l'électrode permettrait d'éliminer cette source d'incertitude dans les interprétations.

En adaptant le maillage, il serait alors possible de déterminer et de modéliser la forme de l'électrode immergée ainsi que les variations de sa profondeur d'immersion au sein du laitier, fournissant au modèle les données nécessaires pour « s'autoréguler ».

Lors de la thèse de Jérémy Chaulet (2018-2021), nous nous sommes attachés à la description du transfert de métal liquide au sommet du lingot refondu, en prenant en compte le comportement des gouttes de métal liquide lors de leur chute à travers le laitier, et à l'étude de leurs interactions avec ce dernier, sur le plan de la thermique, de la quantité de mouvement et de l'électromagnétisme. Représenter précisément le comportement des gouttes nécessite un modèle tridimensionnel, difficilement compatible avec un modèle de procédé. C'est pourquoi nous avons choisi, à partir de résultats obtenus en 3D par Abdellah Kharicha à l'Université de Leoben en Autriche, de développer un

modèle bidimensionnel axisymétrique et multiphasique du domaine laitier, en utilisant une approche eulérienne à deux fluides.

Il nous a fallu proposer une évolution originale du coefficient de traînée des gouttes, dont le diamètre peut varier typiquement entre 1 et 10 mm. Compte tenu de leurs propriétés thermophysiques, elles peuvent voir leur forme sphérique changer au cours de leur chute. Le type d'évolution que nous avons retenu est présenté sur la figure 16.

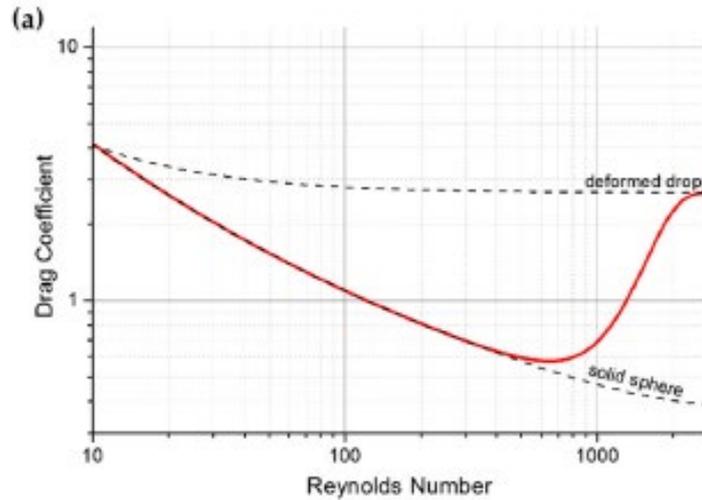


Figure 16 : Évolution du coefficient de traînée des gouttes en fonction du nombre de Reynolds

Le modèle a été développé sous le code commercial Ansys Fluent par ajout de fonctions utilisateur (UDF).

Nous avons pu montrer dans cette étude que les petites gouttes ont un effet important sur l'écoulement du laitier, non pas par un changement de champ électromagnétique, mais en raison de forts échanges de quantité de mouvement avec le laitier (figure 17). Elles se retrouvent donc rapidement à l'équilibre thermique avec ce dernier.

Au contraire, les gouttes de plus grand diamètre ont principalement un effet sur la thermique dans le laitier. Par ailleurs, elles ne sont pas en équilibre thermique avec ce dernier (figure 18).

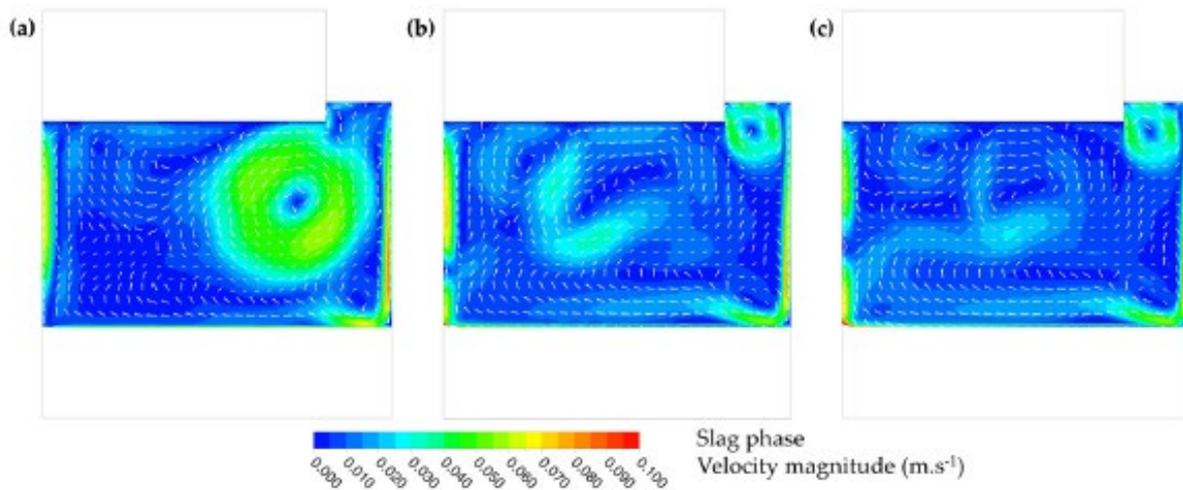


Figure 17 : Norme de vitesse du laitier et vecteurs vitesse dans le laitier (normalisés et moyennés sur le temps) pour des gouttes d'un diamètre de a) 1 mm, b) 5 mm, c) 10 mm

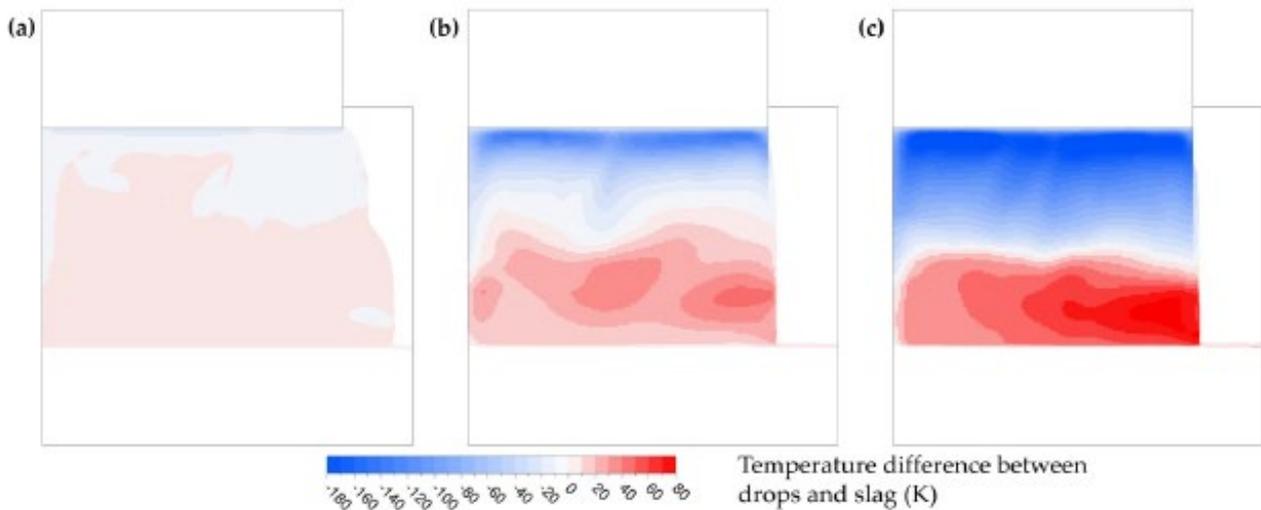


Figure 18 : Différence de température entre les gouttes et le laitier (moyennée sur le temps) pour des gouttes d'un diamètre de a) 1 mm, b) 5 mm, c) 10 mm

Le comportement du film liquide à la surface de l'électrode en fusion doit également être décrit afin de déterminer la zone de formation des gouttes. La concentration spatiale de ces dernières lors de leur chute dans le laitier est en effet un paramètre de premier ordre.

L'influence de la modification de certains paramètres opératoires a pu être étudiée. Par exemple, une augmentation de l'intensité du courant électrique diminue la zone de génération des gouttes ; une augmentation de la vitesse de fusion crée un effet de saturation du film liquide, ce qui étend la surface sous laquelle les gouttes sont formées. Enfin, lorsque la profondeur d'immersion de l'électrode est augmentée, la zone de génération des gouttes est étendue, ce qui est en accord avec les résultats de simulations 3D.

Une version simplifiée de ce modèle a ensuite été intégrée dans le code SOLECS, afin de prendre en compte l'impact des gouttes sur le laitier mais également sur le puits liquide. Il permet de retrouver qualitativement les résultats issus des simulations Euler-Euler, et d'améliorer la description du transport de métal liquide au sommet du lingot. À titre d'exemple, la Figure 19 présente une comparaison entre la vitesse du laitier obtenue en utilisant la version « classique » de SOLECS (a) et en appliquant le modèle d'interactions gouttes-laitier (b).

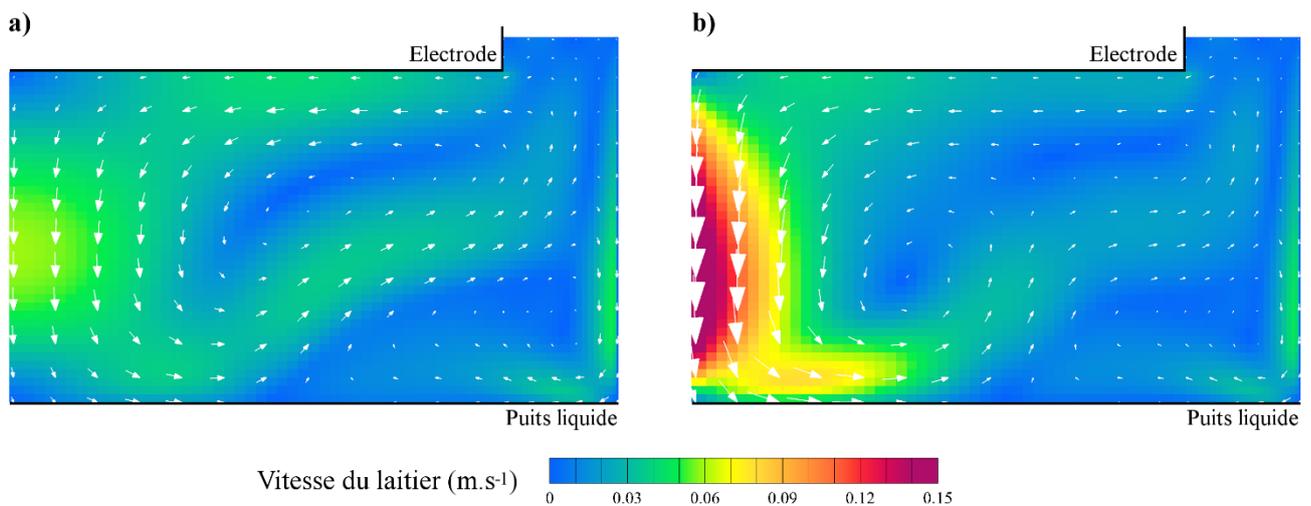


Figure 19 : Comparaison de l'écoulement du laitier calculé par SOLECS pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en appliquant le modèle d'interactions gouttes-laitier

On remarque toutefois que la différence n'est pas aussi notable que ce qui est observé dans le modèle 2D diphasique « externe ». Une raison à cela pourrait être la forte intensité turbulente prédite par le modèle $k-\varepsilon$ implémenté dans SOLECS, qui amoindrit l'effet des gouttes.

On note le même effet sur la température dans le laitier, Figure 20 : la boucle de recirculation créée par la traînée des gouttes et observable sur la Figure 19 permet une extension de la zone chaude sous l'électrode jusqu'au puits liquide. Deux différences sont toutefois notables par rapport aux résultats du modèle 2D diphasique « externe » présentés sur la Figure 18 : la température du laitier est un peu plus homogène – donc les zones les plus chaudes le sont moins dans l'absolu – et surtout, le laitier est plus froid à proximité de l'interface avec le puits liquide. La forte turbulence prédite par SOLECS en est encore une fois sans doute à l'origine.

