

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université El-Hadj Lakhdar - BATNA 1

Faculté des Sciences de la Matière

Département de Physique



# THÈSE

En vue de l'obtention du  
Diplôme de Doctorat

Présenté par :  
**Afaf DJARAOUI**

Thème :

.....  
**CONTRIBUTION AUX PHENOMENES DE  
DECOMPOSITION DANS LES ALLIAGES BINAIRES**  
.....

*Spécialité : Physique Des Matériaux Métalliques et Semi Conducteurs*

Soutenu le : 25 / 05 / 2017

**Devant le jury :**

Président :	<b>A. Belgacem Bouzida</b>	Professeur	Université Batna 1
Rapporteur :	<b>S. Nebti</b>	MCA	Université Constantine 1
Examineur :	<b>E. Belbacha</b>	Professeur	Université Batna 1
Examineur :	<b>Y. Djaballah</b>	Professeur	Université Batna 1
Examineur :	<b>N. Boukheit</b>	Professeur	Université Constantine 1
Examineur :	<b>M. Boucheur</b>	Professeur	Université Constantine 1

## إهداء خاص لأبي المتوفى



كنت أود أن أكون كاتبة أو شاعرة لأعبر عما بداخلي بكلمات جميلة ومرموقة

لكن هيهات هيهات يا أبي

فلم أتعلم إلا لغة الأرقام وصار كل شيء يسوده المنطق.

كنت أتمنى لو أعطيتك هذه المذكرة لنتصفحها وتفتخر بإنجازي

لكن هيهات هيهات يا أبي

فلم يبقى لي غير حفن من تراب تغطي جسدك.

كنت أفضل أن تكون أنت كل الحضور

لكن هيهات هيهات يا أبي

فبين كل الحضور لن تكون موجود.

هيهات هيهات لموت يخطف القلوب.

فلتكن هذه المذكرة صدقة جارية لأبي.

**La vie, c'est comme une bicyclette, il faut avancer pour ne pas perdre l'équilibre.**

*Albert Einstein*

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier tout d'abord dieu de m'avoir donné le courage et la force afin de dépasser toutes les épreuves difficiles et les obstacles pour accomplir ce travail de recherche.

Je suis vivement reconnaissante à Dr. Samia Nebti, directrice de thèse et Maître de Conférence A à l'Université Constantine 1, pour m'avoir donné l'opportunité de réaliser ce travail. Elle a été, durant toutes ces longues années, d'une très grande disponibilité et patience, au vu des circonstances et le temps qu'elle a elle même consacré, pour la réalisation de ce travail. Elle a su garder confiance en ma capacité à finaliser notre recherche. Je tiens à la remercier également pour ces conseils et sa capacité scientifique que j'admire tant. Je lui dois beaucoup dans la qualité du travail accompli. Elle a su diriger mes travaux avec beaucoup de disponibilité et d'intérêt.

Je tiens, bien évidemment, à remercier les membres du jury de cette thèse:

Je tiens, tout particulièrement, à remercier Mr. A. Belgacem Bouzida, Professeur à l'Université Batna 1, pour nous avoir honoré d'accepter de présider le jury de cette thèse et pour sa contribution dans ma formation.

Je remercie également Mr. E. Belbacha, Professeur à l'Université Batna 1, pour m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail et accepté de participer à mon jury de thèse sans oublier sa contribution dans ma formation.

J'adresse toute ma reconnaissance à Mr. Y. Djaballah, Maître de Conférences A à l'Université Batna 1, pour avoir accepté de lire et examiner avec attention ce manuscrit.

Je ne saurais trouver les mots qu'il faut pour exprimer ma reconnaissance à Mr. N. Boukheit, Professeur à l'Université Constantine 1, d'avoir accepté d'examiner mon travail malgré ses obligations.

Je souhaite aussi exprimer ma reconnaissance envers Mr. M. Boucheur, Professeur à l'Université Constantine 1, pour l'attention qu'il accorde à mon travail et d'avoir accepté de l'examiner.

J'adresse mes sincères remerciements et ma grande gratitude à Mr. M. Afrid, Professeur à l'Université Constantine 1, pour sa contribution dans la réalisation du modèle numérique. Ses conseils et nos discussions scientifiques m'ont beaucoup aidé à comprendre l'axe de recherche de la croissance dendritique.

Je tiens à remercier, de tout mon cœur, mon père, que dieu ait son âme en sa sainte miséricorde, pour son soutien et son intérêt. Que ce travail soit un symbole de ma gratitude.

Je tiens, également, à remercier ma mère pour son réconfort et son soutien sans oublier mes frères, ma sœur et mes belles sœurs (merci Amina pour ton aide).

Un immense merci pour mon mari pour toute contribution apportée dans ce travail ou dans ma vie. Un grand merci, aussi pour mes trois garçons (Younes, Anis et Oais) pour leurs patiences et leurs prières pour terminer ce travail.

# SOMMAIRE

<b>INTRODUCTION ET OBJECTIFS .....</b>	<b>1</b>
 <b>CHAPITRE 1 : CONCEPTS DE BASE ET GENERALITES SUR LA SOLIDIFICATION DES ALLIAGES BINAIRES.</b>	
<b>I. SOLIDIFICATION D'UN ALLIAGE METALLIQUE .....</b>	<b>6</b>
I. 1 Définition .....	6
I. 2 Transformations liquide – solide .....	7
<b>II. SOLIDIFICATION DENDRITIQUE – CONCEPTS THERMIQUE ET MASSIQUE.....</b>	<b>8</b>
II. 1 Thermodynamique de la solidification.....	8
II. 1. 1 Chaleur latente de fusion et température de solidification .....	8
II. 1. 2 Transfert de chaleur par conduction .....	9
II. 1. 3 Loi de Fourier .....	10
II. 1. 4 Equation générale de chaleur .....	11
II. 1. 5 Condition initiale et conditions aux limites.....	13
II. 2 Transfert de masse - Diffusion et transport .....	14
II. 2 .1 Flux de particules - Equation de Fick.....	14
II. 2. 2 Modèle de diffusion - Equation de Scheil-Gulliver .....	15
<b>III. PHENOMENES PHYSIQUES LIES A LA SOLIDIFICATION .....</b>	<b>17</b>
III. 1 Force motrice .....	17
III. 2 Surfusion .....	19
III. 2. 1 Surfusion thermique .....	21
III. 2. 2 Surfusion chimique (ou constitutionnelle).....	21
III. 2. 3 Surfusion de courbure .....	22
III. 3 Germination.....	22
III. 3. 1 Germination homogène.....	22
III. 3. 2 Germination hétérogène .....	24
III. 4 Croissance .....	26
<b>IV. MICROSTRUCTURES FINALES DE SOLIDIFICATION .....</b>	<b>26</b>
<b>V. CROISSANCE DENDRITIQUE EQUIAXE .....</b>	<b>27</b>
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 1 .....</b>	<b>28</b>

## **CHAPITRE 2 : THEORIES ANALYTIQUES DE LA CROISSANCE DENDRITIQUE**

<b>I. EQUATIONS DE BASE</b> .....	30
I. 1 Equation de Gibbs-Thomson .....	31
I. 2 Conditions aux limites .....	31
I. 3 Effet capillaire.....	31
I. 3. 1 Courbure de l'interface .....	31
I. 3. 2 Anisotropie de la tension de surface .....	33
<b>II. INSTABILITE MORPHOLOGIQUE DE L'INTERFACE LIQUIDE – SOLIDE</b> .....	34
II. 1 Instabilité thermique .....	34
II. 2 Instabilité solutale - Critère de surfusion constitutionnelle.....	37
<b>III. CRITERE DE STABILITE – ANALYSE DE MULLINS ET SEKERKA</b> .....	40
III. 1 Vue bibliographique.....	40
III. 2 Formulation mathématique .....	42
<b>IV. VITESSE CRITIQUE DE STABILITE</b> .....	45
<b>V. CINETIQUE DE LA CROISSANCE DU PIC DE LA DENDRITE</b> .....	46
<b>VI. RELATION D'IVANTSOV</b> .....	46
<b>VII. CRITERE DE STABILITE MARGINALE</b> .....	48
<b>VIII. MODELES THEORIQUES DE LA CROISSANCE DENDRITIQUE</b> .....	49
VIII. 1 Modèle LGK .....	49
VIII. 1. 1 Modèle dimensionnel .....	49
VIII. 1. 2 Modèle adimensionnel .....	52
VIII. 2 Modèle LKT .....	53
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 2</b> .....	56

## **CHAPITRE 3 : METHODES CONNUES POUR LA MODELISATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE DENDRITIQUE**

<b>I. TECHNIQUE CHAMPS DE PHASE ( PF )</b> .....	60
<b>II. TECHNIQUE D'AUTOMATE CELLULAIRE ( CA )</b> .....	61
II. 1 Définition.....	61
II. 2 Principe de la méthode CA.....	63
II. 3 Historique de la méthode CA .....	64
<b>III. CORRECTION DE L'ANISOTROPIE ARTIFICIELLE</b> .....	67
III. 1 Correction apportée par Gandin et Rappaz .....	68
III. 2 Correction apportée par la méthode des maillages multicouches .....	69
III. 3 Correction apportée par la méthode de suivi virtuel de front.....	71
III. 4 Corrections apportées par la modification de la redistribution de soluté.....	73

III. 5 Correction apportée par la technique de rotation de la grille .....	75
III. 6 Correction apportée par Marek .....	77
III. 7 Corrections apportées par Zinovieva et al.....	77
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 3 .....</b>	<b>79</b>

## **CHAPITRE 4 : MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION DE L'ALLIAGE AL-8%MG**

<b>I. DESCRIPTION DU MODELE CHOISI .....</b>	<b>84</b>
<b>II. FORMULATION MATHEMATIQUE .....</b>	<b>85</b>
II. 1. Equations de conservation.....	86
II. 2. Cinétique de croissance (calcul de la fraction du solide formé).....	88
II. 3. Calcul de la courbure de l'interface .....	90
II. 4. Calcul de l'anisotropie de la tension de surface.....	92
<b>III. METHODE NUMERIQUE.....</b>	<b>93</b>
III. 1 Méthode des volumes finis.....	94
III. 2 Maillage.....	94
III. 3 Discrétisation de l'équation de base .....	95
III. 3. 1 Discrétisation de l'équation d'énergie.....	99
III. 3. 2 Discrétisation de l'équation de la concentration.....	101
III. 3. 3 Discrétisation des conditions aux limites.....	103
III. 4 Résolution des équations algébriques .....	105
III. 5 Développement de la méthode TDMA .....	105
III. 6 Algorithme de calcul.....	108
<b>IV. APPLICATION DU MODELE .....</b>	<b>109</b>
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 4 .....</b>	<b>111</b>

## **CHAPITRE 5 : SIMULATION DE LA CROISSANCE D'UNE DENDRITE EQUIAXE DANS L'ALLIAGE AL-8%MG**

<b>I. INFLUENCE DES PARAMETRES NUMERIQUES SUR LES RESULTATS DE LA SIMULATION .....</b>	<b>112</b>
I. 1 Anisotropie artificielle .....	112
I. 2 Influence du maillage.....	126
I. 3 Influence du pas de temps.....	133
<b>II. INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSIQUES.....</b>	<b>138</b>
II. 1 Influence du degré de surfusion thermique .....	138
II. 2 Influence de l'anisotropie de l'énergie de surface.....	140
<b>CONCLUSION .....</b>	<b>142</b>

# NOMENCLATURE

## NOTATIONS LATINES

$T$	Température	K ou °C
$T_l$	Température du liquidus	K
$T_s$	Température du solidus	K
$T_f$	Température de fusion	K
$c, c_0$	Concentration de l'alliage	
$c_l$	Concentration du soluté dans le liquide	
$c_s$	Concentration du soluté dans le solide	
$c_l^*$	Concentration du soluté dans le liquide à l'interface	
$c_s^*$	Concentration du soluté dans le solide à l'interface	
$E$	Energie interne	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$F$	Energie libre de Helmholtz	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$G$	Energie libre de Gibbs	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
	Gradient de température	
$\Delta G$	Variation de l'enthalpie libre	$\text{J.m}^{-3}$
$\Delta G_V$	Variation de l'enthalpie libre volumique	$\text{J.m}^{-3}$
$\Delta G_S$	Variation de l'enthalpie libre superficielle	$\text{J.m}^{-3}$
$\Delta G_d$	Variation de l'enthalpie libre de déformation	$\text{J.m}^{-3}$
$\Delta G_v$	Energie libre due à la formation d'un volume	$\text{J.m}^{-3}$
$\Delta G_r$	Variation de l'enthalpie libre associée à la nouvelle interface	$\text{J.m}^{-3}$
$H$	Enthalpie	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.Kg}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$S$	Entropie	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.Kg}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$\Delta S_f$	Entropie de fusion	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.Kg}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$L_v$	Chaleur latente de fusion	$\text{J.mol}^{-1}$ ; $\text{J.Kg}^{-1}$ ; $\text{J.m}^{-3}$
$K$	Conductivité thermique	$\text{Watt.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$C$	Capacité thermique masique	$\text{J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$V$	Vitesse	$\text{m.s}^{-1}$
	Volume	$\text{m}^3$

$P$	pression	Pa
	Nombre de Péclet	
$\Delta P$	Différence de la pression entre le liquide et le solide	Pa
$t$	temps	s
$J$	Flux massique diffusif	%mass.m <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup>
$D$	Coefficient de diffusion	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
$k$	Coefficient de partition ou coefficient de partage	
$f_l$	Fraction liquide	
$f_s$	Fraction solide	
$\Delta T$	surfusion	K
$r$	rayon	m
$m$	Pente du liquidus	K.mass% <sup>-1</sup>
	Ordre de symétrie	
$l_T$	Longueur thermique	m
$d$	Longueur capillaire	m
$n$	Nombre d'atomes	moles
	normal	
$G_l$	Gradient solutal	
$G_T^l$	Gradient thermique dans le liquide	
$G_T^s$	Gradient thermique dans le solide	
$Iv$	Fonction d'Ivantsov	
$(x, y, z)$	Base de coordonnées cartésiennes	
$Sc$	Terme source	