La surchauffe moyenne des gouttes quittant le laitier est d'environ 110 °C, plus faible que celle calculée avec le modèle Euler-Euler.

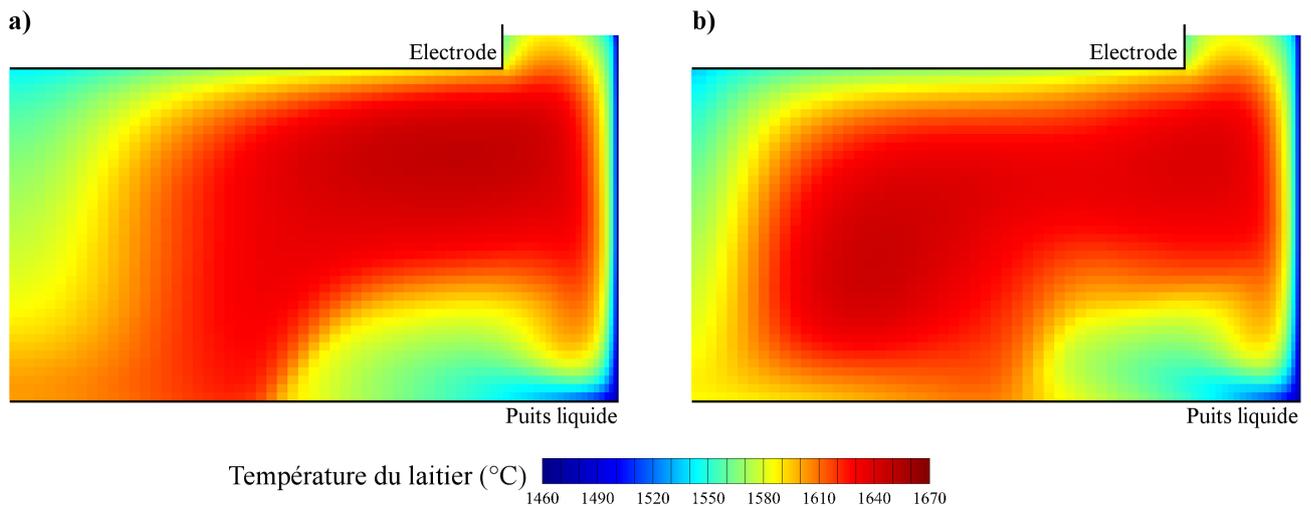


Figure 20 : Comparaison de la température du laitier calculée par SOLECS pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en appliquant le modèle d'interactions gouttes-laitier (cas d'une électrode d'acier refondue à 10 kgmin^{-1})

En parallèle, un modèle original a été proposé pour tenir compte de l'impact des gouttes sur le puits liquide, y compris en profondeur. En effet, nous supposons que les gouttes de métal liquide – puisqu'elles acquièrent une quantité de mouvement non négligeable pendant leur chute dans le laitier – peuvent réellement pénétrer dans le puits liquide avant de s'y disperser.

Dans le modèle SOLECS, l'apport de matière nécessaire à la croissance progressive du lingot est effectué à l'interface avec le laitier, celle-ci étant indéformable. Nous souhaitons conserver ces bases du modèle : la source de métal liquide produisant la croissance ne pouvait donc pas être déplacée ni rendue plus locale. Néanmoins, les termes sources de quantité de mouvement, d'enthalpie et de solutés liés à cet apport de matière au sommet du lingot ont dû être modifiés et complétés par de nouveaux termes sources dans certaines cellules du domaine de calcul afin de rendre compte de l'apport localisé du contenu des gouttes et de sa libération en profondeur. En d'autres termes, l'apport de la matière et du contenu des gouttes sont traités différemment.

La Figure 21 présente le modèle que nous avons mis en place : nous avons proposé un concept de « fraction volumique de gouttes » déterminée à partir du débit de métal liquide traversant l'interface laitier / puits liquide. Les gouttes peuvent interagir jusqu'à une certaine profondeur *profimp* (qui est une donnée puisqu'à notre connaissance, il n'existe pas de corrélation permettant de la déterminer dans notre cas). Pour représenter la déformation progressive des gouttes et leur ralentissement au fur et à mesure de leur descente dans le puits, plutôt que d'évaluer précisément la diminution de leur impact, nous avons choisi de diminuer la fraction volumique de gouttes, jusqu'à ce qu'elle devienne nulle à la profondeur *profimp*. Arbitrairement, cette diminution suit une loi en puissance 2. Ainsi, les gouttes gardent les mêmes propriétés jusqu'à une certaine profondeur, puis se mélangent instantanément au puits liquide.

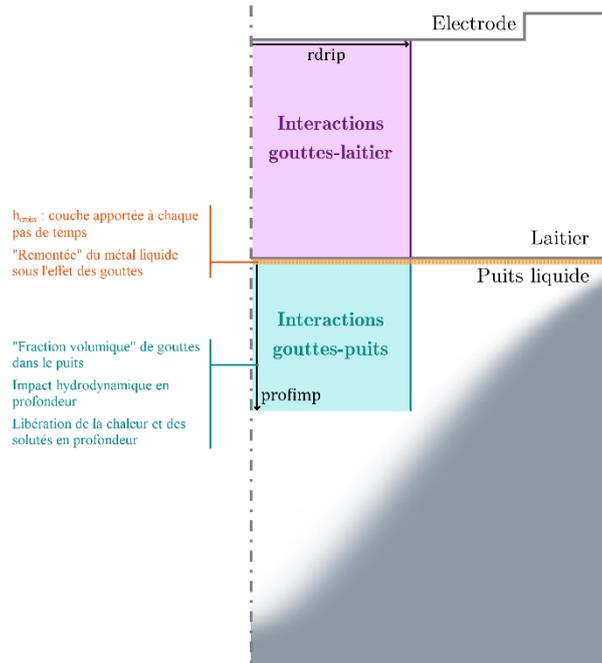


Figure 21 : Représentation synthétique du modèle d'interactions gouttes/puits liquide

La notion de fraction volumique permet de calculer une force de traînée rendant compte de l'influence de la pénétration des gouttes sur l'écoulement du puits liquide, ainsi qu'un apport enthalpique et solutal (libéré lorsque les gouttes se « dissolvent » à la profondeur *profimp*). Afin de déterminer quelle quantité de gouttes disparaît pour une cellule donnée à un rayon donné, on calcule la différence de fraction volumique de gouttes entre la cellule située sous l'interface au même rayon et la cellule considérée.

Nous illustrerons cela en comparant, Figure 22, les résultats obtenus sans et avec prise en compte du rôle des gouttes (pour la même fusion que celle représentée Figure 20).

La libération de l'enthalpie des gouttes en profondeur entraîne une augmentation notable de la température du puits liquide dans la zone impactée. La surchauffe moyenne des gouttes entrant dans le puits liquide atteint 110 °C lorsque le modèle d'interactions gouttes-laitier est utilisé, mais seulement 70 °C dans le cas sans prise en compte de l'influence des gouttes (calcul effectué en supposant l'équilibre thermique entre le métal au sommet du lingot et le laitier adjacent). Cette différence de surchauffe est à l'origine de l'augmentation de la profondeur du puits liquide lorsque le modèle d'interactions est utilisé.

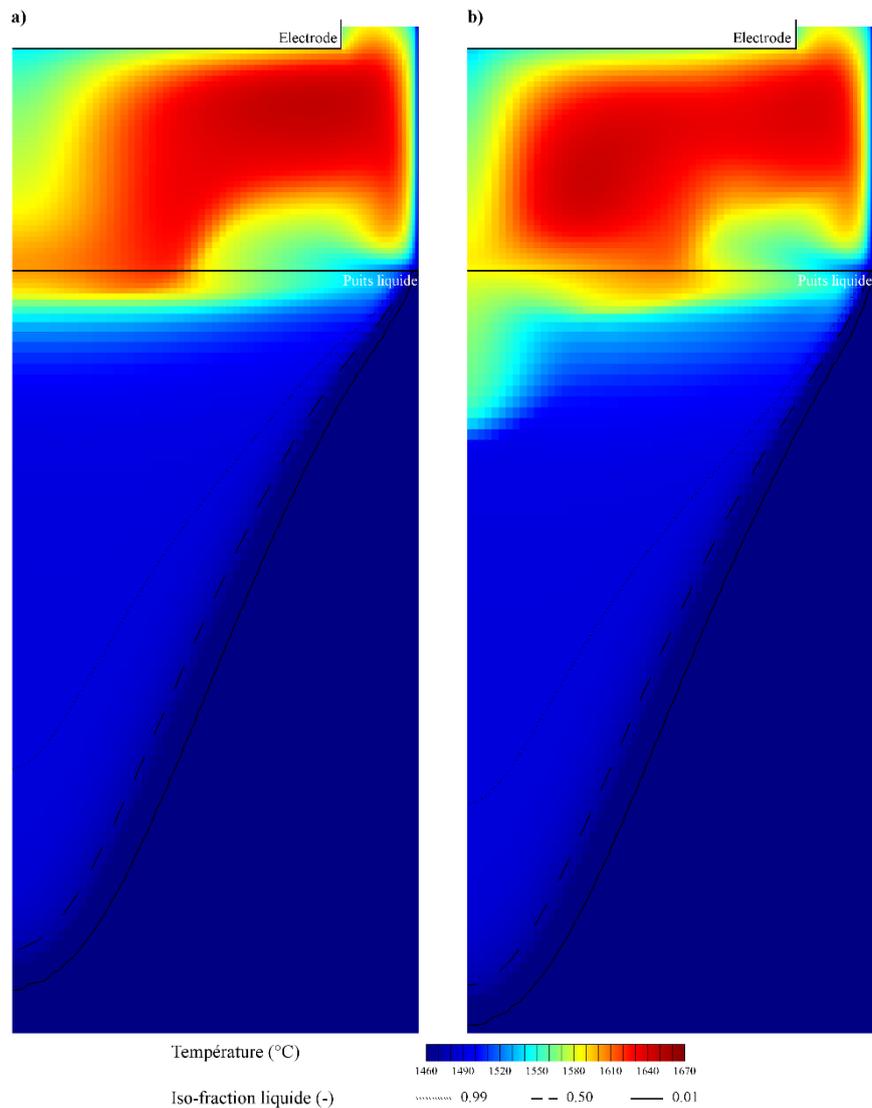


Figure 22 : Température dans le laitier et le puits liquide et profil du puits liquide pour a) le cas sans prise en compte des gouttes et b) en utilisant les modèles d'interactions gouttes-laitier et gouttes-puits

Un autre axe de l'étude concernait la formulation d'un modèle thermique simple, monodimensionnel, de l'électrode ESR. Ce dernier est obtenu en résolvant l'équation de Fourier modifiée par une méthode d'ablation de type Landau afin de s'affranchir de l'emploi d'un maillage évolutif au fur et à mesure que l'électrode est consommée. Ce modèle est désormais associé au code SOLECS et permet soit de déterminer une vitesse de fusion de l'électrode comme résultat (un profil de vitesse de fusion de cette dernière est une donnée d'entrée du logiciel SOLECS dans son utilisation standard), soit de s'affranchir de l'entrée d'un profil de vitesse de fusion et d'utiliser celle donnée par le modèle d'électrode (couplage).

Ci-après sont insérés les articles suivants :

M. Hugo, A. Jardy, B. Dussoubs, J. Escaffre, H. Poisson : Influence of the Mold Current on the Electroslag Remelting Process, *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*, 47 (4), 2607-2622 (2016). 16 pages.

J. Chaulet, A. Kharicha, S. Charmond, B. Dussoubs, S. Hans, M. Wu, A. Ludwig, A. Jardy : A 2D Multiphase Model of Drop Behavior during Electroslag Remelting, *Metals*, 10, 490 ; <https://doi.org/10.3390/met10040490>. 16 pages.

C.3 Modélisation de la solidification et établissement d'un benchmark numérique (P11, P14, P16, P35-36, P50-51, P53-55 ; P14 incluse ci-après)

Lors de la solidification des alliages, l'écoulement du fluide dans la zone pâteuse joue un rôle fondamental dans la formation de la macroségrégation dans le produit final, en redistribuant les solutés. Dans certains cas, on observe la formation de canaux ségrégés (correspondant à des mésoségrégations), qui ont un effet important sur la qualité des pièces moulées in fine car la composition et la structure cristalline du solide qui se forme dans les canaux peuvent fortement différer de celles des régions solides voisines. Ces canaux se présentent sous la forme de longues traînées étroites alignées selon une direction préférentielle, avec une concentration en soluté souvent supérieure à celle des régions environnantes. L'écoulement interdendritique dans la région pâteuse conduit à des perturbations de la structure colonnaire en croissance, provoquant ainsi une instabilité du front de croissance qui conduit à son tour à une instabilité supplémentaire de la carte de ségrégation et à la formation de canaux.

Classiquement, la macroségrégation est étudiée à l'aide de modèles multi-échelles basés sur des lois macroscopiques faisant appel soit à la théorie des mélanges soit à la moyenne volumique, couplés à des modèles de microségrégation. Dans ces modèles, la zone pâteuse est considérée comme un milieu poreux saturé, de perméabilité variable, et l'écoulement dans la zone pâteuse est régi par la loi de Darcy. Le modèle de Carman-Kozeny est généralement utilisé pour calculer la perméabilité. La discrétisation des équations de conservation du modèle macroscopique est basée le plus souvent sur des formulations aux volumes finis ou aux éléments finis. Dans ces conditions, un paramètre fondamental dans le calcul des mésoségrégations est la perméabilité dans la zone pâteuse. En effet, la dépendance de cette dernière avec la fraction liquide est très fortement non-linéaire, et une très faible variation de la fraction liquide peut entraîner une grande variation (plusieurs ordres de grandeur) de la perméabilité, et donc affecter de manière significative l'écoulement dans la zone pâteuse, et par là même la ségrégation. Dans la formulation aux volumes finis, la discrétisation de l'équation de quantité de mouvement nécessite une estimation de l'intégrale de volume du terme de Darcy sur les volumes de contrôle, en appliquant un schéma de discrétisation. Par ailleurs, la perméabilité est connue au centre des volumes de contrôle, mais le terme de Darcy dans lequel elle intervient doit être estimé aux faces de ces volumes du fait qu'on utilise une grille de pression-vitesse décalée. Le schéma de discrétisation du terme de perméabilité et son interpolation auront donc un effet majeur sur les prédictions de macroségrégation et sur les canaux ségrégés dans la zone pâteuse, ce qui a motivé une étude sur ce thème.

Sans étonnement, nos calculs ont montré que pour un maillage suffisamment raffiné, les schémas de discrétisation testés conduisent tous à des résultats similaires. Malheureusement, lorsqu'on simule des opérations sur des produits industriels, il est difficile, voire impossible de générer des maillages assez fins pour que les résultats soient indépendants du schéma choisi. Dans ce cas-là, la discrétisation de la perméabilité à l'aide d'un schéma de fraction liquide interpolée et d'un schéma d'intégration analytique est recommandée. Nous avons constaté qu'un maillage grossier peut assez bien capter le risque de former des mésoségrégations, mais que seul un maillage fin est capable de résoudre plus en détail les phénomènes complexes impliqués. Avec un maillage très fin, les canaux ont été capturés avec une définition de plus d'un point dans leur largeur, permettant une détermination précise de cette largeur.

Pour illustrer cela, la figure 23 présente l'évolution, dans un modèle 1D où une solution analytique « exacte » peut être calculée, de l'écart entre la vitesse obtenue selon différents schémas de discrétisation et la vitesse exacte (1,2414 mm/s ici), ceci en fonction du nombre de mailles. Le domaine possède une longueur de 10 cm. On constate que 40 mailles a minima (i.e. une taille de maille de 2,5 mm ou moins) sont nécessaires afin que le choix du schéma de discrétisation soit sans influence.

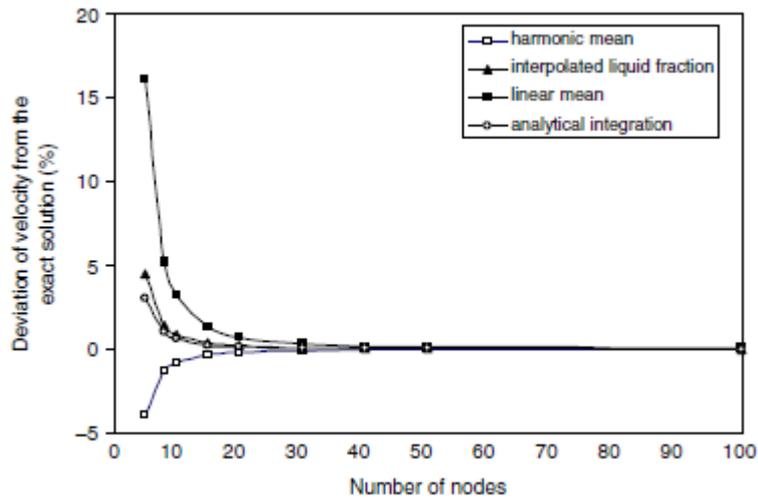


Figure 23 : Évolution en fonction du nombre de mailles (dans un maillage 1D) de l'écart entre la vitesse obtenue selon différents schémas de discrétisation et la vitesse exacte (solution analytique, $1,2414 \text{ mms}^{-1}$).

Dans un second temps, un modèle 2D a été élaboré. Dans celui-ci, un alliage étain-5% (massique) plomb est contenu dans une cavité rectangulaire adiabatique sur 3 côtés, le 4^{ème} (côté gauche) correspondant à l'extraction d'un flux de chaleur, ce qui provoque la solidification du fluide (cf. figure 24). Lors de celle-ci, l'élément d'alliage est rejeté en amont du front de solidification, et du fait de sa masse volumique supérieure à celle de l'étain, la convection d'origine solutale entraîne un mouvement dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, donc dans le même sens que celui provoqué par la convection d'origine thermique. Le mouvement antihoraire est donc renforcé, ce qui va contribuer à créer des canaux ségrégués.

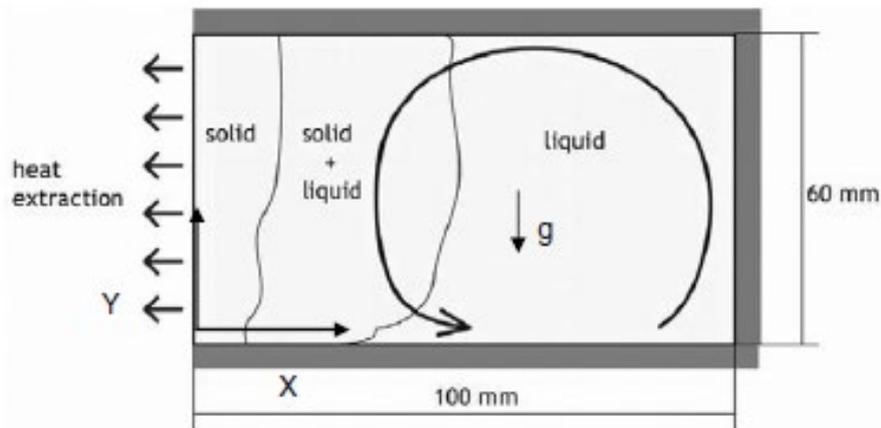


Figure 24 : Domaine de calcul pour la simulation 2D.

Différents schémas de discrétisation du terme de perméabilité ont été testés, en utilisant un maillage de 60×60 mailles, dont on pourrait espérer, au vu des résultats 1D, qu'il n'influence pas (trop) les résultats quel que soit le schéma de discrétisation choisi. Les résultats en termes de macroségrégation à $t = 400 \text{ s}$ sont présentés sur la figure 25.

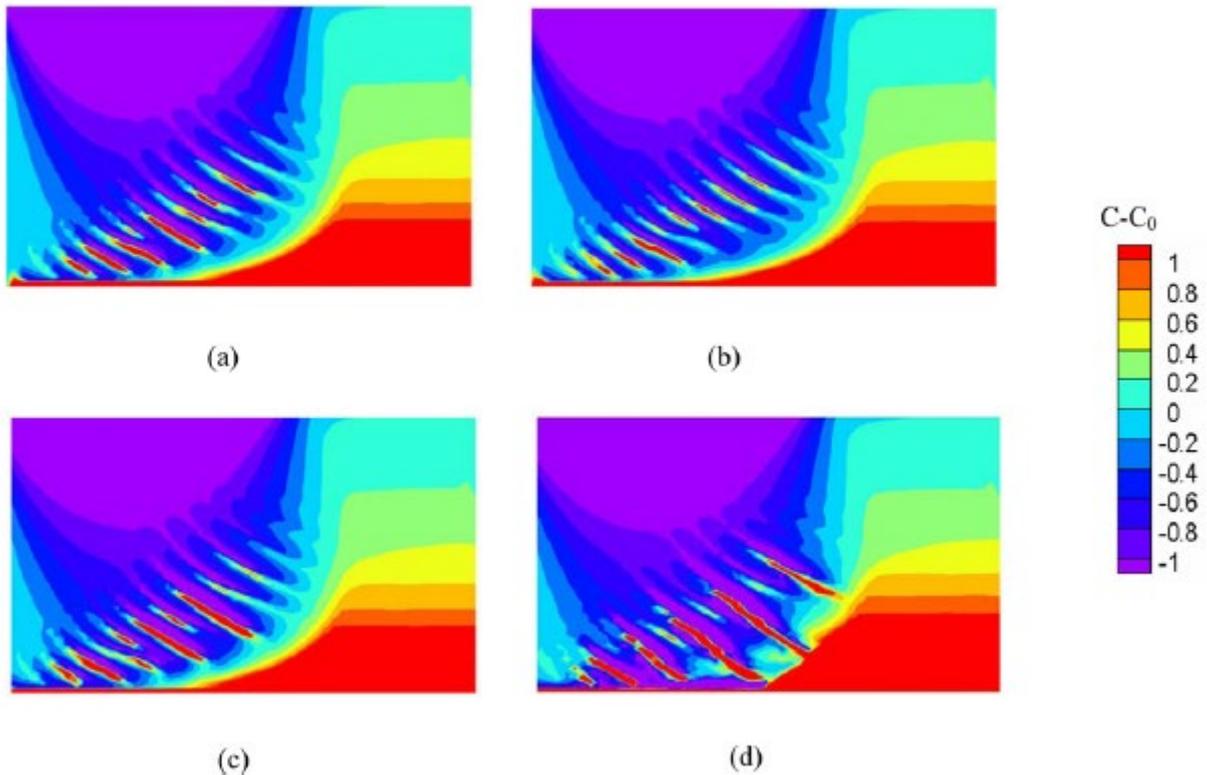


Figure 25 : Cartes de macroségrégation dans la cavité à $t = 400$ s (maillage 60×60).

a) discrétisation analytique de la perméabilité ; b) interpolation harmonique de la perméabilité ; c) évaluation de la perméabilité à partir de l'interpolation de la fraction liquide ; d) interpolation linéaire de la perméabilité

Si la tendance générale est la même quel que soit le schéma, des différences fortes peuvent être observées quant à la forme, à la concentration, et au nombre de canaux ségrévés. L'interpolation linéaire du terme de perméabilité (d) semble relativement s'éloigner des 3 autres schémas.