## NOTATIONS GRECQUES

$\phi$	Flux thermique	Watt.m <sup>-2</sup>
	Fonction sinusoïdale	
	Champ de phase ou paramètre d'ordre	
$\alpha$	coefficient de diffusion thermique	m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
$\rho$	Masse volumique	Kg.m <sup>-3</sup>
$\tau$	Volume	m <sup>3</sup>
$\gamma$	Energie spécifique interfaciale ou tension de surface	J.m <sup>-2</sup>
$\kappa$	courbure	m <sup>-1</sup>
$\Omega$	surfusion adimensionnelle	
$\theta$	Ongle de contact	Rad
$\mu$	Coefficient cinétique	!!!!????
$\delta_c$	Longueur de diffusion	m
$\lambda_s$	Longueur d'onde	m
$\Gamma$	Coefficient de Gibbs-Thomson	m.K
	Coefficient général de diffusion	
$\varepsilon$	Facteur d'anisotropie de la tension de surface	
$\delta$	Coefficient d'anisotropie	
$(\eta, \xi, \theta)$	Base de coordonnées paraboloidales	
$\xi$	Fonction de stabilité	
$\sigma^*$	Constante de stabilité	

## EXPOSANTS

*	Interface
s	Solide
l	Liquide
$\infty$	Loin de l'interface
R	Courbure

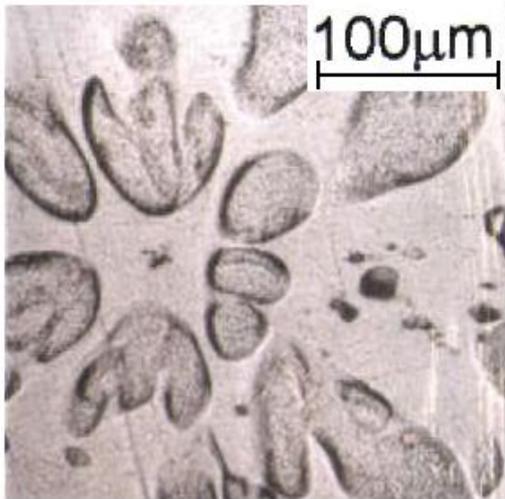
## INDICES

0	Initial	f	Fusion
s	Solide	e	Equilibre
l	Liquide	P	A pression constante
i, $\phi$	Interface	p	A la pointe
T	Thermique	nucl	Germination
C	Chimique ou constitutionnelle	het	Germination hétérogène
R	Courbure	w	Parois
K	Cinétique	int	Interne
m	Molaire	ext	Externe
c	Critique		

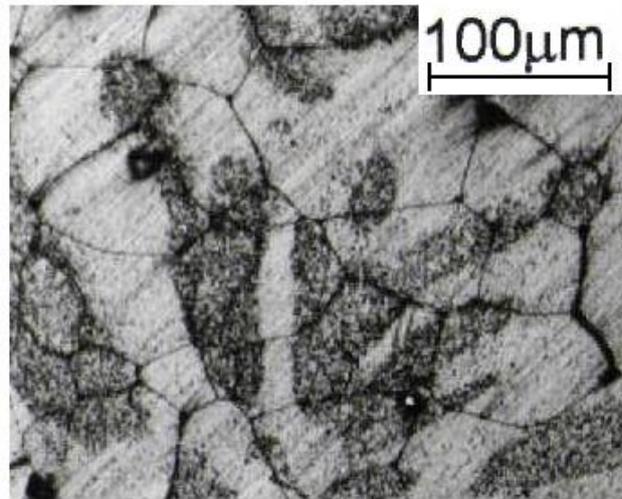
## **INTRODUCTION ET OBJECTIFS**

La structure métallurgique obtenue à l'état de lingot, a souvent une grande influence sur certaines propriétés du matériau. Les défauts formés lors de la solidification sont, en effet parfois très stables et affectent beaucoup la forme des grains comme ils peuvent intervenir très fortement dans le déroulement du phénomène de décomposition de la solution solide sursaturée par trempe. Une étude antérieure, réalisée sur un alliage Al-Mg (Nebti, 1995 ; Nebti ; 1996), nous a montré qu'une structure dendritique équiaxe obtenue à l'état de lingot (une microstructure de solidification), ne pouvait pas être éliminée par les traitements thermiques ou thermomécaniques effectués en phase solide. Ces dendrites persistent même après recristallisation de l'alliage et forment des lieux privilégiés servant de sites préférentiels pour la germination et croissance des particules de la seconde phase lors de la décomposition de la solution solide. La présence de ces dendrites accélère ainsi la cinétique de la formation de cette seconde phase et a même un effet sur son mécanisme et par suite sur le durcissement structural de l'alliage.

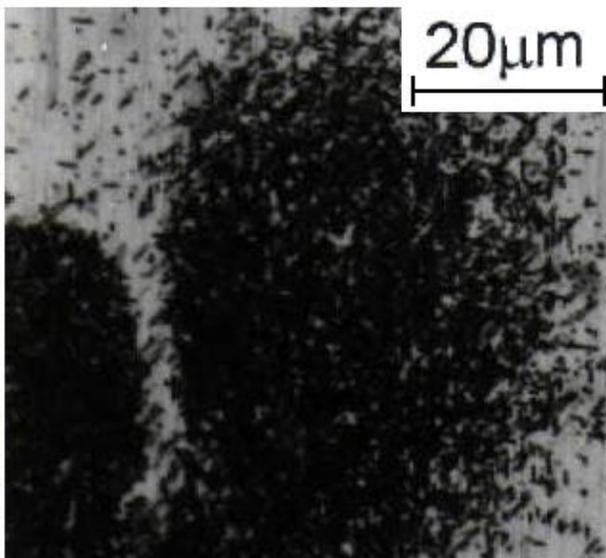
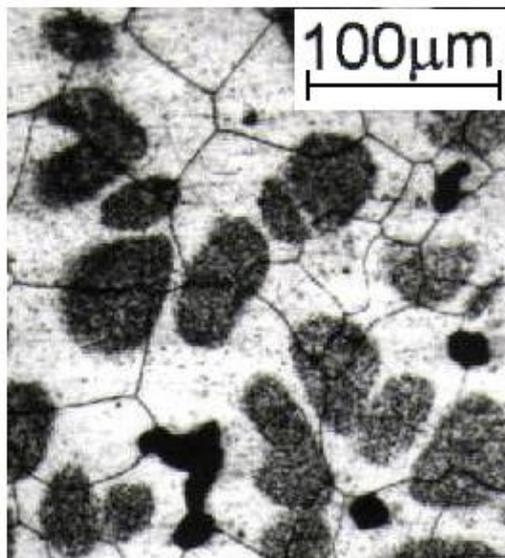
Alliage à l'état de lingot



Alliage après recristallisation



Les dendrites formant des sites préférentiels pour la précipitation de la seconde phase.



Microstructure dendritique observée dans l'alliage Al-8%Mg (Nebti, 1995).

La microstructure dendritique est la plus fréquemment rencontrée dans l'élaboration des alliages binaires. En fonderie, on utilise de grandes vitesses de solidification et les structures les plus couramment observées sont, par suite, dendritiques. Cette structure résulte d'une germination hétérogène de la phase solide sur les grains d'impuretés présents dans le liquide et c'est à cause de cela qu'un affinement de la structure peut être obtenu à l'aide d'une grande dispersion de particules (germes solides) dans l'alliage à l'état liquide. Ces particules constituent des sites favorables pour la germination des cristaux équiaxes, lors de la solidification de l'alliage.

---

L'étude de la solidification dendritique est un problème d'actualité en métallurgie étant donné l'influence des différents paramètres qui gouvernent le processus de solidification, sur la formation des microstructures et l'évolution des défauts résultants à cette étape. C'est pour cela que nous avons jugé qu'il serait utile d'approcher le mécanisme et les facteurs qui entrent en jeu pour la formation des dendrites équiaxes pour apporter une contribution aux phénomènes physiques responsables des différents comportements qui se produisent lors de la décomposition des solutions solides dans les alliages binaires. Et faute de moyens et parce que l'observation in situ de la solidification des matériaux opaques est très difficile, nous avons préféré recourir à la modélisation numérique. L'effort a été porté sur la formation d'une dendrite équiaxe (germination hétérogène dans le liquide) dans un alliage Al-8%Mg, dans lequel ce type de dendrites a formé une énigme, lors de notre étude des microstructures résultant des traitements thermiques et thermomécaniques des solutions solides sursaturées par trempe, pendant les années 90 du siècle dernier.

Ce travail expose un nombre de résultats de simulation qui valident les raisonnements physiques et le modèle mathématique qui en découle, pour décrire le déroulement de la solidification dendritique de l'alliage. Cette modélisation nous a permis d'approcher le phénomène à l'échelle microscopique et a beaucoup éclairci notre vision de la structure dendritique.

Cette thèse se compose de cinq chapitres :

Dans le premier chapitre nous avons rappelé les concepts de base sur la thermodynamique de la transition liquide – solide. Les équations générales du transport thermique et massique ont été soulignées.

Le deuxième chapitre a été consacré aux différents modèles analytiques établis dans la littérature, concernant l'instabilité morphologique de l'interface liquide – solide en mouvement.

Le troisième chapitre présente les différentes méthodes connues pour la modélisation numérique de la solidification dendritique des alliages binaires. Nous avons insisté sur les modèles basés sur la méthode d'Automate Cellulaire (CA) et les tentatives de correction de l'anisotropie artificielle créée par l'orientation de la grille utilisée dans cette méthode.

Dans le chapitre quatre, nous avons présenté le modèle que nous avons choisi pour la simulation de la formation et croissance d'une dendrite équiaxe dans l'alliage

Al-8%Mg. Une explication détaillée du modèle, accompagnée de sa traduction mathématique et son exécution numérique, a été exposée.

Le chapitre cinq, présente les résultats de la simulation numérique de la formation et croissance d'une dendrite équiaxe, dans l'alliage Al-8%Mg, en régime transitoire. L'établissement de l'état stationnaire ainsi que ses conséquences ont été aussi discutés.

**RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES DE L'INTRODUCTION**

**(Nebti, 1996):** D. Hamana, S. Nebti and M. Boucheur; On the Origin of the Heterogeneous Precipitation and Dissolution in Al-Mg Alloys, Z. Metallkd, Vol 87, 135-139.

**(Nebti, 1995):** S. Nebti; Comportement au Vieillissement des Alliages Al-Mg, Thèse de doctorat, Université de Constantine, Algérie.

# **CHAPITRE 1**

## **CONCEPTS DE BASE ET GENERALITES SUR LA SOLIDIFICATION DES ALLIAGES BINAIRES.**

### **I. SOLIDIFICATION D'UN ALLIAGE METALLIQUE**

#### **I.1 Définition**

La solidification est un processus dans lequel un solide croît à partir d'un liquide (ou d'un gaz). Ce changement de phase est une réaction physique qui peut se produire spontanément comme par exemple la formation du gel sur les vitres ou les flocons de neige en hiver. C'est aussi un phénomène que l'homme utilise pour donner forme à la matière. En effet, dans l'industrie, outre les procédés de fabrication des alliages, ce phénomène intervient aussi dans la croissance des cristaux (Kurz, 1984).

Les métaux et les alliages sont presque toujours obtenus à partir de leurs états liquides, car une diffusion rapide est nécessaire pour garantir une composition uniforme. Cela signifie que la compréhension de la façon dont les métaux et les alliages se solidifient est essentielle pour nous permettre d'expliquer et de contrôler les propriétés des solides formés. L'état thermodynamique le plus stable d'un alliage est représenté, à une pression donnée, par la variation de sa température en fonction de sa composition, dans un diagramme appelé diagramme de phase (ou diagramme d'équilibre). Deux types de transformations peuvent être représentés dans un diagramme de phase. La transformation liquide - solide, créant ainsi les diagrammes de solidification et les transformations à l'état solide (solide – solide) qui exigent beaucoup de matériels

sensibles et permettent de prédire les propriétés d'un alliage après un traitement thermique.

## I. 2 Transformations liquide - solide

Lorsqu'on refroidit un alliage binaire de composition initiale  $c_0$  à partir d'une température initiale  $T_0$ , sa solidification n'est pas immédiate. Au fur et à mesure du refroidissement, la température de l'alliage peut tomber de  $T_0$  à  $T_1$ , appelée température du liquidus, sans qu'il ne se produise aucun changement significatif. L'alliage est alors entièrement liquide (Fig. 1.1(a)). Les premières particules solides apparaîtront et auront une composition  $c_s$  à une température  $T_s < T < T_1$  où  $T_s$  est appelée température du solidus. L'alliage passe par un état intermédiaire où les deux phases coexistent (Fig. 1.1(b)). Cette composition  $c_s$  est différente de la composition initiale du liquide  $c_0$ , ainsi la composition du liquide à proximité immédiate du solide doit être modifiée (soit  $c_1$ ). Le solide de composition  $c_s$  est plus riche en soluté que le liquide d'origine, donc le liquide voisin doit être appauvri en soluté. Pour réaliser l'équilibre, un phénomène de diffusion ou de convection est alors nécessaire. Cependant, la variation de composition du liquide est égalisée et une nouvelle solidification peut avoir lieu.

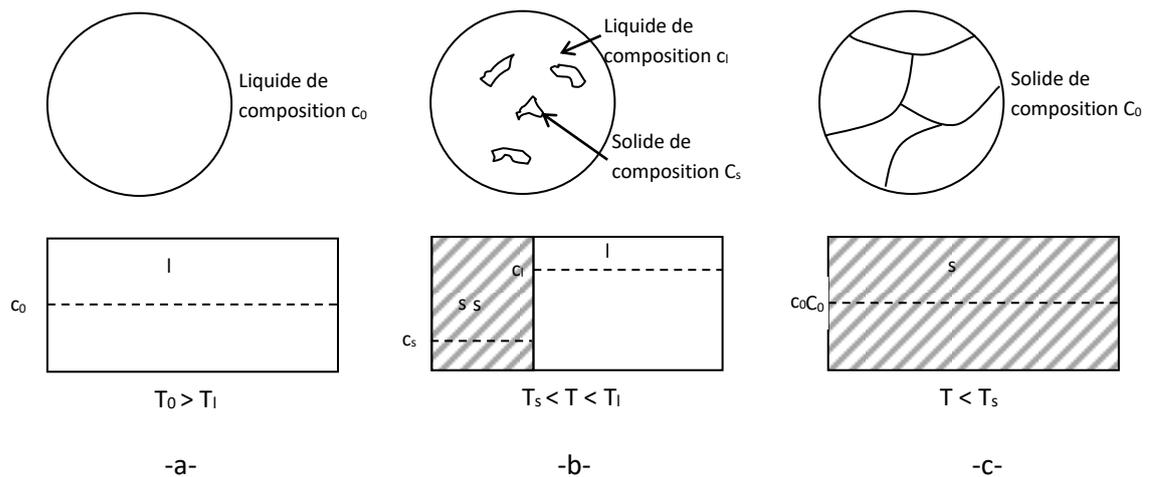


Fig. 1.1 – Evolution, à l'équilibre thermodynamique, des structures d'un alliage binaire en fonction de la température.

La composition de tout le liquide est donc modifiée et le solide, qui apparaît doit être appauvri en soluté. Au cours de la solidification, la composition du solide varie depuis  $c_s$ , à la température  $T_s$ , et lorsque le liquide atteint une température  $T < T_s$  il se solidifie complètement. Le solide obtenu aura une composition globale  $c_0$  (Fig. 1.1(c)).

## **II. SOLIDIFICATION DENDRITIQUE – CONCEPTS THERMIQUE ET MASSIQUE**

Le processus de la solidification est influencé par un grand nombre de paramètres (Kittl, 2000 ; Beckermann, 2001). Le changement de phase liquide - solide produit des modifications importantes sur les propriétés mécaniques, physiques et chimiques (Nebti, 1995 ; Lipton, 1984 ; Lipton, 1987) et la compréhension et le contrôle de ces modifications sont d'une importance capitale pour l'industrie métallurgique. L'étude de ces transformations de phase dans les métaux et les alliages se poursuit depuis plusieurs décennies. Aujourd'hui, les outils de simulation numérique sont de plus en plus utilisés pour l'optimisation de ces processus.

Il existe deux types d'approches pour le traitement de la solidification (Krüger, 1999). La première conduit à des modèles de type Stefan dans lesquels le domaine physique est composé de deux zones (la phase liquide et la phase solide) séparées par une frontière. L'évolution des grandeurs thermodynamiques est régie par une équation dans chaque phase. Le traitement de l'évolution de la frontière est basé sur la conservation de la chaleur. Comme exemple, vous pouvez consulter (Rawahi, 2002). Dans la seconde approche, le domaine physique est divisé en trois régions (une phase solide, une phase liquide et une phase mixte). Dans ce type d'approches, les chercheurs considèrent des modèles basés sur la conservation de masse et de chaleur ainsi que les équations de Navier-Stokes. Une vaste gamme de recherche peut être trouvée sur la littérature discutant ces modèles et qui sera détaillée plus loin.

### **II. 1 Thermodynamique de la solidification**

#### **II. 1. 1 Chaleur latente de fusion et température de solidification**

Pour qu'un liquide se transforme en solide l'énergie interne du liquide désordonné doit être plus élevée que celle du solide ordonné, et un dégagement (ou une absorption) de chaleur est prévisible lorsque le matériau passe d'un état à un autre. Cette chaleur est

appelée chaleur latente de fusion  $L_v$ . Une relation intéressante entre la chaleur latente et la température de solidification peut être établie en appliquant les principes élémentaires de la thermodynamique (Winegard , 1971).

La température de solidification,  $T_e$ , est définie comme étant la température à laquelle le liquide et le solide ont l'un et l'autre la même énergie disponible pour effectuer un travail extérieur, autrement dit les énergies libres des deux phases sont égales, soit :

$$G_l = G_s$$

Où  $G_l$  représente l'enthalpie libre de Gibbs du liquide et  $G_s$  est l'enthalpie libre du solide.

L'énergie libre  $G$  est définie par la relation suivante :

$$G = H - TS$$

Où  $H$  est l'enthalpie de la phase,  $T$  est la température absolue,  $S$  est l'entropie, qui est une mesure du désordre d'une phase. Par conséquent :

$$H_l - T_e S_l = H_s - T_e S_s$$

Comme

$$H_l - H_s = L_v$$

$$L_v = T_e \Delta S_f$$

Alors:

$$\Delta S_f = \frac{L_v}{T_e}$$

En conséquence, une mesure du changement d'ordonnement lorsqu'un liquide se transforme en solide peut être obtenu par le rapport de la chaleur latente sur la température de solidification.

## II.1. 2 Transfert de chaleur par conduction

Le concept de transfert de chaleur est l'une des bases de la thermodynamique. Il existe trois modes de transport de chaleur durant la solidification :

- **Par conduction** : (transfert diffusif) c'est le moyen par lequel la chaleur circule d'un corps à un autre voisin par simple interaction moléculaire,
- **par convection** : c'est l'échange de chaleur entre une surface et un fluide (liquide ou gaz) mobile à son contact,

- **par rayonnement** : (à distance) c'est une transmission provoquée par la différence de température entre deux corps sans contact physique, séparés par un milieu transparent tel que l'air ou le vide. Tous les matériaux rayonnent sans arrêt de l'énergie dans toutes les directions.

Etant donnée l'absence des deux phénomènes (convection et rayonnement), dans notre cas, nous ne nous intéresserons qu'au concept de transfert de chaleur qui se produit par conduction. La conduction thermique (ou la diffusion thermique) est provoquée par une différence de température entre deux régions d'un même milieu, ou entre deux milieux en contact sans transport macroscopique de la matière. Ce mode de transfert tend à une distribution homogène de l'énergie cinétique moyenne de diverses particules par diffusion des zones où elle est élevée (zones chaudes) vers les zones où elle est plus faible (zones froides) ; et par conséquent tend à établir un équilibre thermique du système.

Le transfert de chaleur par conduction concerne essentiellement les solides ; c'est le seul mode à exister au sein d'un solide opaque. Dans les liquides et les gazeux, il est très souvent négligeable devant les deux autres types de transport de chaleur.

La loi fondamentale de transfert de chaleur par conduction a été proposée par le mathématicien français J. B. J. Fourier en 1807-1808 (Glicksman, 2011). Pour bien comprendre cette loi, il faut définir un certain nombre de grandeurs physiques.

### II. 1. 3 Loi de Fourier

Considérons une barre métallique à l'état solide (Fig. 1.2), et le transfert de chaleur se produisant dans la direction X, à l'intérieur de la barre, à travers un petit élément parallélépipède d'épaisseur  $\Delta x$ .

D'après Fourier, la quantité de chaleur  $d^2Q$ , qui s'écoule pendant l'intervalle de temps  $dt$  à travers l'élément de surface  $ds$ , est proportionnelle à la dérivée spatiale de la température :

$$d^2Q = -K ds \frac{dT}{dx} dt$$

Où  $ds$  l'unité de surface perpendiculaire aux flux thermique,  $\frac{dT}{dx}$  le gradient de température au point  $x$  considéré, le signe (-) indique que l'écoulement de la chaleur est positif quand la température diminue avec  $x$  (le sens des températures décroissantes),  $K$

la conductivité thermique du matériau. Pour de nombreux cas pratique, lorsque les écarts de température ne sont pas très élevés, on peut considérer avec une précision suffisante  $K$  comme une constante pour un milieu donné.

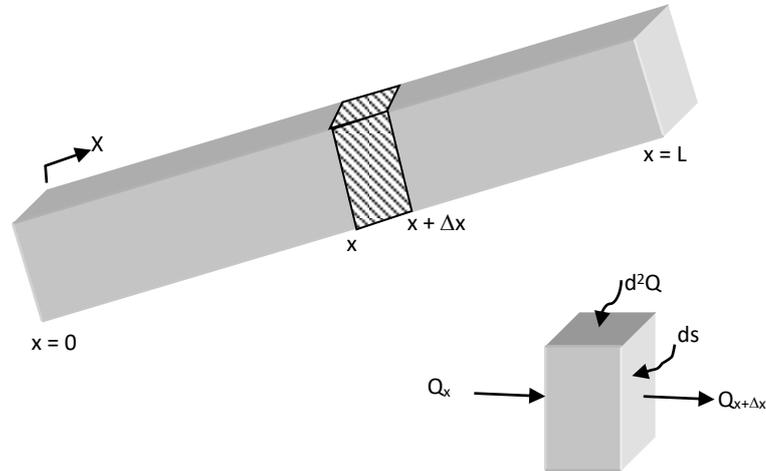


Fig. 1.2 – Conduction de chaleur à travers une barre solide (Bejan, 1993).

Cette équation peut prendre la forme générale, en considérant les trois directions X, Y et Z :

$$d^2Q = -K \overrightarrow{\text{grad}T} \cdot \overrightarrow{ds} dt$$

On peut, également, définir le flux de chaleur comme étant :

$$d\phi = \frac{d^2Q}{dt} = -K \overrightarrow{\text{grad}T} \cdot \overrightarrow{ds}$$

Ainsi que la densité de flux de chaleur, soit :

$$j_Q = \frac{d^2Q}{dt \cdot ds} = -K \overrightarrow{\text{grad}T} \cdot \vec{n}$$

D'où le vecteur de densité de flux de chaleur est :

$$\vec{j}_Q = -K \overrightarrow{\text{grad}T}$$

## II.1. 4 Equation générale de chaleur

Soit le même élément matériel, considéré précédemment et représenté sur la figure 1.2, de volume élémentaire  $d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$ . Nous allons, en s'appuyant sur la thermodynamique et la loi de Fourier, calculer la quantité de chaleur totale qui pénètre dans ce volume contenu dans une surface  $\Sigma$ .

Appliquons le premier principe de la thermodynamique au volume entre  $t$  et  $t + dt$  :

$$dU = U(t + dt) - U(t) = \delta W + \delta Q$$

Où  $\delta W$  le travail élémentaire des forces qui s'exercent sur le volume  $d\tau$ ; on considère ici que la transformation est isobare d'où  $\delta W = 0$ ,  $\delta Q$  le transfert thermique élémentaire échangé par le volume en question, avec l'extérieur et  $dU$  la variation de l'énergie interne du volume  $\tau$  entre  $t$  et  $t + dt$ . De plus :

$$U(t) = \iiint_{\tau} \rho C T(t) d\tau + f(V)$$

Où  $\rho$  la masse volumique du matériau,  $C$  la chaleur spécifique massique du matériau et  $f(V)$  une fonction de volume. Alors :

$$U(t + dt) - U(t) = \iiint_{\tau} \rho C (T(t + dt) - T(t)) d\tau = \iiint_{\tau} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} d\tau$$

On a aussi, par définition du vecteur de densité de flux de chaleur  $\vec{j}_Q$  et de la densité volumique de source de chaleur par unité de temps  $Sc$  :

$$\delta Q = - \left( \iint_{\Sigma} \vec{j}_Q \cdot \vec{ds} \right) dt + \left( \iiint_{\tau} Sc d\tau \right) dt$$

Notant pour le signe que  $\vec{j}_Q \cdot \vec{ds}$  est positif quand le flux est vers l'extérieur, la variation de chaleur est alors négative dans le volume.

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradsky, on obtient :

$$\delta Q = - \left( \iiint_{\tau} \text{div } \vec{j}_Q d\tau \right) dt + \left( \iiint_{\tau} Sc d\tau \right) dt$$

L'équation qui découle du premier principe de la thermodynamique devient alors :

$$\iiint_{\tau} \rho C \frac{\partial T}{\partial t} d\tau = - \iiint_{\tau} \text{div } \vec{j}_Q d\tau dt + \iiint_{\tau} Sc d\tau dt$$

Ceci est valable pour tout le volume  $\tau$ , donc :

$$\text{div } \vec{j}_Q = -\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + Sc$$

En utilisant la loi de Fourier et si la conductivité thermique ne dépend pas des propriétés spatiales, on obtient :

$$\frac{\rho C}{K} \frac{\partial T}{\partial t} - \text{div} (\overrightarrow{\text{grad}} T) = \frac{Sc}{K}$$

Ce qui est bien l'équation générale de la chaleur.

En posant  $\alpha = \frac{K}{\rho C}$  coefficient de diffusion et le fait que  $\text{div} (\overrightarrow{\text{grad}}) = \nabla^2 = \Delta$  (laplacien), on peut écrire l'équation de la chaleur sous la forme :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \Delta T + Sc$$

Avec

En coordonnées cartésiennes:

$$\Delta T = \nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

En coordonnées cylindriques:

$$\nabla^2 T = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

En coordonnées sphériques:

$$\nabla^2 T = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2}$$

## II. 1. 5 Condition initiale et conditions aux limites

Le traitement des problèmes de conduction spécifiques montre que la résolution de l'équation de chaleur ne suffit pas pour déterminer la distribution de température à travers le système étudié. Dans les problèmes où le champ de température est fonction du temps, en plus de connaître une forme appropriée de l'équation de conduction, le solveur de problème doit être en mesure de reconnaître la condition initiale et les conditions aux limites appropriées qui caractérisent une configuration de transfert de chaleur donnée.