Si l'on se fixe un schéma d'interpolation, on peut étudier l'effet du maillage. C'est ce que montre la figure 26, où 3 maillages (de plus en plus fins de haut en bas) sont testés pour 2 schémas d'interpolation (discrétisation analytique à gauche, interpolation harmonique à droite). On constate bien que les différences entre schémas disparaissent pour des maillages suffisamment fins, comme constaté avec le modèle 1D. C'est seulement dans les maillages les plus fins que plusieurs mailles sont définies dans la largeur d'un canal, permettant ainsi de déterminer une taille précise pour ce dernier. Un maillage plus grossier (ce qui sera fatalement le cas si on veut simuler un lingot à l'échelle industrielle) permettra sans doute de repérer les risques de mésoségrégation, mais pas de capturer finement les phénomènes complexes mis en jeu.

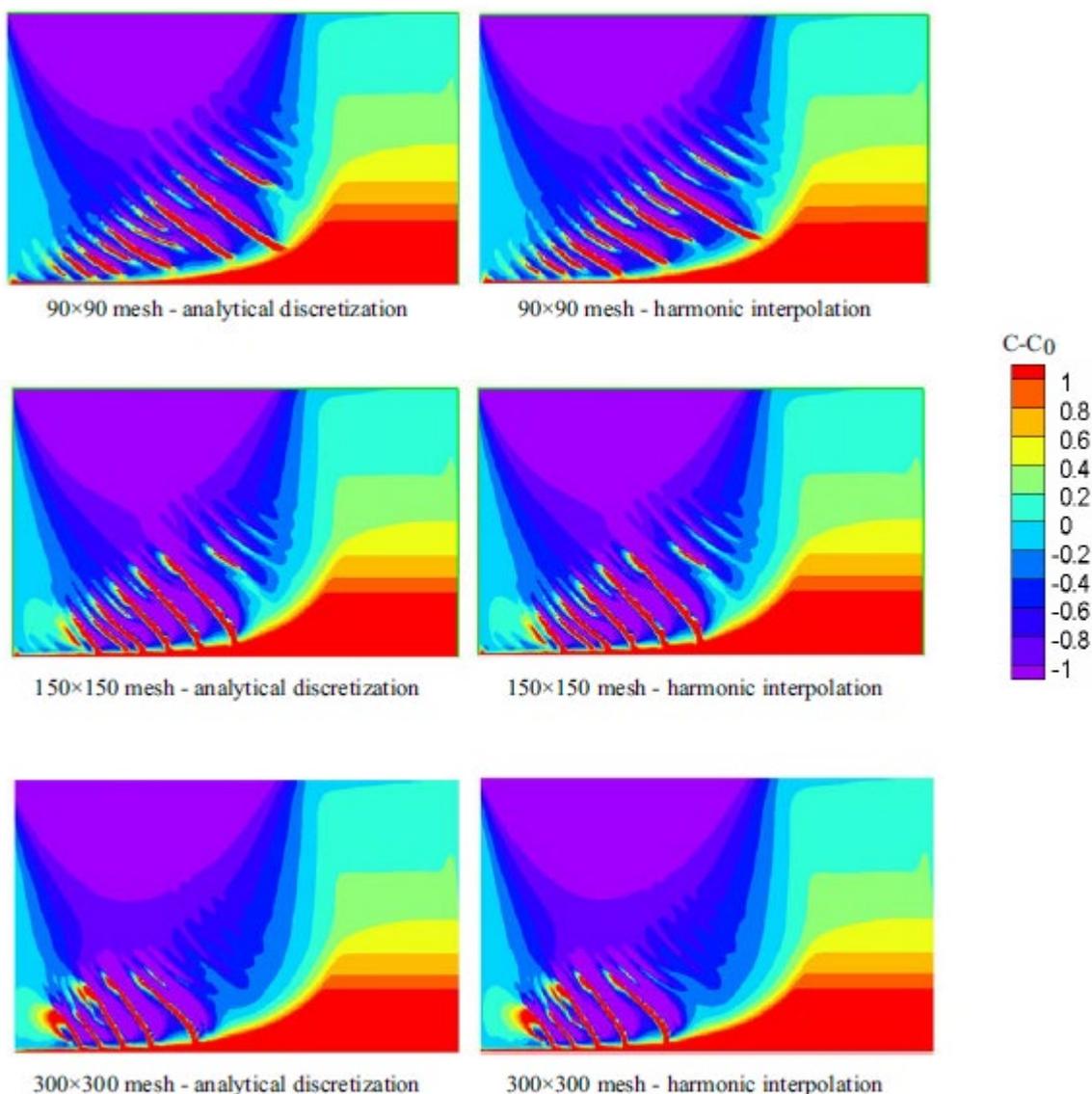


Figure 26 : Cartes de macroségrégation dans la cavité à $t = 400$ s pour 3 maillages différents et 2 schémas d'interpolation.

Cette sensibilité des mésoségrégations calculées aux effets numériques nous a poussés à proposer avec un certain nombre d'équipes de recherche françaises un benchmark au cours de l'ANR SMACS.

Après avoir comparé nos propres modèles entre eux, nous avons soumis un appel à contribution visant à proposer différents exercices de comparaison afin de vérifier et de valider des modèles mathématiques et des codes numériques relatifs à la solidification des lingots d'alliages métalliques binaires. Deux problèmes ont été envisagés dans un cas de convection naturelle laminaire : convection thermique transitoire pour un métal liquide pur avec un nombre de Prandtl de l'ordre de 100, et un processus de solidification avec surchauffe initiale du liquide ; convection double-diffusive dans une enceinte pour un mélange binaire de plomb et d'étain, avec un nombre de Prandtl de l'ordre de 100 et un nombre de Lewis de l'ordre de 10 000, afin de simuler des écoulements convectifs thermosolutaux dans la zone liquide lors de la solidification. En parallèle, des expériences de solidification des mêmes alliages ont été menées au SIMAP à Grenoble. Le site de dépôt du benchmark était géré à l'IJL. Il a été ainsi possible d'étalonner les modèles, de confirmer expérimentalement et numériquement l'existence des mésoségrégations (que certains modèles pouvaient ne pas capter).

Ces études plus fondamentales illustrent l'importance du choix des méthodes numériques, notamment dans le cas de phénomènes multi-échelles, où par définition l'ensemble des phénomènes microscopiques ne peuvent être résolus à l'échelle du produit industriel. Elles montrent comme toujours l'importance de corroborer les résultats numériques par des expériences qui se doivent d'être de plus en plus fines pour répondre à la précision de plus en plus grande des modèles.

Ci-après est inséré l'article suivant :

A. Kumar, B. Dussoubs, M. Založnik, H. Combeau : Effect of Discretization of Permeability Term and Mesh Size on Macro- and Meso-segregation Predictions, *Journal of Physics D : Applied Physics* 42 (10) (2009), article 105503, DOI: 10.1088/0022-3727/42/10/105503. 13 pages.

D. Conclusion – Synthèse de mes activités de recherche

Les études présentées dans les parties A, B et C précédentes, si elles recouvrent des domaines de recherche variés, s'inscrivent toutes dans un ensemble portant sur la simulation numérique des procédés à haute température. Elles partagent un certain nombre de caractéristiques communes :

- Elles concernent des procédés d'élaboration à haute température, du revêtement de surface au matériau massif,
- Elles sont en lien avec les matériaux, céramiques ou métalliques ; ces deux caractéristiques les placent à l'interface entre les sections 10 et 15 du CNRS, et 33 et 62 du CNU,
- Elles impliquent une large part de simulation numérique, utilisée comme un outil et non un objet de recherche, i.e. des résultats scientifiques sont obtenus au moyen de simulations à façon, et on n'applique pas un modèle à un domaine scientifique. Ceci explique le type de revues dans lesquelles je publie,
- Elles se nourrissent, autant que faire se peut, de résultats expérimentaux pour les corroborer,
- Elles correspondent toutes à une problématique industrielle forte, et visent à comprendre, améliorer et optimiser un procédé industriel, tout en générant des résultats valorisables tant scientifiquement qu'industriellement (d'où le sous-titre, mêlant deux idées apparemment contradictoires). Les intérêts de chaque partie ne me paraissent pas du tout opposés, mais bien au contraire complémentaires,
- Elles ne peuvent jamais être résolues par l'usage d'un outil « presse-bouton ». Au contraire, qu'il s'agisse de codes « maison » ou de codes clé en main (libres ou commerciaux), il est nécessaire de largement les adapter pour refléter autant que possible la complexité des procédés mis en jeu.

D'ailleurs nos partenaires industriels ne s'y trompent pas : nous établissons en général des relations de long terme avec eux, ce qui montre que nous sommes loin d'être de simples prestataires pour une étude destinée à répondre à une problématique précise. Le meilleur exemple de ce mode de fonctionnement est le Club SOLAR que j'ai déjà évoqué dans la partie C.

Mes activités de recherche et développement, depuis le DEA, m'ont permis de monter en compétences et de gagner en autonomie. À partir d'une formation initiale dans le domaine des procédés et des matériaux, j'ai acquis lors de mon stage de DEA la compétence numérique que j'ai toujours développée par la suite. La thèse m'a permis de porter un projet de recherche et de développer un code de calcul basé sur un logiciel commercial et généraliste. J'ai également commencé à co-encadrer des étudiants de DEA/DESS. J'ai pu aussi, via le monitorat et un poste d'ATER, me confronter à l'enseignement.

Dans le cadre de mon stage post-doctoral, j'ai montré une capacité d'adaptation en changeant de thématique de recherche, en acquérant des compétences aussi bien en génie des procédés qu'en simulation, puisque cette fois j'ai développé un code « maison » adapté à un réacteur industriel. Cette collaboration avec le secteur aval m'a également permis de me confronter aux besoins de l'entreprise dans le cadre d'une collaboration, et à la nécessité de faire coexister l'intérêt scientifique (progrès en termes de recherche, publications, etc.) et l'intérêt industriel (meilleure connaissance de l'outil industriel, gains de production, etc.).

En basculant sur un poste d'ingénieur de recherche en calcul scientifique « double compétence », je n'ai jamais abandonné les aspects recherche. Bien au contraire, les logiciels développés au laboratoire sont destinés à un usage précis et s'appuient sur une recherche en matériaux et procédés fine. Le Club SOLAR, où depuis 20 ans cohabitent et se nourrissent de leurs compétences respectives les industriels et les chercheurs / ingénieurs comme moi, en est le parfait exemple.

Aujourd'hui, je porte certaines thématiques en forte autonomie, par exemple dans le cadre de la simulation du procédé ESR (en co-encadrant les 3 dernières thèses sur le sujet).

Par ailleurs, les différents projets de recherche que j'ai menés ont fait ressortir plusieurs éléments clés :

- Mon intérêt pour développer des codes de calcul appliqués à des problématiques industrielles. Ceci permet de confronter le logiciel à des problèmes en « grandeur réelle », dans des réacteurs souvent mal instrumentés et avec des grandeurs difficilement mesurables. Pouvoir expliquer scientifiquement ce qui est depuis longtemps constaté par les opérateurs est pour moi une grande fierté. Cela démontre aussi tout l'intérêt de l'activité de recherche et développement dans le domaine des procédés industriels, qui, en métallurgie, sont loin d'avoir livré tous leurs secrets,
- L'importance de corroborer les résultats numériques par des expériences. Un résultat de calcul ne vaut que s'il est vérifié par une mesure ! Il ne faut pas opposer le calcul et l'expérience, mais bien au contraire les associer. Si nos simulations sont de plus en plus fines et sont effectuées sur des machines de plus en plus puissantes, c'est parce que nous disposons d'instruments de mesure de plus en plus fins et précis,
- La nécessité de progresser dans la simulation des phénomènes à différentes échelles : le comportement à l'échelle macroscopique, celle du procédé, est la résultante de ceux aux échelles plus basses. Il faut obligatoirement modéliser ces derniers (par exemple, tenir compte du comportement des boulets individuels dans un four LC composé de milliers de ceux-ci à des stades de transformation plus ou moins avancés). Le développement d'un modèle externe est une solution, mais l'appel à de multiples instances de celui-ci dans le modèle macroscopique n'est pas possible pour conserver des temps de calcul raisonnables. À contrario, considérer un seul comportement « moyen » aux petites échelles n'est pas assez précis à l'échelle macroscopique. Il existe encore de grandes voies de progrès dans le cadre de ce couplage,
- Dans le même cadre, les phénomènes aléatoires associés à la turbulence ne sont pas encore bien intégrés dans les modèles macroscopiques. Le traitement de particules ou de grains solides, ainsi que de gouttes liquides ou bulles gazeuses dans un écoulement métallurgique, est toujours imparfaitement décrit, d'autant que nous tâchons de représenter en deux dimensions un phénomène essentiellement tridimensionnel. Là encore, des progrès peuvent être attendus pour mieux simuler ces phénomènes.

Sur la base de ces constats, je proposerai dans le prochain chapitre quelques pistes à court et moyen terme qui permettront de bâtir mon projet de recherche.

E. Principaux projets, développements de codes et de méthodes numériques

NB : certaines des actions ci-dessous ont été présentées plus en détails dans le chapitre « Bilan de mes activités de recherche » et sont rappelées pour mémoire. Je mentionne succinctement d'autres projets dans lesquels j'ai été impliqué.

- Développement d'un modèle de solidification d'une particule cylindrique posée sur un substrat lors de la projection par plasma thermique (1995).
- Développement de la simulation 3D du procédé de projection plasma atmosphérique, avec prise en compte des particules et détermination de leur répartition sur un substrat placé dans l'écoulement (1995-1998).
- Développement d'un logiciel pour la modélisation du procédé d'hydrofluoration de l'oxyde d'uranium en tétrafluorure d'uranium dans un four à lit coulant, en collaboration avec la société COMURHEX Malvézi (désormais FRAMATOME) dans le cadre de la thèse de J. Jourde (1999-2002;2010-2011).
- Optimisation, maintenance, test et industrialisation de logiciels simulant les procédés de refusion à l'arc sous vide ou sous laitier électroconducteur (2000-aujourd'hui).
- Simulation du fonctionnement d'une thermobalance à l'aide de Fluent dans le cadre de la thèse d'A. Genin (2003).
- Couplage d'un code de suivi lagrangien de particules et d'un code de simulation de la croissance de cristaux équiaxes au cours du procédé de coulée semi-continue de l'aluminium dans le cadre de la thèse de N. Houti (2003).
- Développement de fonctions utilisateurs (UDF) pour modéliser le procédé de refusion par bombardement électronique à l'aide du logiciel Fluent (2004-2006).
- Implantation de lois de transformation de phase dans le logiciel de mécanique du solide Zebulon lors de la trempe et du revenu des aciers (2003-2010).
- Passage du code Solid (pré-processeur et post-processeur graphiques, ainsi que partie exécutable) de HP-UX à Linux (2005).
- Développement de fonctions utilisateurs (UDF) pour modéliser et simuler le comportement des inclusions solides dans les réacteurs métallurgiques, notamment lors de la coulée en poche de l'aluminium (2008-2012). Co-signataire du dépôt logiciel auprès de l'APP (Autorité de Protection des Programmes).
- Mise au point d'un benchmark numérique et expérimental afin de valider et compléter les modèles utilisés dans la simulation numérique de la solidification d'alliages métalliques (2008-2012).
- Mise au point d'un code "boîte à outils" pour la simulation tridimensionnelle des procédés d'élaboration et de solidification (2009-2012).
- Parallélisation d'un code fortran 90 de calcul trajectographique dans le traitement des alliages métalliques (2011-2012).
- Développement d'un code fortran pour la simulation du procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur : prise en compte du passage de courant dans la lingotière (en collaboration avec Aubert et Duval) (2011-2014).
- Développement d'un code fortran pour la simulation du procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur : prise en compte des gouttes de métal et couplage avec la fusion de l'électrode (en collaboration avec Aubert et Duval) (2017-2021).

PROJET DE RECHERCHE

*Il n'y avait plus autour de lui qu'un vide éclatant,
une réverbération éblouissante annonciatrice
de cet épiphénomène auquel on donne le nom de « réalité ».*

Philip K. Dick, Le Dieu venu du Centaure, 1965

NB : Les références citées ci-dessous sont spécifiques à la partie projet et regroupées à la fin de celle-ci.

Mes activités actuelles d'ingénieur de recherche double compétence *science des matériaux / procédés* et *simulation numérique / développement de code* s'organisent autour d'une partie recherche et d'une partie ingénierie (dans le cadre des développements de codes et méthodes liés à mon cœur de métier, mais également dans la partie administration de la recherche et portage de projets structurants). Mon activité future, une fois l'HDR obtenue, maintiendra cet équilibre, mais les proportions consacrées à chaque facette seront amenées à évoluer. Si aujourd'hui 30% de mon activité correspond au soutien aux équipes « Procédés d'élaboration » et « Solidification » du département SI2M de l'IJL, je compte réorienter, en relation avec les chercheurs de ces équipes, mes missions afin que la recherche y prenne une place plus importante (a minima 50%).

L'obtention de l'HDR me permettra d'exercer une réelle autonomie pour porter certains thèmes de recherche plus « amont » dans les thématiques numériques avant leur application « aval » dans les activités scientifiques du laboratoire. Par ailleurs, les réflexions en cours au sein du Département SI2M, en lien avec les départs de chercheurs et enseignants-chercheurs prévus au début du prochain projet quinquennal, visent à créer un axe transversal dédié à la modélisation des procédés. Des besoins en compétences liées aux procédés d'élaboration et à leur modélisation se font jour, et mon profil ainsi que les projets de recherche que je compte mener sont en complète adéquation avec ces besoins.

Mes activités de recherche continueront donc à porter sur la simulation numérique des procédés, notamment dans le domaine de la métallurgie d'élaboration et de la solidification des alliages. J'envisage de développer des études portant sur 3 thématiques principales :

- La simulation fine des procédés d'élaboration des alliages par refusion VAR ou ESR à l'échelle industrielle,
- Le développement de modèles de changements d'échelle / de dimension dans ces procédés,
- La simulation du mouvement de particules (solides, liquides, gaz) dans un écoulement turbulent.

Je terminerai par quelques perspectives plus lointaines, qui restent encore à mûrir, mais pourraient ouvrir un champ d'exploration très vaste.

A. Simulation fine des procédés d'élaboration des alliages par ESR (ou VAR)

Les études déjà menées dans le cadre des thèses sur le procédé ESR ont levé un certain nombre de verrous. Elles ont ainsi permis d'intégrer dans le modèle de simulation numérique SOLECS des spécificités que partagent peu voire pas d'autres logiciels dans le monde :

- Prise en compte du passage du courant dans la lingotière [1],
- Prise en compte de l'influence des gouttes sur l'hydrodynamique et la thermique du laitier et du lingot [2],
- Couplage entre la fusion de l'électrode et la croissance du lingot [1,2].

Ces avancées sont significatives, mais peuvent être encore affinées. Par ailleurs, d'autres ajouts sont à prévoir :

- La prise en compte du passage du courant dans la lingotière (qui peut avoir un effet important sur la qualité de peau du lingot) est très gourmande en ressources de calcul, ce qui rend difficilement exploitable cette version du logiciel à l'échelle industrielle. Un travail doit être mené à la fois pour améliorer les algorithmes (méthodes de résolution de type gradients conjugués ou GMRES), optimiser les calculs (méthodes d'interpolation de la conductivité électrique à l'interface laitier/lingotière, amortissement des variations brutales lors d'un changement de milieu), mais on pourrait également réfléchir à un autre traitement du problème physique (résoudre une variable différente ? ne pas travailler avec la méthode des volumes finis pour cette dernière ?). Cette piste peut faire l'objet d'une (partie d'une) nouvelle thèse, ou être le sujet d'un stage de master pour un étudiant de formation mathématique ou numérique.
- La prise en compte de l'influence des gouttes sur l'hydrodynamique et la thermique du laitier et du lingot est une avancée mais l'étude doit être poursuivie. Afin de rendre le modèle 2D diphasique du bain de laitier plus précis et prédictif, la description du comportement du film liquide devra être complétée, notamment en prenant en compte l'effet de la tension interfaciale. On pourra également enrichir le système de génération de gouttes en estimant plus précisément la valeur de l'épaisseur critique en fonction des propriétés physico-chimiques et de la température. Le profil de répartition des gouttes dans le lingot, leur profondeur d'impact, feront l'objet d'une étude paramétrique, potentiellement renforcée par un modèle dédié (en 2 voire 3 dimensions). À titre illustratif, la figure 27 montre une simulation 3D de la formation de gouttes et de leur évolution au cours du temps jusqu'au détachement. On voit bien la complexité des phénomènes mis en jeu, qu'il faudra « traduire » au mieux dans un modèle 2D.

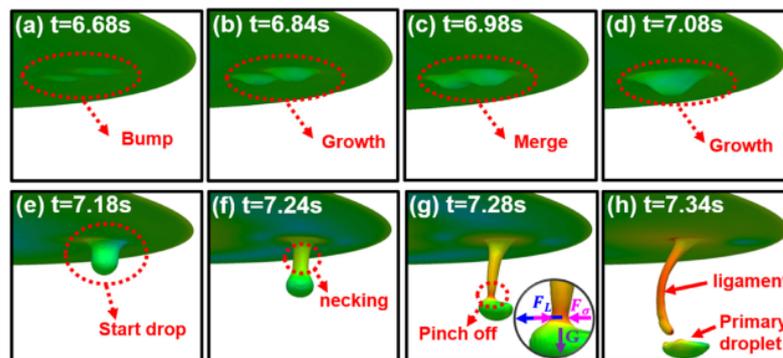


Figure 27 : Formation au cours du temps de gouttelettes au bas de l'électrode lors de la refusion ESR. La couleur correspond à l'intensité de la densité de courant électrique [4].

- Une autre piste d'étude concerne la caractérisation et la modélisation de la pénétration des gouttes dans le puits liquide, puis de leur dissolution et de leur mélangeage dans ce dernier, puisqu'aujourd'hui notre modèle considère que les particules cessent d'interagir à une certaine profondeur mais sans changer de forme, de taille ou de vitesse au cours de leur trajet. Il faudra étudier (aussi bien sur le plan numérique qu'expérimentalement) les effets thermo-hydrodynamiques de l'impact de gouttes dans un bain liquide de même nature. Une modification du modèle de turbulence $k-\epsilon$ de SOLECS, et la prise en compte de la turbulence induite par les gouttes dans le puits liquide devront être envisagés. La figure 28 qui présente la pénétration et la fragmentation de gouttes d'un liquide dans un autre, montre quelques phénomènes mis en jeu. Des lois de comportement pourraient être dégagées par la réalisation d'expériences (via des fluides modèles aux propriétés similaires à celles du métal liquide) et / ou des simulations 3D VOF.