La condition initiale d'un problème donné est l'énoncé, qu'au début de calcul (c'est-à-dire à  $t = 0$ ), la température est uniforme dans l'ensemble du domaine traité.

Dans le même problème, les conditions aux limites sont aussi une déclaration en ce qui concerne, en général, l'un des trois sortes :

- Température pariétale imposé (sur chaque portion de paroi)

$T = T_w$  (c'est la condition de Dirichlet).

- Flux pariétal imposé

$-K \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_w = \phi_w$  (c'est la condition de Neumann).

- Une relation reliant le flux pariétal à la température pariétale et la température extérieure par un coefficient d'échange

$-K \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_w = h(T_w - T_{ext})$  (c'est la condition de Cauchy).

## II. 2 Transfert de masse - Diffusion et transport (Philibert, 1985)

D'un point de vue phénoménologique les processus de diffusion de masse, et plus généralement de migration atomique, peuvent être abordés de deux façons :

- d'une manière assez formelle, à la façon de nombreuses lois d'écoulement en physique,
- d'une manière beaucoup mieux fondée physiquement grâce à la thermodynamique des processus irréversibles qui justifie (on précise le degré d'approximation) des expressions posées naturellement suivant la démarche.

### II. 2 .1 Flux de particules - Equation de Fick.

Plaçons-nous dans un système unidirectionnel et considérons le flux de particules d'une certaine espèce. Les particules peuvent être des molécules, des atomes ou des ions, des défauts ponctuels, des électrons libres ou des trous électroniques, etc... Soit  $c(x, t)$  leur concentration, exprimée en nombre de particules ou de moles par unité de volume. En présence d'un gradient de concentration  $\frac{\delta c}{\delta x}$ , on admet qu'il s'établit un flux de particules dans le sens descendant du gradient, et que ce flux est proportionnel au gradient correspondant :

$$J = -D_l \frac{\partial c}{\partial x}$$

Où  $D_l$  représente le coefficient de diffusion du soluté.

Le flux est exprimé en nombre de particules ou de moles traversant l'unité d'aire par unité de temps. Cette loi, dite loi de Fick, est formellement identique à la loi de Fourier pour l'écoulement de la chaleur déjà vu.

La loi de Fick se généralise sans peine à trois dimensions :

$$J = -D_l \nabla c$$

En fait l'écoulement de particules dans une direction donnée peut avoir deux origines, l'une est bien le gradient de concentration mais l'autre est l'action d'une force extérieure, ou force de transport, sous l'effet de laquelle les particules se déplacent avec une certaine vitesse moyenne  $\langle V \rangle$  donnant ainsi naissance à un flux  $\langle V \rangle c$ . D'où l'expression générale :

$$J = -D_l \frac{\partial c}{\partial x} + \langle V \rangle c$$

Nous qualifierons le premier terme du second membre de flux diffusionnel proprement dit, et le second de terme de transport. (La terminologie n'est pas fixée; on utilise indifféremment les termes transport, migration, entraînement, ou même « drift ».) Il s'agit là d'une distinction plus commode que profonde comme on le montre en thermodynamique des processus irréversibles, mais qui a l'intérêt de bien correspondre aux conditions expérimentales.

## II. 2. 2 Modèle de diffusion - Equation de Scheil-Gulliver

Les premières recherches avancées sur les flux de masse et leurs modélisations ont été formulée par le Pr. Flemings (Flemings, 1974) en vue d'obtenir une expression analytique de la fraction solide  $f_s$  en fonction de la température.

En effet, les propriétés d'un alliage peuvent dépendre fortement de la concentration du soluté qu'il contient. Le fait de pouvoir prédire quantitativement les concentrations dans le solide est souhaitable, mais une description mathématique de la solidification dans le cas général est très difficile. Les solutions peuvent être obtenues lorsque certaines hypothèses sont faites. Par exemple, on peut supposer que:

- La diffusion de soluté dans le liquide tend vers l'infini alors qu'il n'y a pas de diffusion dans la phase solide ( $D_s = 0$ ). Cela est vrai si la distance de diffusion est plus petite que la longueur de l'échantillon ( $\sqrt{D_s t} \ll L$ ).
- Equilibre à l'interface.
- La température est constante à l'interface.
- Il y a un mélange complet dans le liquide (le liquide est miscible en toutes proportions) donnant une concentration uniforme durant le procédé. Cela peut se produire en raison de la convection, on peut être aidé par un mixage mécanique.
- La solidification est irréversible.

En utilisant ces hypothèses, on peut parvenir à l'équation de Scheil-Gulliver, ou aussi appelée l'équation de Scheil, qui décrit la quantité du soluté dans le liquide et le solide en fonction de la fraction solide durant la solidification.

Supposons que nous solidifions une barre depuis son état de fonte à la concentration  $c_0$ . Il n'y a pas de diffusion dans le solide et le liquide est miscible en toutes proportions. La concentration du solide est  $kc_l$ , qui est égal à  $kc_0$  pour le premier solide formé.

$k$  étant le coefficient de partage. Il est déterminé par le diagramme d'équilibre de l'alliage. A une température donnée,  $T$ , le coefficient de partition,  $k$ , est le rapport des pentes des liquidus et solidus. Il exprime le rapport entre les concentrations en phases solide et liquide pour une température donnée.

$$k = \left( \frac{c_s}{c_l} \right)_{P,T}$$

Ainsi, même si les courbes de liquidus et solidus ne sont pas des droites (des courbes), cette relation reste valable. On peut alors exprimer le coefficient de partition en fonction de la température.

$$k(T) = \frac{c_s(T)}{c_l(T)}$$

La conservation de masse impose que  $c_0 = f_s c_s + f_l c_l = \text{constante}$

Soit  $dc_0 = df_s c_s + f_s dc_s + df_l c_l + f_l dc_l = 0$ .

Par hypothèse  $dc_s = 0$  et  $f_s + f_l = 1 \Rightarrow df_s + df_l = 0$ .

Donc

$$(c_l^* - c_s^*) df_s = (1 - f_s) dc_l$$

La répartition de soluté dans le liquide nous permet de schématiser deux instants successifs (Fig. 1.3) et d'observer que les deux aires des rectangles doivent être égales.

En considérant l'hypothèse de linéarisation des liquidus et solidus tel que  $c_s = k c_l$  et en plus, vous avons toujours  $f_s + f_l = 1$ . Ainsi l'expression précédente devient :

$$(1 - k) c_l df_s = (1 - f_s) dc_l$$

La solution de cette équation nous donne l'équation de Scheil pour un profil de soluté dans la barre complètement solidifiée :

$$c_s = k c_0 (1 - f_s)^{k-1}$$

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

$$c_s^* = k c_0 (1 - f_s)^{k-1}$$

L'équation de Scheil prévoit un profil avec une concentration qui tend vers l'infini à l'extrémité de la barre, mais il y aura une limite supérieure de la concentration du solide formé. Dans le cas où les deux éléments A et B forment une solution solide complète à travers un intervalle de composition, le liquide, à un certain point, atteindra une concentration de 100%B. par conséquent, il sera solidifié en tant que B pur. Une forme

alternative se présente dans un système eutectique binaire A-B, où un solide eutectique se formera quand la concentration du liquide atteint la composition eutectique.

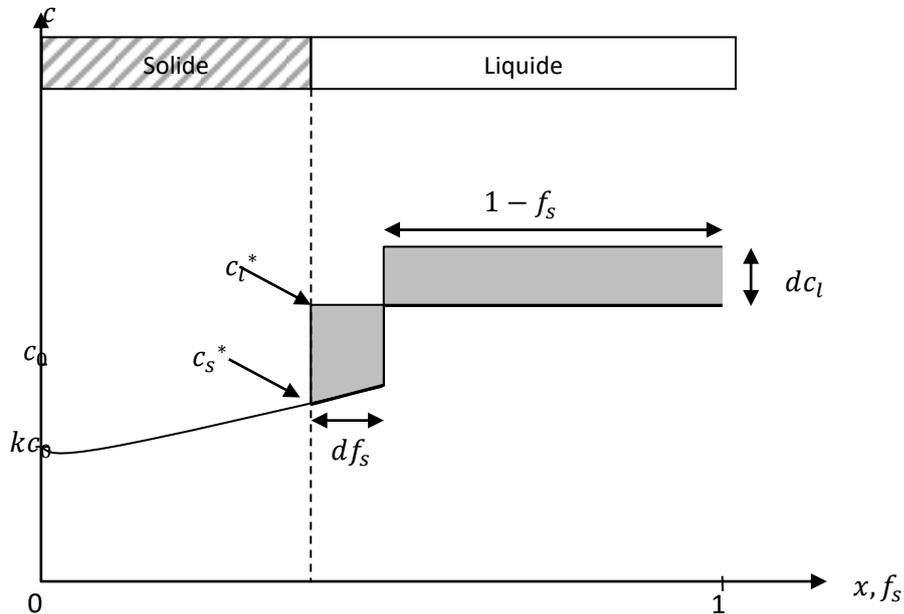


Fig. 1.3 – Profil du soluté dans une barre selon l'équation de Scheil.

### III. PHENOMENES PHYSIQUES LIES A LA SOLIDIFICATION

D'un point de vue physique, la solidification débute par l'apparition d'un germe solide dans le liquide. Ce germe solide peut se former directement dans le liquide; c'est le cas de la germination homogène, ce type de germination n'existe pas dans la réalité. En effet, dans la pratique, le germe solide peut être introduit sous forme d'impuretés dans le liquide. C'est le cas de la germination hétérogène et la structure solide formée croît sous une forme particulière appelée structure dendritique équiaxe.

#### III. 1 Force motrice

La force motrice d'une transformation de phase quelconque est le changement de l'énergie libre accompagnant cette transformation. L'énergie libre de Helmholtz d'une substance est:

$$F = E + PV - TS$$

Où  $E$  est l'énergie interne ;  $c$ 'est le travail nécessaire pour déplacer un atome de la phase vers l'infini,  $P$  est la pression,  $V$  est le volume et  $S$  est l'entropie ;  $c$ 'est la mesure de désordre d'arrangement des atomes dans la phase.

Pour un métal pur et une pression constante, l'équation devient  $G = H - TS$ . C'est l'équation de l'enthalpie libre de Gibbs, où  $H = E + PV$  est l'enthalpie.

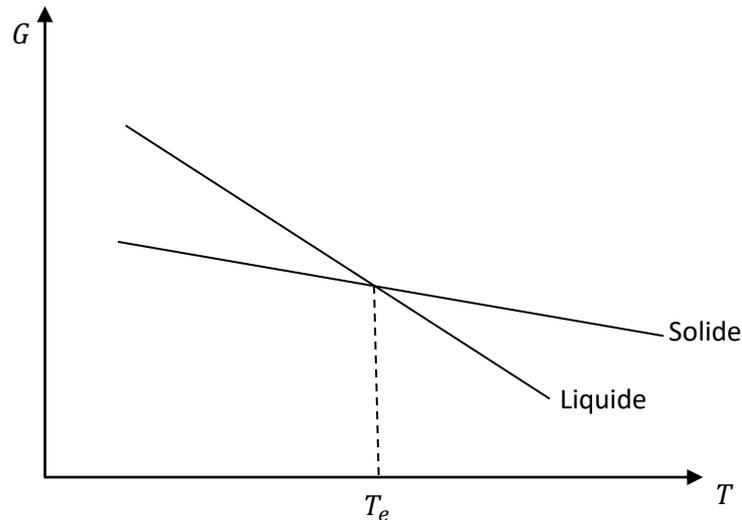


Fig. 1.4 – Variation de l'enthalpie libre des phases liquide et solide d'un métal pur en fonction de la température.

Sur la figure 1.4 on schématise la variation de l'enthalpie libre des phases liquide et solide en fonction de la température. L'intersection des deux lignes se fait à une température unique, à laquelle les deux phases liquide et solide ont la même enthalpie libre, appelée température d'équilibre  $T_e$ , ainsi aucune transformation peut avoir lieu et les deux phases coexistent en équilibre. Pour qu'une transformation liquide solide se manifeste la température de l'interface liquide - solide  $T^*$  doit être inférieure à la température d'équilibre.

Rappelons la condition d'équilibre  $G_l = G_s$  qui donne :

$$\Delta G_v = G_l - G_s = (H_l - H_s) - T_e(S_l - S_s) = 0$$

Alors, le changement d'enthalpie libre au cours de la solidification est composé de deux termes : le premier est la variation de l'enthalpie lors de la fusion  $L_v = H_l - H_s$  ; c'est-à-dire la chaleur latente, et le deuxième terme est la variation de l'énergie associée au changement d'entropie au cours de la fusion ( $\Delta S_f = S_l - S_s$ ), donc :

$$\Delta G_v = L_v - T_e \Delta S_f = 0$$

$$L_v = T_e \Delta S_f$$

Ou

$$\Delta S_f = \frac{L_v}{T_e}$$

Pour toute température  $T < T_e$

$$\Delta G_v = L_v - T_e \frac{L_v}{T} = L_v \frac{T - T_e}{T} = \Delta S_f \cdot \Delta T$$

Où  $\Delta T$  est la surfusion à laquelle une transformation liquide solide peut avoir lieu. Elle est donc égale à :

$$\Delta T = \frac{\Delta G_v}{\Delta S_f}$$

La force motrice est, par conséquent, proportionnelle à la surfusion qui est nécessaire pour que la solidification se produit. Notant que pour  $\Delta T = 0$  et  $\Delta G_v = 0$  le système est à l'équilibre et aucune transformation peut exister.

### III. 2 Surfusion

Bien qu'il soit exact, comme cela a été affirmé, qu'il n'y a qu'une température d'équilibre ou température thermodynamique de solidification, on observe souvent expérimentalement que les métaux liquides ont tendance à être en surfusion, et que la solidification commence à une température qui est inférieure à celle admise comme température de solidification. Ce phénomène est illustré sur la figure 1.5 (a), qui donne la courbe de refroidissement d'une masse liquide en indiquant la variation de la température avec le temps (Winegard, 1971). Lorsque la température du liquide est inférieure à la température de solidification, le liquide est dit en surfusion. Lorsque la solidification commence, la température du liquide restant augmente rapidement jusqu'à la température normale de la solidification, à cause de la chaleur latente qui se dégage, s'il y a assez de métal dans le système.

Lorsque une petite quantité seulement de métal est présente, la chaleur latente disponible peut ne pas être suffisante pour élever la température du bain jusqu'à la température d'équilibre pour la solidification. Dans un tel cas, la courbe de refroidissement se présente comme celle indiquée sur la figure 1.5(b).

S'il n'y avait pas de surfusion, c'est-à-dire pas de retard à la germination, la courbe de refroidissement serait similaire à celle indiquée sur la figure 1.5(c).

Tous les métaux appartiennent à un système cristallin et présentent des courbes de refroidissement du genre de celles des figures 1.5(a), (b) ou (c). Quelques matériaux, cependant, ne forment pas de solides cristallins, mais se solidifient sous forme d'un solide amorphe qui a une structure similaire à celle d'un liquide en surfusion. Puisqu'il n'y a pas réellement de changement d'ordonnement des atomes, il n'y a pas de dégagement de chaleur et la courbe de refroidissement est du genre de celle indiquée sur la figure 1.5(d).

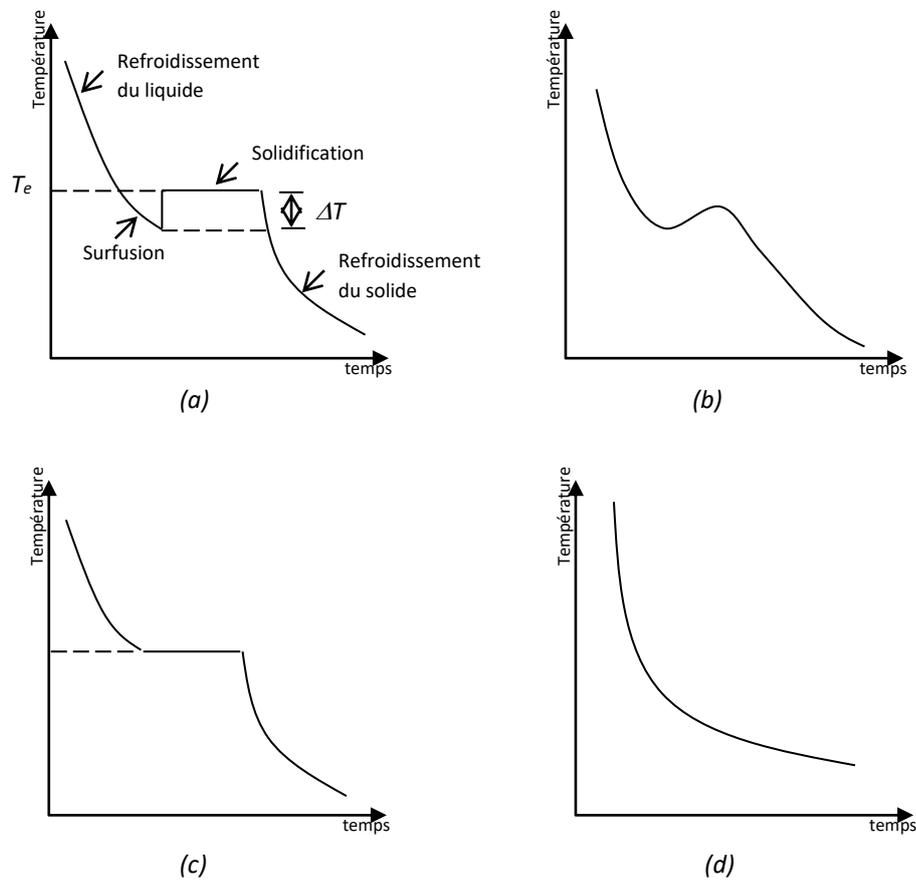


Fig. 1.5 – Courbes de refroidissement pour un métal pur qui subit le phénomène de surfusion (a), un métal pur qui subit la surfusion mais où la température ne remonte pas jusqu'à la température d'équilibre pour la solidification (b), un métal pur qui ne présente pas de surfusion(c) ou un corps amorphe (d).

Dans les métaux purs, la surfusion totale  $\Delta T$ , peut être définie, approximativement, égale à la surfusion thermique. Dans le cas des alliages, la situation est plus compliquée,

dans ce cas  $\Delta T$  peut être exprimée comme somme de différentes surfusions intervenant à l'interface liquide– solide.

$$\Delta T = \Delta T_K + \Delta T_T + \Delta T_C + \Delta T_R$$

Où  $\Delta T_K$  est la surfusion cinétique d'attachement des atomes,  $\Delta T_T$  la surfusion thermique,  $\Delta T_C$  la surfusion chimique ou constitutionnelle et  $\Delta T_R$  la surfusion de courbure.

Dans le cas de l'absence de convection, la surfusion cinétique peut être négligée et la surfusion totale devient alors (Fig. 1.6) :

$$\Delta T = \Delta T_T + \Delta T_C + \Delta T_R$$

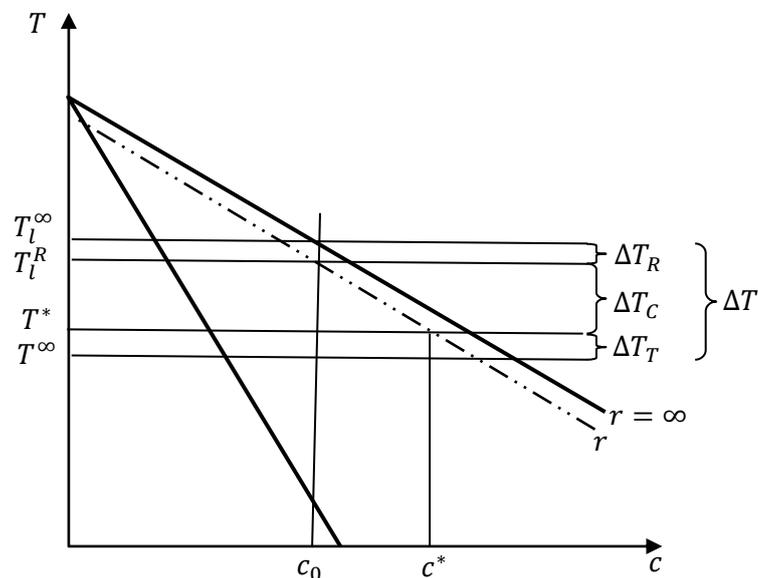


Fig. 1.6 – Illustration des différentes contributions qui constituent la surfusion à l'interface liquide– solide à partir du diagramme de phase.

### III. 2. 1 Surfusion thermique

La surfusion thermique,  $\Delta T_T$ , est l'écart entre la température d'interface  $T^*$  et la température  $T^\infty$  à laquelle le phénomène de diffusion thermique cesse d'être prédominant (loin de l'interface). Elle est due, principalement, au rejet de la chaleur latente, c'est-à-dire à l'existence d'un gradient thermique négatif dans le liquide.

$$\Delta T_T = T^* - T^\infty$$

### III. 2. 2 Surfusion chimique (ou constitutionnelle)

La contribution de la surfusion chimique apparaît que dans le cas des alliages. En effet, l'existence d'un gradient solutal, c'est-à-dire la différence de compositions entre les

phases solide et liquide, du au rejet de soluté en avant de l'interface introduit un changement de l'énergie libre qui correspond au phénomène de la surfusion chimique.

$$\Delta T_C = T_l^R - T^* = -m(c_i - c_0)$$

Où  $T_l^R$  est la température du liquide à la courbure d'interface et  $c_i$  la composition du liquide à l'interface.

### III. 2. 3 Surfusion de courbure

Lorsque l'interface présente une courbure, il est nécessaire de fournir un travail supplémentaire pour attacher les atomes à l'interface, ce qui mène à la diminution de température. La différence entre la température du liquide à l'interface  $T_l^\infty$  et la température du liquide à la courbure  $T_l^R$  constitue la surfusion de courbure.

$$\Delta T_R = T_l^\infty - T_l^R$$

## III. 3 Germination

### III. 3. 1 Germination homogène

Pour ce type de germination, il est important d'indiquer que le métal doit être isotrope à des très petites échelles. Plusieurs expériences et modèles (Kurz, 1984) ont montré que la germination nécessite une certaine force motrice appelée énergie d'activation et des fluctuations thermiques, c'est-à-dire que la formation d'un germe solide se fait à une température inférieure à la température d'équilibre. Cette différence de température est appelée surfusion de germination,  $\Delta T_{nucl}$ . En effet, la germination est un phénomène d'hors équilibre, elle commence à quelques degrés de la surfusion de germination entraînant une variation d'enthalpie libre du système. En fait, au dessus de la température de fusion, le solide a une enthalpie libre molaire plus basse que le liquide et il aurait donc une force motrice pour se former. Ce changement d'enthalpie libre est donné par :

$$\Delta G = \Delta G_V + \Delta G_S + \Delta G_d$$

Où  $\Delta G_V$  est la variation d'enthalpie libre volumique, c'est le gain d'énergie libre due à la formation d'un volume de phase plus stable,  $\Delta G_v$ , multiplié par le volume.

$$\Delta G_V = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v$$

Où  $r$  est le rayon du germe sphérique.

$\Delta G_S$  est la variation de l'enthalpie libre superficielle, c'est la perte d'énergie libre due à la création d'une surface supplémentaire. Elle vaut à l'énergie spécifique interfaciale  $\gamma$  multipliée par la surface.

$$\Delta G_S = 4\pi r^2 \gamma$$

$\Delta G_d$  est la variation de l'enthalpie libre de déformation. En première approximation, ce terme est négligeable vu sa faible contribution au premier stade de la germination.

La variation totale de l'enthalpie libre due à la création du germe est, alors, la sommation des deux énergies : l'énergie libre volumique et l'énergie libre interfaciale.

$$\Delta G = \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \gamma$$

La figure 1.7 présente la courbe obtenue de cette équation.

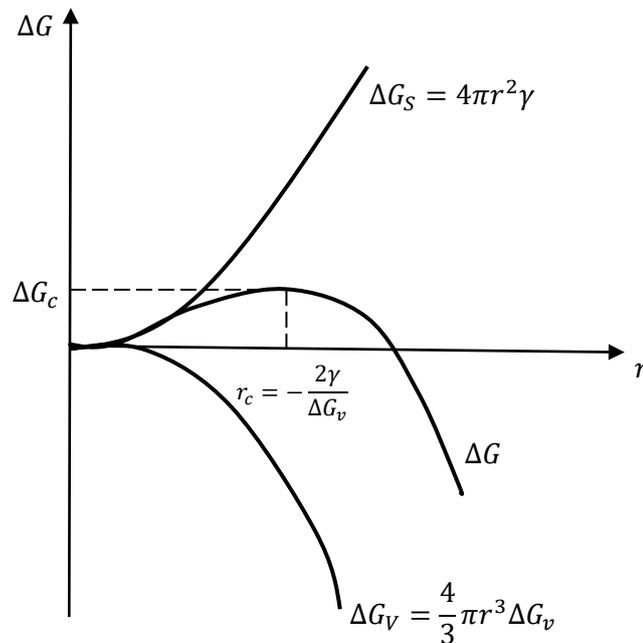


Fig. 1.7 – Variation de  $\Delta G$  en fonction de  $r$ .

On constate que  $\Delta G$  passe par un maximum,  $\Delta G_c$ , et ainsi l'existence d'une barrière d'énergie correspondant à un rayon critique,  $r_c$ , pour qu'un germe solide soit stable dans le liquide (Cantor, 2003). Elle est déterminée par la condition :

$$\frac{d\Delta G}{dr} = \Delta G_c = 4\pi r^2 \Delta G_v + 8\pi r \gamma = 0$$

D'où

$$r_c = -\frac{2\gamma}{\Delta G_v}$$

Si la particule se forme avec un rayon  $r > r_c$ , cela implique une diminution de  $\Delta G$  et, ainsi, le germe formé est stable et peut continuer sa croissance. Par contre, si la particule se forme avec un rayon  $r < r_c$ , on obtient une augmentation de  $\Delta G$ , dans ce cas le germe est instable et il a tendance à disparaître.

Egalement, en insérant l'expression de  $r_c$ , on peut trouver l'énergie d'activation  $\Delta G_c$ .

$$\Delta G_c = \frac{4}{3}\pi\gamma r_c^2$$

Le nombre de germes stables formés,  $n_r$ , par unités de temps et de volume, c'est-à-dire les germes pour lesquels  $r \geq r_c$ , soit  $\Delta G \geq \Delta G_c$ , sera déterminé à l'aide de la distribution de Boltzmann (Clouet, 2009).

$$n_r = n_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_c}{k_B T}\right)$$

Où  $n_0$  est le nombre total d'atomes dans le système (sites de germination), le deuxième terme correspond à l'activation thermique à fournir pour franchir la barrière  $\Delta G_c$ ,  $k_B$  est la constante de Boltzmann tel que  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$  (Déry, 2001).