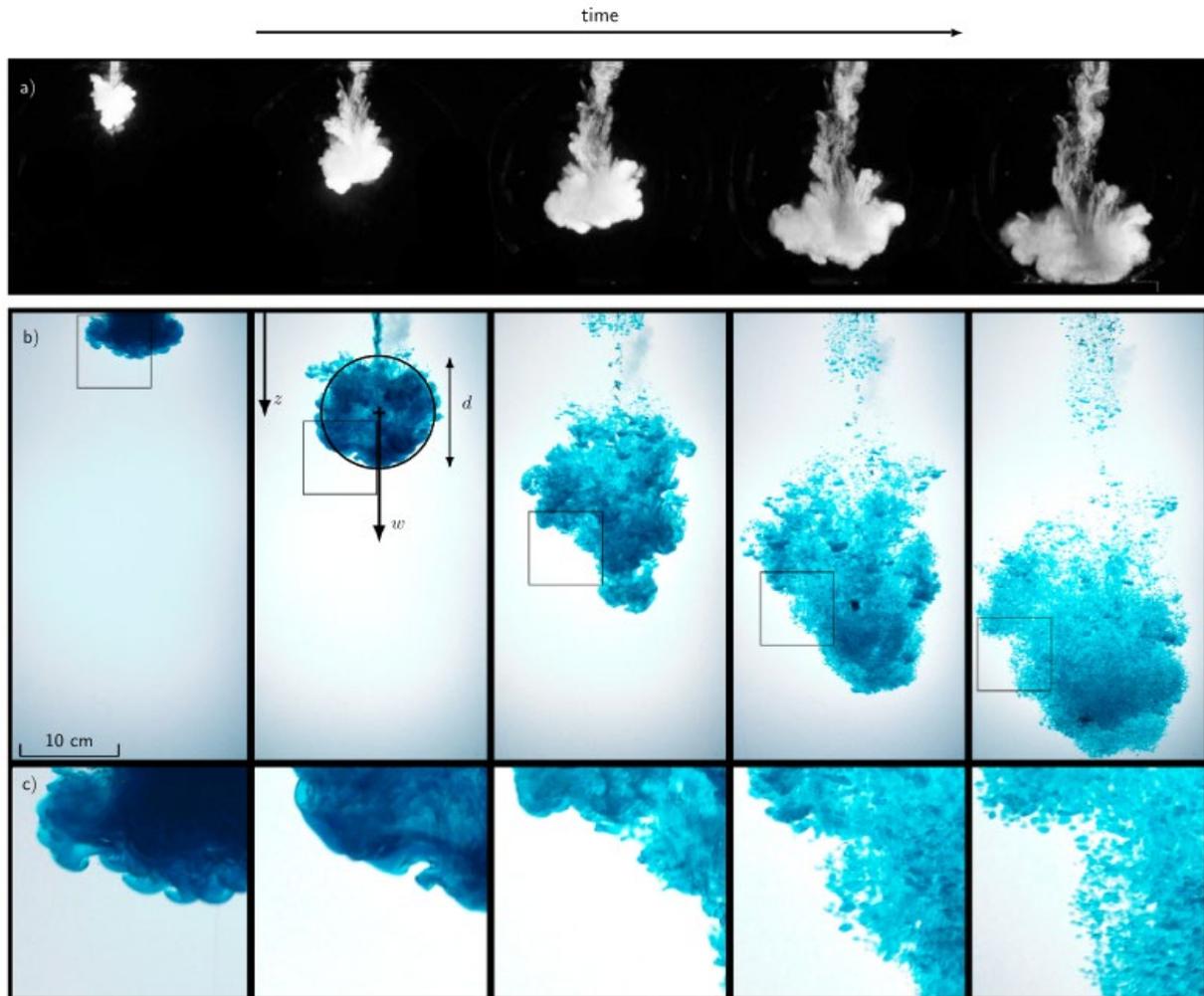


Figure 28 : Expériences sur la dynamique des fluides et la fragmentation d'un mélange métal-silice.

(a) Croissance avec entraînement turbulent pour un nombre de Reynolds de 2.10^3 .

(b) Fragmentation d'un volume de solution aqueuse de sel de NaI (colorée en bleu) libérée dans de l'huile de silicone, pour un nombre de Weber de 3.10^3 et un nombre de Reynolds de 2.10^4 .

(c) Gros plans correspondant aux carrés de (b). Des instabilités de Rayleigh – Taylor à petite échelle sont apparentes dans le premier [5].

- À plus long terme, il pourrait être envisagé d'intégrer dans le modèle SOLECS une description des phénomènes électrochimiques et des transferts de matière entre le métal liquide et le laitier.
- Le couplage entre le modèle de fusion de l'électrode et celui de croissance du lingot permet aujourd'hui de déterminer, entre autres résultats, une vitesse de fusion de l'électrode. Cette valeur n'est pas celle utilisée dans le modèle de croissance du lingot, qui est doté en entrée d'un profil de vitesse de fusion donné par l'utilisateur (puissance électrique apportée et vitesse de fusion de l'électrode au cours du temps). Les deux valeurs de vitesse de fusion sont en bon accord mais pas nécessairement identiques. On constate en général une divergence grandissante au cours de la fusion. En effet, dans la pratique industrielle de la fusion ESR, on procède régulièrement à vitesse de fusion constante. On constate expérimentalement que pour cela, il faut en fin de fusion réduire la puissance fournie au système, comme l'illustre la figure 29.

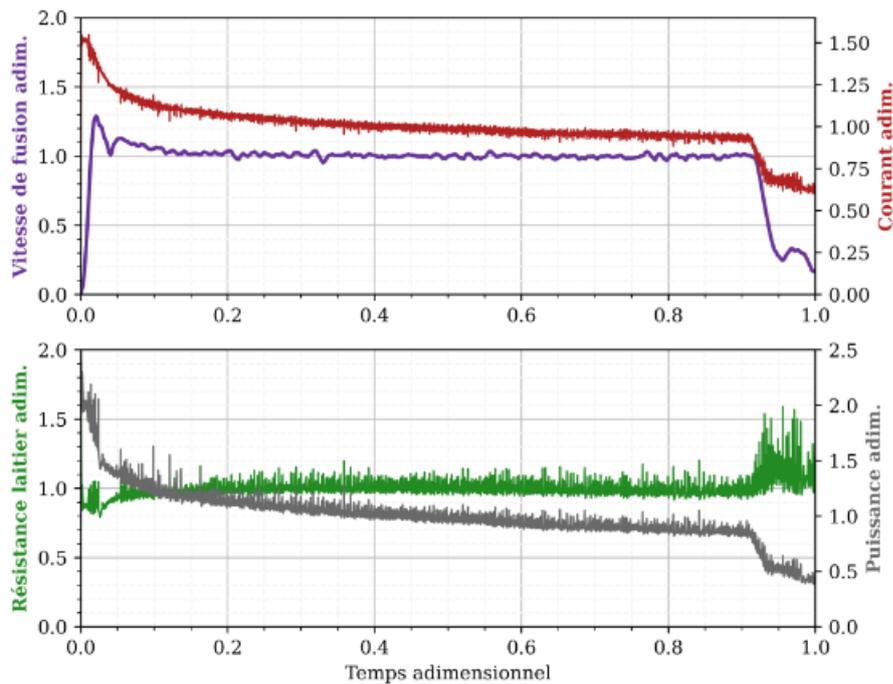


Figure 29 : Évolution de la vitesse de fusion, du courant, de la résistance et de la puissance dans une fusion ESR pilotée à vitesse de fusion constante.

Or si nous utilisons notre modèle couplé avec un tel profil de puissance, la vitesse de fusion déterminée par le modèle de fusion de l'électrode va suivre le profil de puissance, et décroître en fin de fusion, s'éloignant ainsi de la vitesse de fusion mesurée.

Plusieurs pistes peuvent expliquer cet écart :

- Le laitier est susceptible d'évoluer en composition au cours de la fusion, ce qui n'est pas pris en compte dans le modèle. Une (faible) partie se solidifie en paroi, et certaines observations montrent qu'une structure colonnaire peut naître dans le solide. Comme le métal, le laitier peut donc voir sa composition varier du fait d'un rejet de soluté, ce qui pourrait avoir pour effet de modifier sa conductivité électrique. Par ailleurs, une fraction de laitier est consommée pour former la peau de laitier autour du lingot, conduisant à une variation de sa hauteur et possiblement à une variation de la profondeur d'immersion de l'électrode dans ce laitier.
 - La conductivité thermique de l'électrode peut varier avec la température, ce que nous ne prenons peut-être pas correctement en compte dans le modèle actuel.
 - Le modèle de fusion de l'électrode est monodimensionnel. Un passage en 2D de ce code permettra de tenir compte des échanges thermiques entre l'électrode et le gaz ambiant (dont on calculerait précisément la température), ce qui peut générer dans l'électrode des gradients radiaux de température, et réduire la puissance nécessaire pour fondre le bas de celle-ci, affectant donc la vitesse de fusion. On pourrait également de cette façon envisager de modéliser l'évolution de la pointe de l'électrode en fusion qu'on suppose plane alors que des observations et simulations 3D montrent qu'elle peut prendre des formes convexes ou concaves selon les paramètres opératoires (conduisant là aussi à des variations de surface de contact et d'immersion de l'électrode dans le laitier, et donc affectant potentiellement la vitesse de fusion). Ces études pourront être menées en poursuivant nos collaborations avec A. Kharicha au Département métallurgie de la Montanuniversität Leoben (Autriche).
- Par un couplage entre les deux modèles ci-dessus, il s'agirait d'utiliser pour la croissance du lingot la vitesse de fusion donnée par le modèle de l'électrode, elle-même conditionnée par les résultats du modèle du lingot lui servant de conditions aux limites en entrée. Ainsi, une seule valeur piloterait l'ensemble du procédé et évoluerait librement comme un résultat du modèle global. Ce point est d'ailleurs commun aux procédés VAR et ESR.
 - L'immersion de l'électrode au sein du laitier est fixe pour toute la durée de la fusion dans le code actuel. On peut imaginer modifier cette immersion au cours du temps, une fois le couplage réalisé, afin de l'asservir à la vitesse de fusion (on se rapproche ainsi de la pratique

industrielle qui consiste à piloter l'opération par la tension ou par la résistance du laitier qui est liée à la distance électrode – puits liquide).

- En termes de solidification, un modèle plus complet de la formation et de l'éventuelle refusion de la peau de laitier pourrait être développé et implémenté dans SOLECS.
- Enfin, un modèle tridimensionnel du procédé VAR est en cours de développement au laboratoire, en collaboration avec la startup O2M Solutions, basé sur le logiciel de CFD OpenFOAM dans lequel les spécificités de nos propres logiciels sont intégrées [3]. En effet, les modèles bidimensionnels ne suffisent pas à capturer finement certains phénomènes qui se développent selon 3 dimensions (mouvements de l'arc dans le cas du VAR, formation des mésoségrégations par exemple). Cette démarche est à poursuivre, voire appliquer également au modèle ESR, selon deux axes de travail : d'une part, implémenter toute la connaissance dont nous disposons dans nos codes 2D, dans la version 3D, ce qui n'a rien de trivial. D'autre part, tirer de l'exploitation du code 3D des améliorations que l'on pourrait reporter dans le code 2D, ou définir en parallèle de la version 3D une version 2D équivalente, mais dont le temps de calcul serait compatible avec une exploitation industrielle des logiciels. Nos partenaires industriels au sein du Club Solar sont d'ailleurs favorables à cette démarche. Le code tridimensionnel restera un outil de laboratoire, mais si des modèles microscopiques et/ou mésoscopiques doivent être développés et couplés avec les modèles macroscopiques 3D, il faudra bien conserver des temps de calcul raisonnables, même pour un code de recherche. Nous ne pouvons donc pas faire abstraction de l'amélioration algorithmique/numérique des codes que nous développons.
- Sur le plan expérimental, il serait nécessaire d'effectuer des mesures de température au sein d'une électrode de dimension industrielle afin de valider le modèle thermique. La réalisation de refusions d'essai complémentaires permettrait de conforter les conclusions. L'ensemble de ces études continuera à être mené dans le cadre du Club Solar qui nous associe à nos partenaires industriels, cette structure ayant prouvé son intérêt, son efficacité et sa souplesse. Tous les membres actuels tiennent à la faire perdurer dans des conditions relativement proches ou identiques à ce qu'elles sont aujourd'hui. Je dois prendre la suite d'Alain Jardy en tant que responsable du Club après son départ (à l'horizon 2023).

B. Développement de modèles de changements d'échelle / de dimension

La simulation des procédés à l'échelle macroscopique implique la prise en compte d'effets à différentes échelles, souvent microscopiques. Ainsi, la ségrégation des éléments mesurée à l'échelle des lingots métalliques dépend directement du comportement de chaque grain à l'échelle microscopique, puis des interactions entre un certain nombre de grains à l'échelle mésoscopique. Si des modèles peuvent rendre compte du comportement d'un grain ou de plusieurs grains en interaction, il est impossible de simuler le lingot sur la base d'un modèle de grains, car la puissance de calcul nécessaire n'existe tout simplement pas !