Le taux de germination,  $I$ , par unités de temps et de volume, à une température donnée, est obtenu de la dérivée de la distribution de Boltzmann et peut être exprimé à l'aide d'une équation de type Arrheniust (Mullin, 2001) :

$$I = \frac{dn_r}{dt} = I_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_c}{k_B T}\right)$$

Où  $I_0$  est un préfacteur cinétique.

### III. 3. 2 Germination hétérogène

Dans le cas de la germination homogène, nous admettons une homogénéité structurale parfaite du réseau. Les germes solides se forment spontanément au sein de la phase liquide. Par contre, dans le cas de la germination hétérogène, elle se fera préférentiellement sur les défauts (Pokorny, 1994). Les germes solides se créent au contact de la paroi froide de la lingotière ou de particules étrangères, ajoutées volontairement, baignant dans le liquide pour accélérer le processus de germination et rendre l'alliage plus résistant et plus dur. Ces impuretés améliorent les caractéristiques

de l'alliage formé car elles provoquent une formation plus élevée, et en plusieurs endroits, de germes qui eux donneront naissance aux grains.

Dans le cas de la germination hétérogène, on a une diminution remarquable de l'énergie libre par rapport à la germination homogène, mais la forme générale des équations reste valable avec une correction sur la valeur de l'enthalpie libre critique de formation du germe sphérique. Cette nouvelle enthalpie libre,  $\Delta G_{het}$ , correspond à la formation de calotte sphérique, de rayon  $r$ , complètement mouillée par le métal liquide (Smallman, 1999).

$$\Delta G_{het} = \Delta G_c \cdot f(\theta)$$

Où  $f(\theta)$  est une fonction de l'angle de contact  $\theta$  entre le germe solide et le moule (Fig. 1.8) qui est déterminée par la condition d'équilibre mécanique pour la tension superficielle (Biloni, 1996), avec :

$$f(\theta) = \frac{1}{4} (1 - \cos \theta)^2 (2 + \cos \theta)$$

$$\gamma_{ML} = \gamma_{SM} + \gamma_{SL} \cos \theta$$

$$\text{Ou encore } \cos \theta = \frac{\gamma_{ML} - \gamma_{SM}}{\gamma_{SL}}$$

Où  $\gamma_{ML}$  est la tension superficielle entre le moule et le liquide,  $\gamma_{SM}$  la tension superficielle entre le solide et le moule et  $\gamma_{SL}$  la tension superficielle entre le solide et le liquide.

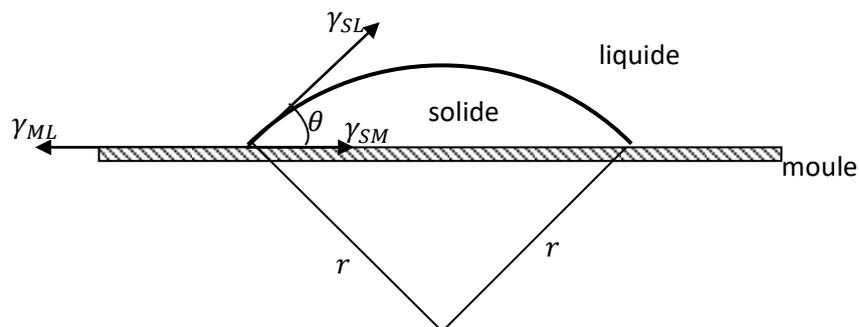


Fig. 1.8 – Représentation des différentes tensions de surface nécessaires pour le calcul de l'angle de contact  $\theta$ .

### III. 4 Croissance

Ce sont les germes solides créés au cours du processus de germination qui vont croître créant, ainsi, une surface de séparation entre la phase liquide et la phase solide (interface). L'existence des gradients thermiques (cas d'un métal pur) et solutal (pour les alliages) provoque une déstabilisation de l'interface, d'où la création de formes diverses.

### IV. MICROSTRUCTURES FINALES DE SOLIDIFICATION

La microstructure de solidification résulte d'une déstabilisation morphologique de l'interface liquide - solide dont l'origine est thermique et constitutionnelle pour un alliage. On peut observer trois différentes morphologies de l'interface (Fig. 1.9) selon les diverses vitesses de solidification : à faible vitesse, la croissance se produit dans une direction qui est parallèle, et opposée, à la direction du flux de chaleur et l'interface est dite plane. Si, par contre, on augmente la vitesse au-delà d'une vitesse critique  $V_c$ , une instabilité locale de l'interface se développe donnant naissance à des microstructures cellulaires puis dendritiques. En fonderie industrielle, où l'on utilise de grandes vitesses, ce sont les microstructures dendritiques qui sont observées.

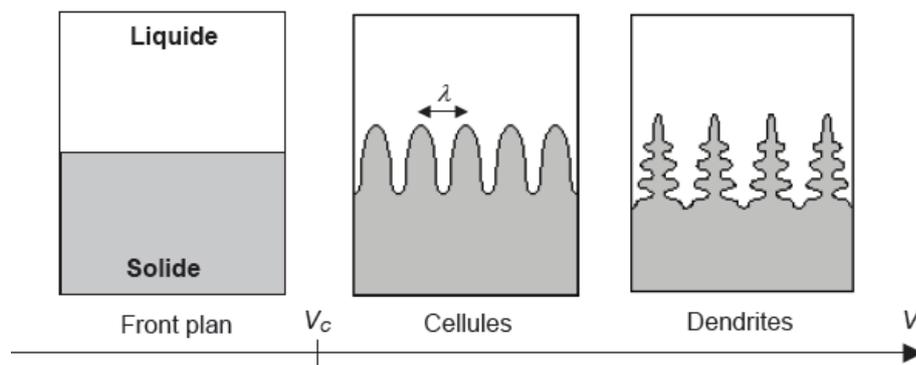


Fig. 1.9 – Différentes morphologies de croissance.

Les dendrites présentent un tronc avec des branches (bras) primaires, caractérisées par l'espacement primaire  $\lambda_1$  et des branches secondaires, caractérisées par l'espacement secondaire  $\lambda_2$ . L'autre grandeur caractéristique qui définit une microstructure

dendritique est le rayon de courbure de la pointe  $R$  et l'angle d'orientation  $\theta$  par rapport au gradient thermique  $G$  (Fig. 1.10).

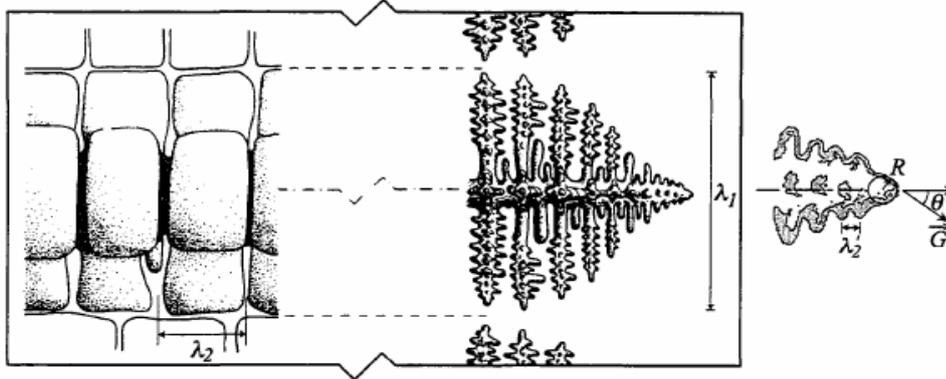


Fig. 1.10 – Grandeurs principales caractéristiques d'une dendrite : espacement primaire  $\lambda_1$ , espacement secondaire initial  $\lambda'_2$  et final  $\lambda_2$ , rayon de la pointe  $R$  et l'angle d'orientation  $\theta$  par rapport au gradient thermique  $G$  (Robin, 2012).

On peut distinguer deux modes de croissance dendritique : la croissance colonnaire (solidification dirigée) et la croissance équiaxe (solidification libre).

## V. CROISSANCE DENDRITIQUE EQUIAXE

Ce processus de solidification est observable au sein d'un liquide surfondu. Au début, il se forme un germe solide sphérique qui devient instable pour résulter d'une structure dendritique équiaxe. La direction de l'écoulement de la chaleur latente, dissipée à travers le liquide environnant en avant de la dendrite, est la même direction de la croissance (le gradient de température est dirigé de la phase liquide à la phase solide). Une forme d'une dendrite équiaxe est représentée dans la figure 1.11.

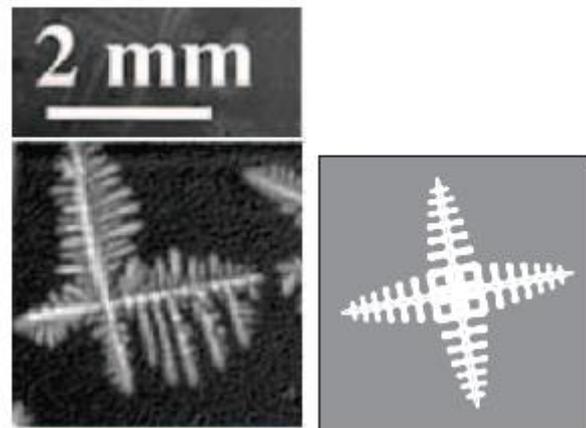


Fig. 1.11 – Observation expérimentale et représentation schématique d’une dendrite équiaxe (alliage : Al – 10%Cu) (Rivaux, 2011).

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 1

**(Robin, 2012):** V. Robin; De la Modélisation Numérique des Procédés et du Soudage en Particulier au Comportement Mécanique des Assemblages, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne.

**(Glicksman, 2011):** M. E. Glicksman; Principles of Solidification – An Introduction to Modern Casting and Crystal Growth Concepts, Springer Science+ Business Media, LLC.

**(Rivaux, 2011):** B. Rivaux ; Simulation 3D Eléments Finis des Macroségrégations en Peau Induites par Déformations Thermomécaniques lors de la Solidification d'Alliages Métalliques, Thèse de doctorat, Ecole nationale supérieure des mines de Paris.

**(Clouet, 2009):** E. Clouet; Modeling of Nucleation Processus, ASM Handbook, Vol. 22A, Fundamentals of Modeling for Metals Processing, D. U. Furrer and S. L. Semiatin (Eds), pp 203-219.

**(Cantor, 2003):** B. Cantor ; Heterogeneous Nucleation and Adsorption, JSTOR, Vol. 361, pp. 409-417.

**(Rawahi, 2002):** N. Al-Rawahi and G. Tryggvason; Numerical Simulation of Dendritic Solidification with Convection: Two-Dimensional Geometry, Journal of Computational Physics, Vol. 180; pp. 471-496.

**(Beckermann, 2001):** C. Beckermann, Q. Li, X. Tong; Microstructure Evolution in Equiaxed Dendritic growth, Science and Technology of Advanced Materials, Vol. 2, pp. 117-126.

**(Déry, 2001):** P. Déry; Etude de la Croissance des Grains à l'Aide d'un Appareil de Mesure Electrique, Mémoire pour la maîtrise en ingénierie, Université du Québec.

**(Mullin, 2001):** J. W. Mullin; Crystallization, Fourth Edition, Butterworth-Heinemann, Oxford.

**(Kittl, 2000):** J. A. Kittl, P. G. Sanders, M. J. Aziz, D. P. Brunco and M. O. Thompson; Complete Experimental Test of Kinetic Models for Rapid Alloy Solidification, Acta materialia, Vol. 48, pp. 4797-4811.

**(Krüger, 1999):** O. Krüger; Modélisation et Analyse Numérique de Problème de Réaction-Diffusion Provenant de la Solidification d'Alliages Binaires, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne.

**(Smallman, 1999):** R. E. Smallman and R. J. Bishop; Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering, 6th ed, Butterworth-Heinemann, Oxford.

**(Biloni, 1996):** H. Biloni and W. J. Boettinger; Solidification, R. W. Cahn and P. Haasen eds, Physical Metallurgy, fourth, revised and enhanced edition, Elsevier Science BV.

**(Nebti, 1995):** S. Nebti; Comportement au Vieillissement des Alliages Al-Mg, Thèse de doctorat, Université de Constantine.

**(Pokorny, 1994):** J. Pokorny et A. Pokorny; Métallographie, Technique de l'ingénieur, Métallurgie, M90 et M92.

**(Bejan, 1993):** A. Bejan ; Heat Transfer, John Wiley & Sons, Inc, New York.

**(Lipton, 1987):** J. Lipton, M. E. Glicksman, W. Kurz ; Equiaxed Dendrite Growth in Alloys at Small Supercooling, Metallurgical Transactions A, Vol. 18, pp. 341-345.

**(Philibert, 1985):** J. Philibert; Diffusion et Transport de Matière dans les Solides, Monographie de Physique, Éd de Physique.

**(Kurz, 1984):** W. Kurz, D. J. Fisher; Fundamentals of Solidification, Trans Tech Publications.

**(Lipton, 1984):** J. Lipton, M. E. Glicksman, W. Kurz ; Dendritic Growth into Undercooled Alloy Melts, Materials Science and Engineering, Vol. 65, pp. 57-63.

**(Flemings, 1974):** M. C. Flemings; Solidification Processing, New York : Mc Graw-Hill.

**(Winegard, 1971):** W. C. Winegard ; Introduction à la solidification des métaux, Dunod, Paris.

## CHAPITRE 2

# THEORIES ANALYTIQUES DE LA CROISSANCE DENDRITIQUE

### I. EQUATIONS DE BASE

En absence des gradients de température et de concentration, l'alliage est défini en état d'équilibre. En réalité, bien sur, le processus de solidification ne peut pas se produire à l'équilibre et l'existence d'une différence de température est nécessaire pour débiter la solidification.

La modélisation de la solidification dendritique est basée sur la résolution d'un système d'équations différentielles qui expriment l'évolution des champs de température et de concentration dans chaque phase. Nous considérons que notre alliage est dilué (la concentration de soluté est faible) de concentration  $c_0$ . Lors de la croissance, il y a un rejet de chaleur latente et de soluté à l'interface dans le liquide, ce qui entraîne un phénomène de diffusion dans le liquide. La modélisation est généralement établie en considérant les hypothèses suivantes :

- l'interface liquide - solide est à l'équilibre thermodynamique local et les effets cinétiques sont négligés. Cette approximation est importante pour la plupart des alliages se solidifiant sans convection.
- la diffusion de soluté dans le solide est négligée devant celle dans le liquide. Le champ de concentration est ainsi figé dans le solide ce qui indique une dynamique de diffusion-advection de la concentration dans la phase liquide.
- La diffusion de chaleur est très rapide comparée à la diffusion de soluté.

## I.1 Equation de Gibbs-Thomson

La première hypothèse nous permet de préciser l'état thermodynamique à l'interface par l'équation de Gibbs-Thomson. Elle est appelée condition de l'équilibre local :

$$T^* = T_f - m(c^* - c_0) - \frac{\gamma T_f}{L_v} \kappa$$

Cette équation décrit l'écart de la température de l'interface  $T^*$  à la température de fusion  $T_f$  du corps pur. Cette différence est due à la présence de soluté ( $mc^*$ ) et à la courbure de l'interface  $\left(\frac{\gamma T_f}{L_v} \kappa\right)$  où  $\frac{\gamma}{L_v} = \Gamma$  le coefficient de Gibbs-Thomson. La courbure  $\kappa$  est considérée positive lorsque le centre de la courbure est dans le solide.

Il est habituel d'introduire une échelle de température, ainsi deux longueurs caractéristiques apparaissent la longueur thermique  $l_T = \frac{\Delta T}{G} = \frac{1-k}{k} \frac{mc_0}{G}$  et la longueur capillaire  $d = \frac{\gamma T_f}{L_v \Delta T} = \frac{k}{1-k} \frac{\gamma T_f}{mc_0 L_v}$ .

L'écart à l'équilibre thermodynamique est modélisé en introduisant un terme supplémentaire qui symbolise la surfusion cinétique  $\left(\frac{V_i \cdot n}{\mu}\right)$  à l'équation de Gibbs-Thomson où  $\mu$  représente le coefficient cinétique.

$$T^* = T_f - m(c^* - c_0) - \frac{\gamma T_f}{L} \kappa - \frac{V_i \cdot n}{\mu}$$

## I.2 Conditions aux limites

Les équations précédentes sont complétées par deux conditions aux limites à l'interface et à l'infini (loin de l'interface).

$$c_0 = kc^*$$

$$c(z \rightarrow \infty, t) = c_0$$

## I.3 Effet capillaire

### I. 3. 1 Courbure de l'interface

En général, la solidification débute à un point donné (sur le germe) dans le liquide. Pour l'évaluation de la force motrice, on a assumé que l'interface liquide - solide est plane, ce qui contredit la réalité. En effet, si la solidification débute avec la présence d'un germe solide dans le liquide, ce germe est une particule sphérique qui croît dans le liquide. Une nouvelle enthalpie libre  $\Delta G_r$ , associée à la nouvelle interface, différente de  $\Delta G_v$ , doit être

considérée. Elle résulte de la nouvelle interface, elle est fonction de la courbure de l'interface et de la tension de surface.

La tension de surface est définie, à 2D, comme la force qu'il faut appliquer à l'unité de longueur, le long d'une ligne perpendiculaire à la surface d'un liquide, pour provoquer la transformation de phase et le déplacement de l'interface.

Selon le théorème de Laplace (Dubrovskii, 2014), il existe une différence de pression,  $\Delta P$ , entre le liquide et le solide, tel que :

$$\Delta P = P_{\text{int}} - P_{\text{ext}} = \gamma \kappa$$

Où  $\kappa$  est la courbure moyenne de la surface et  $\sigma$  est le coefficient de tension de surface.

Sachant que (Kurz, 1984) :

$$\Delta G_r = V_m \Delta P$$

Où  $V_m$  est le volume molaire, supposé constant.

Ceci nous permet d'obtenir :

$$T_1^\infty - T_1|_R = \Delta T_R = \Gamma \kappa$$

On peut aussi écrire :

$$\Gamma = \frac{\gamma V_m}{\Delta S_f} = \frac{\gamma}{\Delta S_f}$$

A deux dimensions, la courbure d'une fonction est définie comme étant le changement de la pente  $\delta\theta$  de cette fonction le long de la longueur de son arc (Kurz, 1984 ; Stefanescu, 2009)  $\delta l$  (Fig. 2.1).

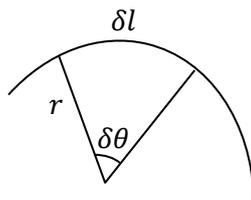


Fig. 2.1 – Définition d'une courbure pour 2D.

$$\kappa = \frac{\delta\theta}{\delta l}$$

Comme  $\delta l = r\delta\theta$ , on obtient

$$\kappa = \frac{1}{r}$$

### I. 3. 2 Anisotropie de la tension de surface

Lors de la solidification de cristaux métalliques, certaines propriétés importantes de l'interface liquide - solide se révèlent anisotropes. La prise en compte de l'anisotropie est donc essentielle pour la compréhension de la croissance dendritique surtout qu'elle est responsable de l'existence des dendrites.

L'anisotropie cristalline est tenue en compte au niveau de l'équation de Gibbs-Thomson. On distingue deux effets : l'un sur la tension de surface  $\gamma$  (anisotropie de tension de surface ou anisotropie capillaire) et l'autre sur le coefficient cinétique  $\mu$  (anisotropie cinétique). Les deux grandeurs anisotropes coexistent au sein des matériaux et dépendent de l'orientation de la normale  $n$  à l'interface par rapport au réseau cristallin. Comme l'anisotropie cinétique est négligeable pour les cas de solidification se produisant sans convection, nous ne nous intéresserons qu'à la contribution de l'anisotropie de la tension de surface. Cette anisotropie a été décrite comme étant une perturbation sinusoïdale qui se transmet parallèlement à l'interface liquide - solide et dont les pics croissent dans une direction faisant un angle par rapport à la direction normale à l'interface.

Pour un métal, à 2D et par la considération de la symétrie liée à la géométrie d'un réseau carré, la tension de surface est connue par la relation (Deschamps, 2007) :

$$\gamma(n) = \gamma'_0 [1 + \varepsilon'(n_x^4 + n_y^4)]$$

Où  $n_x$  et  $n_y$  sont les composantes dans la base  $(x, y)$  de la normale  $n$  à l'interface,  $\gamma'_0$  la tension de surface moyenne et  $\varepsilon'$  le facteur d'anisotropie de la tension de surface ( $\varepsilon' > 0$ ).

On note  $\theta$  l'angle entre la normale  $n$  et la direction  $X$ , avec  $n \cdot x = \cos \theta$ . On obtient alors :

$$\gamma(\theta) = \gamma_0 [1 + \varepsilon \cos m\theta]$$

Avec

$$\gamma_0 = \gamma'_0 \left(1 + \frac{3\varepsilon'}{4}\right)$$

et

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon'}{4 + 3\varepsilon'}$$

$m$  détermine le mode de symétrie de l'anisotropie, il est défini dans le domaine  $0 \leq \varepsilon(m^2 - 1) < 1$ . Pour les métaux ayant une structure cristallographique cubique,

l'anisotropie de l'énergie de surface présente une symétrie d'ordre 4 ( $m = 4$ ), ce qui donne :

$$\gamma(\theta) = \gamma_0(1 + \varepsilon \cos 4\theta)$$

La contribution dans l'équation de Gibbs-Thomson se fait en remplaçant la tension de surface  $\gamma(\theta)$  par la raideur de surface  $\sigma(\theta)$  qui s'écrit

$$\sigma(\theta) = \gamma(\theta) + \frac{\partial^2 \gamma(\theta)}{\partial \theta^2} = \gamma_0(1 - \delta \cos 4\theta)$$

Où  $\delta = 15\varepsilon$  le coefficient d'anisotropie ( $0 \leq \delta < 1$ ).

## II. INSTABILITE MORPHOLOGIQUE DE L'INTERFACE LIQUIDE – SOLIDE

### II. 1 Instabilité thermique

Pour qu'il y ait croissance du cristal formé, il faut qu'il y ait un plus grand nombre d'atomes qui rejoigne le solide qu'il n'y en a qui le quitte. Il faut donc que la température de l'interface soit légèrement inférieure à la température d'équilibre. Cela signifie qu'il doit exister une certaine surfusion pour que l'interface se déplace. Nous allons voir comment le gradient de température dans le liquide affecte la morphologie du front de solidification.

Considérons le cas d'un métal pur, contenu dans un moule horizontal, de telle manière qu'une partie du métal existe à l'état solide et une partie à l'état liquide (Fig. 2.2).

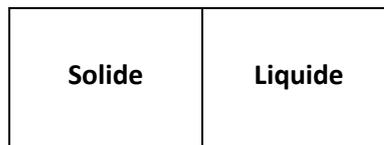


Fig. 2.2 – Interface stationnaire entre le liquide et le solide.

- Croissance cristalline avec un gradient de température positif dans le liquide

La courbe (a) de la figure 2.3 indique le cas où l'interface liquide - solide est stationnaire. Considérons le profil de température représenté par la courbe (b) où la température du moule est inférieure à la température de solidification. Il y a un certain degré de surfusion et l'interface peut, alors, se déplacer. Dans ce cas, et c'est presque toujours le cas en solidifiant un liquide, le centre du liquide est plus chaud que les bords du moule. La forme de l'interface changera aléatoirement de sorte que les protubérances se forment comme il est indiqué sur la figure 2.4.

Le bout de la protubérance est entouré de liquide qui a une température supérieure que le reste de l'interface. Comme la force motrice de la solidification à ce bout est petite, alors ce dernier croît plus lentement que le reste de l'interface et disparaît. Ce processus résulte dans le cas de la solidification avec une interface plane et stable.

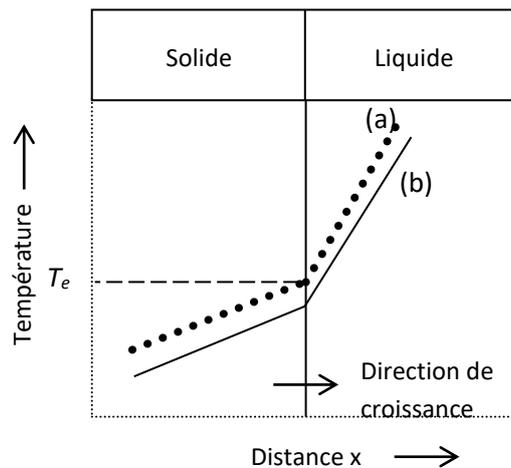


Fig. 2.3 – Distribution de la température pour une croissance cristalline d'une interface stationnaire (courbe a) et une interface mobile (courbe b).

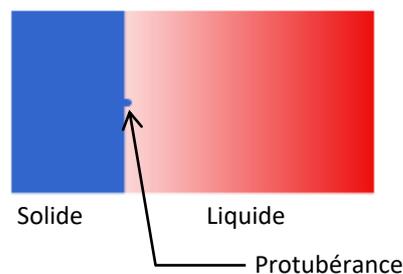


Fig. 2.4 – Apparition d'une protubérance lors de la croissance.

- Croissance cristalline avec un gradient de température négatif dans le liquide

Considérons maintenant le cas de la figure 2.5 où la température du moule est égale à la température de solidification du liquide, qui est versé dedans juste au-dessus de sa température de solidification. Si la chaleur latente de fusion est assez grande, il se créera un gradient thermique négatif dans le liquide. Le liquide situé en avant de l'interface est en surfusion.

La forme de l'interface changera de sorte qu'une protubérance apparait, son extrémité est dans une région où la surfusion est plus importante que sur le reste de l'interface. Ainsi, la force motrice est plus grande et la croissance est plus rapide.

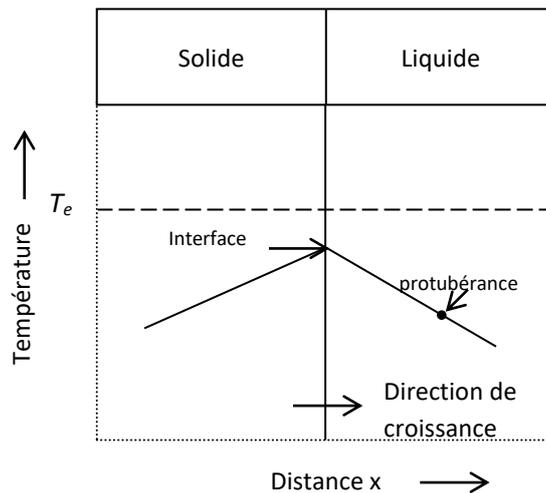


Fig. 2.5 – Croissance avec un gradient de température négatif dans le liquide.

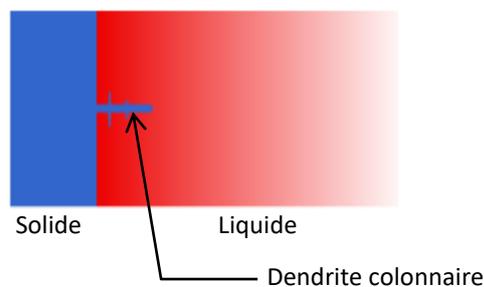


Fig. 2.6 – Représentation de la croissance dendritique colonnaire.