Il est donc nécessaire de développer des lois de changement d'échelle qui soient suffisamment précises pour rendre compte des phénomènes aux sous-échelles dans un modèle macroscopique, mais suffisamment peu gourmandes en temps de calcul afin de permettre une modélisation à l'échelle du procédé dans un temps restant raisonnable (un bon ordre de grandeur étant que le temps de la simulation soit identique à celui de l'élaboration de l'alliage, i.e. quelques heures).

Une initiative mondiale a d'ailleurs vu le jour pour développer une stratégie multi-échelles de simulation des matériaux, l'ICME (Integrated Computational Materials Engineering) [6,7].

Les approches de type prise de moyenne volumique permettent d'incorporer les résultats à des échelles inférieures dans un modèle macroscopique via des termes sources ajoutés aux équations moyennées. Ces termes peuvent certes être complexes, mais restent basés sur des simplifications [8].

Dans le cadre des changements de dimension, on va en général partir d'un modèle 3D, gourmand en temps de calcul et souvent utilisé sur un domaine de calcul réduit par rapport à l'échelle du procédé complet, et tirer des lois constitutives à incorporer dans le modèle 2D. Là aussi, des simplifications sont nécessaires.

Ces réductions (de taille de population prise en compte / de dimension) vont non seulement conduire à des approximations dans le modèle du procédé, mais vont également lui faire perdre en généralité. On peut parfaitement imaginer qu'une loi qui représente bien le phénomène microscopique dans des conditions opératoires et pour une composition donnée ne fonctionne plus pour d'autres compositions sous d'autres conditions opératoires !

Comment dans ces conditions obtenir des lois à la fois précises et générales, sans être trop complexes en terme d'implémentation et de temps de calcul ? On peut envisager plusieurs scenarii :

- Ne plus se baser sur des lois moyennées, mais tenir compte de fluctuations autour de ces moyennes, par exemple en déterminant la densité de probabilité d'une variable d'avoir une valeur donnée : ainsi le même calcul macroscopique effectué plusieurs fois dans les mêmes conditions ne se baserait plus forcément sur le même résultat microscopique,
- Rendre plus généralistes les modèles en se basant sur la fouille de données appliquée à de grands jeux de résultats obtenus à l'échelle microscopique. Ceci permettrait d'ajouter aux lois d'échelles la composante d'effet de composition et des conditions opératoires, mais au prix de quelle complexification ?
- Envisager d'opérer les calculs différemment afin qu'un modèle microscopique puisse s'exécuter un grand nombre de fois dans un modèle macroscopique sans grever le temps de calcul : par exemple imaginer des calculs hybrides où n instances du modèle microscopique seraient exécutées sur des cœurs de processeurs graphiques (GPU), pendant que le modèle macroscopique les appelant fonctionnerait sur processeur classique (CPU), au sein d'un code potentiellement parallélisé. Cela revient à écrire des programmes avec des paradigmes totalement différents de ceux que nous pratiquons aujourd'hui.

C. Simulation du mouvement des grains / gouttes dans un écoulement turbulent

Un certain nombre de projets dans lesquels je me suis impliqué font intervenir la simulation du mouvement de grains (ou de gouttes) dans un écoulement turbulent gazeux ou liquide (potentiellement poreux) : c'est le cas dans la projection thermique, dans les procédés VAR et ESR, dans la solidification des alliages. Ce cas peut aussi se présenter dans les réactions gaz-solide.

A priori, ce problème est bien connu et se simule classiquement avec des hypothèses simplificatrices (cf. [9,10] en particulier) :

- On considère une particule sphérique et on résout sa trajectoire avec une méthode de type lagrangien (bilan de forces sur celle-ci en intégrant gravité, traînée, portance, masse ajoutée, etc.),
- Ceci nécessite de déterminer un coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds associé à la particule. Ce dernier fait intervenir entre autres la vitesse du fluide à l'endroit où la particule se trouve et le diamètre de celle-ci (ainsi que la viscosité du fluide),
- On peut alors adapter le coefficient de traînée en fonction du diamètre de la particule (fixe, ou évoluant avec le temps), de sa forme (sa traînée change pour tenir compte du fait qu'elle ne demeure pas sphérique), de la turbulence du fluide (plusieurs particules lâchées en un même point dans les mêmes conditions initiales « voient » localement une vitesse fluide à laquelle se superpose une composante aléatoire et peuvent ainsi acquérir des trajectoires différentes). La prise en compte d'un milieu poreux nécessite d'adapter la viscosité du fluide équivalent,
- En calculant les trajectoires de nombreuses particules on peut déterminer à une certaine distance du point d'émission une distribution de ces dernières, ou calculer une trajectoire moyenne pour une particule « représentative », etc.

Ce type de modélisation donne certes des résultats satisfaisants, mais ne permet pas de prendre en compte certains phénomènes, et on pourrait imaginer des pistes d'amélioration :

- La turbulence du fluide est classiquement simulée par des modèles à 2 équations, notamment le modèle $k-\varepsilon$. On sait que ce modèle est valide pour une turbulence établie, ce qui est rarement le cas dans les écoulements de métal liquide. Il faudrait a minima ajouter une modélisation à bas nombre de Reynolds, voire envisager des modèles différents ($k-\omega$ plus adapté au faibles nombre de Reynolds, SST – pour Shear Stress Transport – qui combine $k-\omega$ et $k-\varepsilon$ selon la zone de l'écoulement, voire modèles plus complexes) [11,12],

- La modélisation d'un groupe de particules fait classiquement l'hypothèse d'absence d'interactions entre celles-ci. Toutefois, dans certains cas, on ne peut plus les ignorer : lors de la sédimentation de grains équiaxes en solidification, ou en cas de précipitation, agglomération, coalescence de particules dans des écoulements métalliques. Des traitements spécifiques sont alors nécessaires [13,14], comme modéliser un groupe de grains de grande taille mais simplifier l'influence du fluide les environnant dans une approche par la méthode des éléments discrets (DEM), méthode récemment développée à l'IJL [15],
- Dans le cas où les particules peuvent agir en retour sur le fluide, une approche lagrangienne n'est plus possible. On doit passer à un modèle à deux fluides, dans une approche Euler-Euler : la phase dispersée (voire plusieurs si on a des raisons de considérer que les particules forment différentes populations) et la phase continue qui la / les porte sont traitées comme des fluides. Le modèle complet nécessite la résolution de deux (ou plus) couples d'équations de Navier-Stokes et deux (ou plus) équations de continuité. Cette méthode est précise mais coûteuse en temps de calcul, surtout à l'échelle d'un réacteur industriel et / ou si on multiplie les phases.

D. À moyen terme...

Dans ce qui précède, je n'ai abordé que les méthodes de résolution « directes », qui partent d'un alliage aux propriétés bien définies pour aller vers le matériau élaboré avec une certaine histoire thermique et des conditions de solidification qui lui confèrent ses propriétés d'usage. Mais l'utilisateur de code, qui connaît les propriétés d'usage qu'il souhaite, aimerait plutôt connaître le matériau à refondre et la voie d'élaboration à choisir [16] ! Pour lui répondre aujourd'hui, nous avons à disposition les connaissances scientifiques qui peuvent nous conduire à sérier des catégories de « candidats » avec les bonnes propriétés, et l'essai-erreur numérique, qui nous permet de trouver, parmi un certain nombre de voies possibles, lesquelles sont les plus prometteuses et méritent des essais expérimentaux. La simulation inverse, qui partirait du résultat pour aller vers la donnée, est une voie extrêmement prometteuse. Si une telle approche est encore loin d'être au point aujourd'hui, la fouille de données et l'intelligence artificielle, qui permettent de cribler un ensemble énorme de résultats dont nous disposons (numériques et / ou expérimentaux) sont sans doute une voie d'avenir à explorer. J'ai d'ailleurs co-organisé avec E. Gaudry (désormais Directrice du mésocentre EXPLOR) une journée sur cette thématique en 2019 pour présenter certaines méthodes aux chercheurs, ingénieurs et doctorants du laboratoire. Par ailleurs, c'est entre autres à mon initiative que le rapport de prospective de la section 15 du Comité National du CNRS, dans laquelle je suis élu, a introduit en conclusion la nécessité de faire appel aux outils de l'intelligence artificielle.

Il est toutefois peu probable que nous abandonnions nos modèles et méthodes de travail pour passer à des outils qui ne se baseraient que sur les données disponibles pour établir des modèles, sans tenir compte des contraintes physiques ! En revanche, l'intelligence artificielle (on devrait surtout parler d'apprentissage automatique) peut être associée à la simulation numérique « classique », par exemple sous forme d'émulateurs de paramétrisation, pour élaborer des modèles hybrides.

Ceci permettrait une nouvelle approche dans le cadre des changements d'échelle que j'aborde au chapitre B ci-dessus : dans un domaine à l'échelle macroscopique doté d'un maillage trop grossier pour résoudre tous les phénomènes aux échelles inférieures, les données nécessaires au modèle au plus haut niveau sont issues d'une base de données générées par des modèles à plus faible résolution. Des grandeurs sont « résolues » sur le maillage principal (vitesse, température, pression, composition, etc.) et on leur associe des sous-modèles qui représentent statistiquement l'effet de processus d'échelles plus petites que la taille de maille (turbulence, ségrégation, cinétique chimique, etc.). Interviennent à ce niveau des techniques de « Machine Learning » (ML), par exemple des réseaux de neurones profonds.

Plusieurs approches sont envisageables :

- Établir des modèles aux échelles les plus basses, où on peut se permettre un maillage très fin, puis rendre celui-ci plus grossier et comparer les résultats dans les deux cas. On sait alors déterminer ce qui a été « perdu » avec le passage à un maillage grossier. En entraînant un modèle sur de nombreux cas de ce type, on peut tenter de lui faire traiter le cas inverse : quel résultat sur un maillage fin conduirait à ce que j'obtiens sur le maillage grossier ?
- Développer par la même approche de nouveaux schémas numériques qui diffuseraient moins et permettraient de retenir l'effet des structures fines sur un maillage grossier,

- Travailler à l'optimisation du pas de temps, par exemple en améliorant la correction de pression lors de la résolution des équations de Navier-Stokes afin que les itérations ne soient pas trop nombreuses : le réseau de neurones peut apprendre à fournir une solution initiale suffisamment proche de la valeur finale pour qu'on n'ait pas besoin d'itérer, ou très peu. Ceci peut aussi s'appliquer à des modèles sous-jacents comme des modèles d'équilibre chimique, de solidification, etc. qui nécessitent une résolution avec un sous-pas de temps.

La figure 30 [17] illustre un exemple de ce type d'approche : il s'agit de déterminer de nouveaux alliages à haute entropie (HEA) dont la résistance mécanique serait la plus forte possible, et la composition homogène. Un algorithme de type génétique est utilisé en fonction d'un certain nombre de critères :

- La CSSR (Contribution de la Solution Solide au Renforcement), en ordonnée à gauche,
- La masse volumique, en abscisse.

Il peut être important d'augmenter la résistance mécanique spécifique, i.e. le rapport CSSR / masse volumique. Les alliages doivent donc se trouver le plus à gauche possible, et le plus haut possible sur la carte. Mais d'autres critères existent : si pour des applications comme l'aéronautique, une masse volumique plus faible est un bon critère, cette dernière peut être un frein à l'incorporation d'éléments denses comme les réfractaires. Il faut donc trouver un compromis.

Une fois qu'on a joué sur ces deux critères, le travail n'est pas fini car le fait de créer des alliages contenant les mêmes éléments qu'un HEA ne fait pas forcément de l'alliage obtenu un HEA lui-même. Et quand bien même, il faudrait que ce dernier soit aussi homogène que possible. Un autre critère (P_{IF}) est donc défini (échelle de couleur à droite) : il caractérise la probabilité qu'un alliage ainsi défini soit un HEA de constitution monophasée. Les meilleurs candidats précédents sont donc ceux dont la couleur est la plus claire sur la carte...

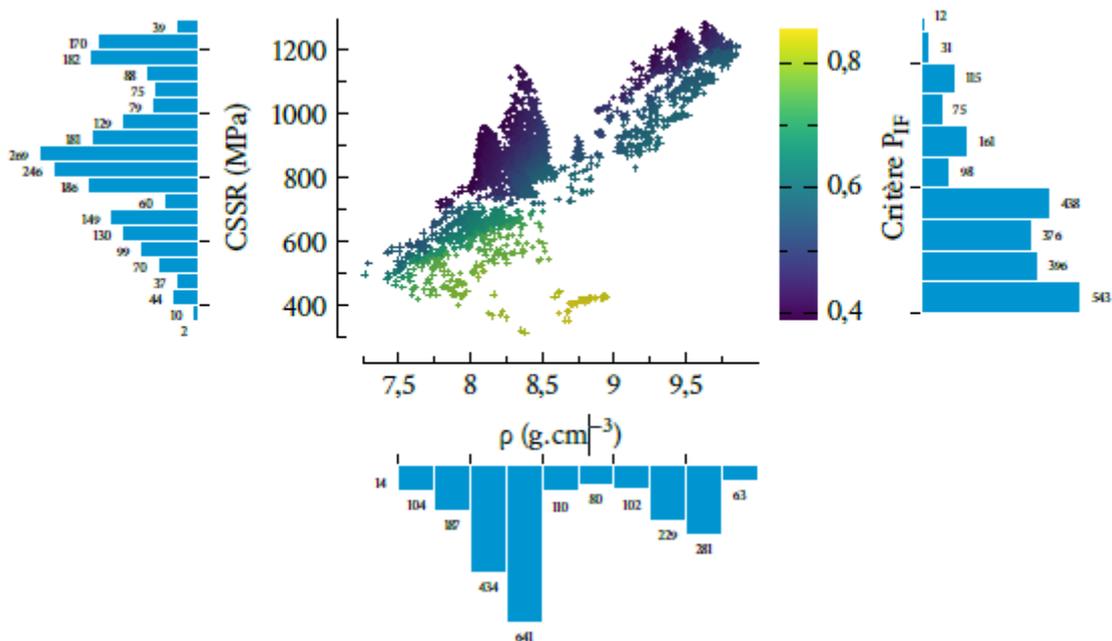


Figure 30 : Résultats de l'optimisation obtenue pour définir des HEA : la contribution de la solution solide (CSSR) est tracée en fonction de la masse volumique ; en couleur est symbolisé le critère P_{IF} . Les histogrammes présentent la répartition des alliages optimaux selon les trois objectifs, suivant l'axe auquel ils sont adossés (de gauche à droite : CSSR, masse volumique, critère P_{IF}). À chaque barre correspond un nombre d'alliages [17].

Dans toutes ces démarches, il faut bien tenir compte des contraintes liées à la physique et à la conservation des extensivités, ce qui est un problème ouvert à ce jour.

Ces approches bénéficient aujourd'hui d'un soutien fort au niveau de l'État, et notamment du CNRS, par exemple dans le cadre de son défi « Nouveaux Matériaux » visant à soutenir des projets de développement de nouveaux matériaux dans une démarche descendante « définition des propriétés visées - conception du matériau - élaboration - validation des propriétés ciblées - modélisation, optimisation et contrôle ». Parmi les démarches envisagées, on notera celles mettant en œuvre des méthodes innovantes de conception : concepts issus de la fouille de texte et de données (TDM) ou de l'intelligence artificielle, optimisation mathématique et numérique, etc.

Il faut souligner également que dans le cadre de l'appel à projet PEPR (Programmes et Équipements Prioritaires de Recherche exploratoire), lancé en mai 2021, le CNRS a ouvert un volet Matériaux comportant des aspects facilitation et aide au franchissement de pas vers l'IA. Un des projets retenus s'appelle DIADEME (Dispositifs Intégrés pour l'Accélération du DÉploiement de Matériaux Émergents). Il est porté côté CNRS par Mario Maglione, dont j'ai été collègue au Comité National du CNRS en section 15. Il vise à accélérer la conception et l'arrivée sur le marché de matériaux plus performants, durables et issus de matières premières non critiques et non toxiques. Il combine de façon intégrée modélisation, simulation numérique, méthodologies associées à l'intelligence artificielle, technologies de synthèse / criblage et caractérisation à haut débit pour identifier des matériaux candidats en réponse à des spécifications données. Sur un plan numérique, il nécessite des outils numériques de modélisation multi-échelle, de fouille de données et d'apprentissage supervisé. Des outils d'IA spécifiques devront être développés pour améliorer l'exploitation des données expérimentales aussi bien que simulées. Il fera également appel à des outils de simulation multi-échelles des matériaux, de l'ab initio à l'échelle mésoscopique, qui devront être interopérables entre eux. Je souhaite m'impliquer dans ce projet et lancer des études sur ces thématiques, mon positionnement transversal me rendant à même de les mener / faire mener. Des collaborations avec des chercheurs de laboratoires déjà engagés dans ces démarches seront nécessaires (C. Goyhenex à l'IPCMS Strasbourg, F. Tancret à l'Institut des Matériaux Jean Rouxel de Nantes entre autres).

E. Références du projet de recherche

- [1] M. Hugo : Modélisation de la Refusion ESR d'Aciers Spéciaux et Superalliages Base Nickel, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 25 juin 2014.
- [2] J. Chaulet, Modélisation du Procédé de Refusion sous Laitier Electroconducteur : Représentation des transferts énergétiques métal-laitier, Thèse de Doctorat de l'Université de Lorraine, 11 mai 2021.
- [3] A. Matveichev, A. Jardy : Modélisation tridimensionnelle du procédé de refusion à l'arc sous vide, Journée *La Métallurgie, quel avenir !*, avril 2019, Nancy, France ([hal-02401016](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02401016)).
- [4] H. Shi, M. Tu, Q. Chen, H. Shen : Insight into droplet formation in electroslag remelting process by numerical simulation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 158, 119713 (2020)
- [5] R. Deguen, M. Landeau, P. Olson : Turbulent metal-silicate mixing, fragmentation, and equilibration in magma oceans, *Earth and Planetary Science Letters*, 391, 274-287 (2014).
- [6] Committee on Integrated Computational Materials Engineering, National Materials Advisory Board, Division on Engineering and Physical Sciences, National Research Council : Integrated Computational Materials Engineering: A Transformational Discipline for Improved Competitiveness and National Security, *National Academies Press*. p. 132. ISBN 9780309178211 (2008).
- [7] J.H. Panchal, S.R. Kalidindi, D.L. McDowell : Key Computational Modeling Issues in Integrated Computational Materials Engineering", *Computer-Aided Design*. 45 (1), pp 4-25. doi:10.1016/j.cad.2012.06.006 (2013).
- [8] M. Torabi Rad, M. Založnik, H. Combeau, C. Beckermann : Upscaling Mesoscopic Simulation Results to Develop Constitutive Relations for Macroscopic Modeling of Equiaxed Dendritic Solidification, *Materialia* 5, 100231 (2019).
- [9] B. Dussoubs, A. Vardelle, G. Mariaux, N.J. Themelis, P. Fauchais : Modeling of Plasma Spraying of Two Powders, *Journal of Thermal Spray Technology* 10 (1), 105-110 (2001).
- [10] J. Chaulet, A. Kharicha, S. Charmond, B. Dussoubs, S. Hans, M. Wu, A. Ludwig, A. Jardy : A 2D Multiphase Model of Drop Behavior during Electroslag Remelting, *Metals*, 10, 490 ; <https://doi.org/10.3390/met10040490> (2020).
- [11] F.R. Menter : Zonal Two Equation k/ω , Turbulence Models for Aerodynamic Flows, *AIAA Journal*: 1993-2906. doi:10.2514/6.1993-2906 (1993).
- [12] F.R. Menter : Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, *AIAA Journal*. 32 (8): 1598-1605, doi:10.2514/3.12149 (1994).
- [13] G.A. Bird : Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, *Oxford Science Publications*, 1976.

- [14] R. Clift, J.R. Grace, M.E. Weber, *Bubbles, Drops and Particles*, Academic Press, 1978.
- [15] A. Olmedilla, M. Založnik, T. Messmer, B. Rouat, H. Combeau : Packing Dynamics of Spherical and Nonconvex Grains Sedimenting at Low Stokes Number, *Phys. Rev. E* 99, 012907 (2019).
- [16] G.B. Olson : Designing a New Material World, *Science*. 288 (5468): 993–998. doi:10.1126/science.288.5468.993 (2000).
- [17] E. Menou : Conception d’alliages par optimisation combinatoire multiobjectifs : thermodynamique prédictive, fouille de données, algorithmes génétiques et analyse décisionnelle, Thèse de Doctorat de l’Université de Nantes, 19 octobre 2016.

PIÈCES JOINTES

- Autorisation d'inscription à l'HDR de l'Université de Lorraine

[...] C'était compliqué, alors j'ai essayé d'expliquer ce qu'était le Graal, pour que tout le monde comprenne.

C'était difficile, alors j'ai essayé de rigoler pour que personne ne s'ennuie.

J'ai raté... mais je veux pas qu'on dise que j'ai rien foutu, parce que c'est pas vrai.

Arthur, Kaamelott, Livre V, 2007.

*Contribution à la simulation numérique des procédés à haute température :
développer des outils de recherche pour des applications industrielles*

Les projets présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans le cadre de la simulation des procédés d'élaboration des matériaux à haute température, aussi bien les céramiques que les métaux. Ils ont en commun l'utilisation des outils numériques, codes « maison » ou commerciaux (toujours avec adaptation à nos problématiques) pour simuler, à l'échelle macroscopique ou mésoscopique, un procédé industriel au sein duquel les mesures sont limitées par les conditions environnementales. La simulation numérique est alors une voie privilégiée pour comprendre le procédé et optimiser la conduite des réacteurs. Sont abordés tour à tour : la projection par plasma thermique, la conversion d'oxyde d'uranium en tétrafluorure, des procédés de traitement du métal liquide (fusion BE, élaboration sous laitier électroconducteur – ESR) et la solidification des alliages métalliques.

Des articles publiés dans des revues internationales illustrent les principaux aspects des modèles et leur utilisation dans un cadre de recherche appliquée.

Les perspectives portent à la fois sur la continuation de mes recherches actuelles (procédé ESR), sur certains verrous à lever (modèles de changements d'échelle et/ou de dimension, simulation du mouvement de grains ou de gouttes et leurs interactions dans un écoulement turbulent), et s'ouvre sur les nouveaux horizons que peuvent apporter la fouille de données et l'intelligence artificielle dans le cadre de la conception de nouveaux matériaux.

Mots-clés : simulation numérique, calcul scientifique, procédés d'élaboration, matériaux, recherche appliquée.

*Contribution to the numerical simulation of high temperature processes:
developing research tools for industrial applications*

The projects presented in this manuscript are embedded in the numerical simulation of the elaboration processes of materials at high temperature, both ceramics and metals. They have in common the use of numerical tools, in-house or commercial codes (always with adaptation to our problems) in order to simulate, at a macroscopic or mesoscopic scale, an industrial process in which measurements are limited by environmental conditions. Numerical simulation is thus a privileged way to understand the process and optimize the operation of reactors. The following topics are discussed in turn: thermal plasma spraying, the conversion of uranium oxide to tetrafluoride, liquid metal processes (EB melting, ElectroSlag Refining - ESR) and the solidification of metallic alloys.

Different papers published in international journals illustrate the main aspects of the models and their use in the context of applied research.

The perspectives relate both to the continuation of my current research activities (ESR process), to certain obstacles to be overcome (models of scale and / or dimension change, simulation of the movement of grains or drops and their interactions in a turbulent flow), and opens up new horizons that data mining and artificial intelligence can bring to the design of new materials.

Keywords: numerical simulation, scientific computing, elaboration processes, materials, applied research