Dans cette situation, l'interface plane est instable et le solide se forme avec une microstructure dendritique, la protubérance se développe sous forme d'une pointe alors que le taux de croissance de l'interface principale est quelque peu retardé (Fig. 2.6).

D'une manière similaire, des branches se développent sur la pointe et ces branches servent à leur tour de tronc pour de nouvelles branches.

## II. 2 Instabilité solutale - Critère de surfusion constitutionnelle

Les structures de croissances que l'on rencontre habituellement dans les alliages sont reliées directement à la surfusion, qui peut être produite indirectement par des changements de température et de composition. Dans le cas où les changements de composition sont reliés à des changements de température, on l'appelle surfusion de constitution.

L'origine de l'instabilité morphologique de l'interface a été décrite pour la première fois en 1953 par Tiller et al. (Tiller, 1953). D'après eux, l'interface peut devenir instable si le liquide adjacent à l'interface est thermodynamiquement instable ; c'est-à-dire si la température imposée est inférieure à la température d'équilibre. Ainsi, une expression analytique d'un critère de surfusion de constitution peut être déterminée.

Considérons la solidification d'un alliage binaire simple, de concentration  $c_0$  et d'une interface plane, attachée à un repère de référence mobile  $(0, Z)$ , avançant avec une vitesse  $V$  en régime stationnaire, où le coefficient de partition  $k$  est inférieur à 1.

Le profil de répartition du soluté, qui existe en avant de l'interface, est illustré sur la figure 2.7. La répartition du soluté au voisinage de l'interface est localisée dans une couche limite  $\delta_c$  (longueur de diffusion) caractérisée par la diffusion de soluté dans le liquide  $D_l$  et la vitesse d'avancement de l'interface  $V$  ( $\delta_c = \frac{D_l}{V}$ ).

L'équation représentative de cette répartition, lorsque le régime stationnaire est établi, est donc :

$$D_l \left( \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) + V \left( \frac{\partial c}{\partial z} \right) = 0$$

Le premier terme représente l'écoulement par diffusion par unité de volume, et le deuxième terme représente l'écoulement du soluté dû à la solidification à partir du même volume élémentaire. Ce qui conduit à la solution où la concentration de soluté dans la couche limite décroît exponentiellement avec la distance  $z$ , de  $c_0/k$  à  $c_0$ , tel que :

$$c_l = c_0 \left[ 1 + \left( \frac{1-k}{k} \right) \exp \left( -\frac{V}{D_1} z \right) \right]$$

Pour les grandes valeurs de  $z$ ,  $c_l$  est égal à  $c_0$ , et lorsque  $z$  est égal à 0,  $c_l$  est égal à  $c_0/k$ . Lorsque le régime régulier est établi, la composition du solide qui se forme à l'interface est égal à  $c_0$ .

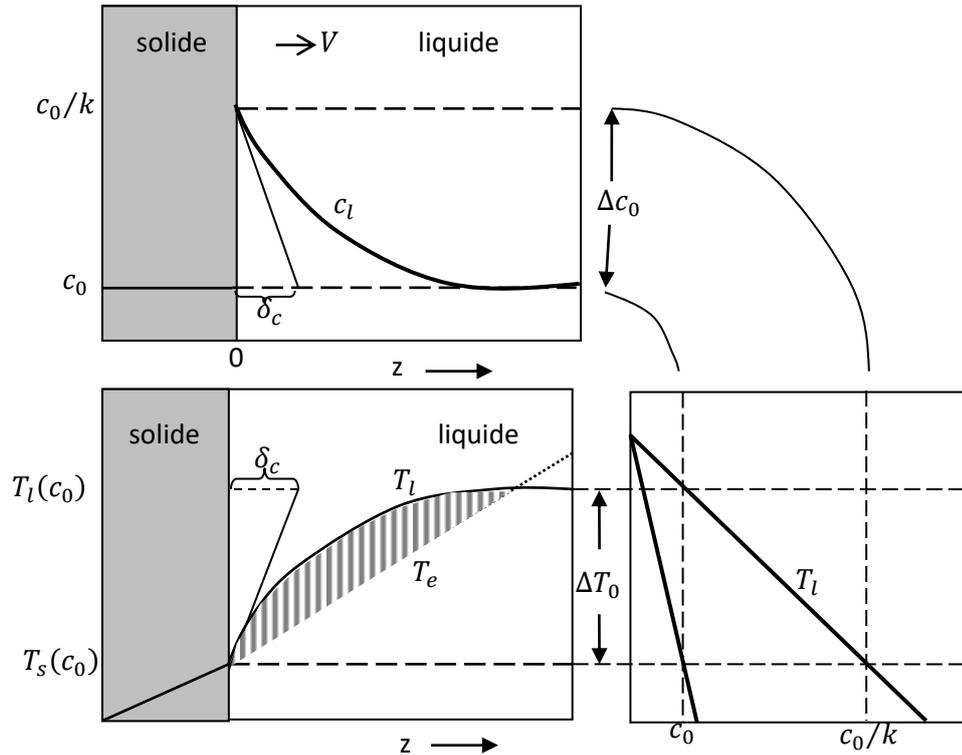


Fig. 2.7 – Profils de concentration et de température à l'interface solide-liquide. La répartition du soluté, dans le liquide en avant de l'interface lorsque le régime est établi, est localisé dans la zone liquide adjacente à l'interface (Kurz, 1984).

Le changement de concentration affecte la température locale du liquide décrite ci-dessus pour donner :

$$T_l(z) = T_f + m c_0 \left[ 1 + \left( \frac{1-k}{k} \right) \exp \left( -\frac{V}{D_1} z \right) \right]$$

Par ailleurs, en supposant la diffusion thermique instantanée, le profil de température dans la phase liquide est linéaire au voisinage du front et la température réelle du liquide due au gradient thermique,  $G$ , est :

$$T(z) = T_f + m \frac{c_0}{k} + Gz$$

Le gradient thermique  $G$ , est déterminé par l'évolution du champ de température,  $T_l(z)$ , tel que  $G = \frac{d}{dz} T_l(z)|_{z=0}$ . Il est imposé par le flux de chaleur et peut conduire aux conditions de stabilité et on peut en déduire ainsi les morphologies de l'interface qui en découle. La figure 2.8 considère trois cas de profils de la température actuelle.

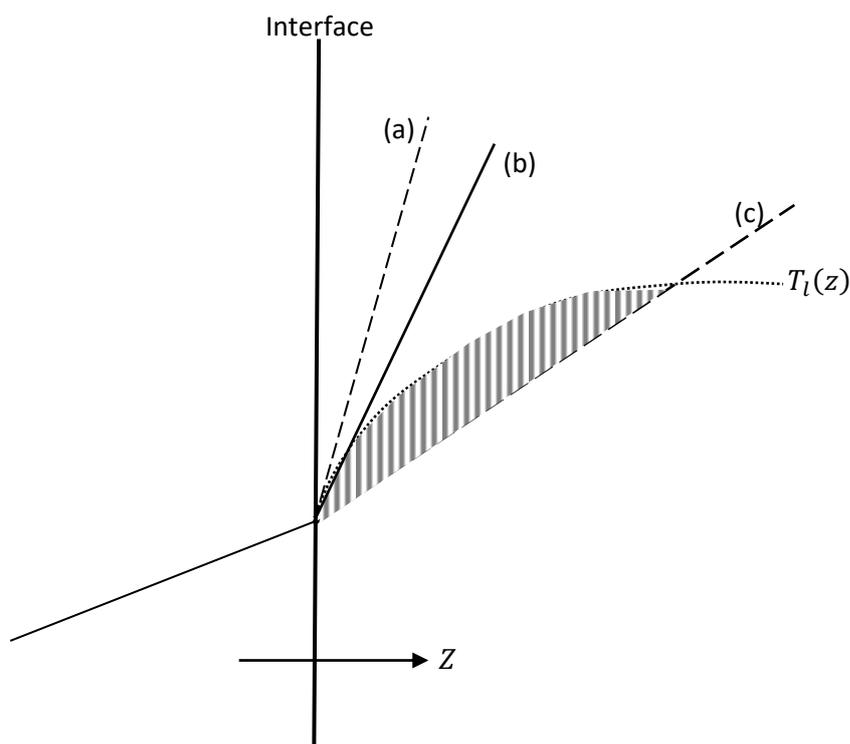


Fig. 2.8 – Profils de température possibles pour le concept du critère de surfusion constitutionnelle.

Si la température actuelle dépasse la température locale du liquidus,  $T_l(z)$ , c'est le cas de la courbe (a) de la figure 2.8, une stabilité de l'interface est prévue. Si, par contre, la température actuelle est inférieure à  $T_l(z)$  à cause d'un rejet, et ainsi une accumulation, du soluté en avant de l'interface, une instabilité de l'interface est prévue (courbe (c) Fig. 2.8). La courbe (b) correspond à la condition critique.

Il peut facilement être démontré que l'interface est stable pour :

$$G_l \geq \frac{mVc_0}{D_l} \frac{k-1}{k}$$

### III. CRITERE DE STABILITE – ANALYSE DE MULLINS ET SEKERKA

#### III. 1 Vue bibliographique

Le critère de surfusion constitutionnelle exposé plus haut, introduit par Tiller et al. (Tiller, 1953), est limité. Il est relativement satisfaisant aux faibles vitesses de tirage pour la solidification dirigée et permet de prédire des résultats en accord avec l'expérience sans apporter des informations sur la structure formée (sa longueur d'onde par exemple). D'autres études analytiques du phénomène d'instabilité de l'interface liquide - solide ont été réalisées pour la solidification des mélanges binaires (dans le cas des régimes de diffusion thermique et solutal). La première analyse de la stabilité morphologique plus complète, permettant de déterminer le seuil d'instabilité et la longueur d'onde de la structure formée, a été développée par Mullins et Sekerka, qui ont considéré la stabilité de croissance d'une particule sphérique dans une solution supersaturée (Mullins, 1963), et la stabilité d'une interface plane durant la solidification directionnelle d'un alliage binaire dilué (Mullins, 1964). Dans leur approche (Mullins, 1964), ils ont imposé une perturbation infinitésimale, à une interface plane, pour de faibles vitesses de croissance. Ils ont, ainsi, trouvé un critère de stabilité en fonction des paramètres de croissance et des caractéristiques du système en considérant les hypothèses suivantes :

- L'échantillon est assumé bidimensionnel et isotrope (c'est-à-dire absence de la tension de surface et de la cinétique), se déplace suivant la direction  $Z$  avec une vitesse de traction constante  $V$  dans un gradient de température imposé  $G$ . Considérant l'interface plane coïncide avec le plan  $Z = 0$ .
- Un équilibre local est assumé à l'interface, qui est une excellente approximation pour la solidification de la plupart des mélanges métalliques à des faibles vitesses de croissance.
- Absence des effets de convection à l'interface.
- La diffusion du soluté dans le solide est négligée.
- De même, la diffusion thermique dans le solide et le liquide est négligée, parce que le coefficient de diffusion thermique  $\alpha$  est habituellement beaucoup plus grand que le coefficient de diffusion chimique  $D_l$ .

Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) introduisent, alors, le concept de la stabilité marginale pour des longueurs d'ondes d'une perturbation, qui assume qu'une stabilité d'une interface plane existe lorsque l'amplitude de la perturbation est indépendante du

temps. En effet, en plus du critère de la vitesse d'une stabilité marginale, l'augmentation de l'amplitude de la perturbation avec le temps provoque une instabilité de l'interface pour obtenir des structures cellulaires ou dendritiques.

Depuis, de nombreux travaux ont été réalisés pour comprendre le développement de la morphologie de l'instabilité de l'interface liquide - solide. Trivedi et Kurz (Trivedi, 1986) ont étendu l'analyse de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) en proposant un critère plus général pour la stabilité d'une interface plane valable aussi bien pour les faibles que pour les fortes vitesses de croissance (solidification rapide). Ils ont, aussi, développé un modèle analytique, pour décrire la croissance jusqu'à des vitesses de croissance proche de la limite de stabilité absolue, en prenant en compte la variation du coefficient de distribution en fonction de la température et la vitesse de croissance traitant la formation des microstructures durant la solidification directionnelle (Kurz, 1986 ; Trivedi ; 1990). Galenko et Danivol (Galenko, 2004) ont étendu l'analyse de stabilité de l'interface de Trivedi et Kurz (Trivedi, 1986) en utilisant un modèle de solidification rapide en état d'hors équilibre. On a pu constater l'effet de l'énergie interfaciale et de la cinétique de croissance sur la stabilité morphologique d'une interface plane (Li, 2006 ; Trivedi, 1980) ou cylindrique ou sphérique (Trivedi, 1980). Zhang et al. (Zhang, 1993) ont adopté la même approche classique de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) pour étudier la croissance uniforme d'une interface plane, dans un liquide surfondu. Ils ont proposé un nouveau critère de stabilité, une nouvelle correction (enthalpie d'excès) a été ajoutée à l'énergie interfaciale pour en tenir en compte de la courbure.

L'existence d'une stabilité absolue a été vérifiée expérimentalement, des structures dépendantes du temps ont été observées (Miyata, 1985 ; Fornaro, 2006).

Il est important de savoir que l'analyse de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) est valable juste pour les alliages fortement dilués. Ceci est à cause des approximations utilisées en traitant les effets de Gibbs-Thompson et aussi le solide obtenu est assumé étant une seule phase (Laxmann, 1989).

### III. 2 Formulation mathématique

En considérant les hypothèses données précédemment, on peut citer les équations fondamentales de l'analyse de la stabilité morphologique d'une interface plane. Notons que notre analyse est basée sur l'analyse donnée par Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) et modifiée par Trivedi et Kurz (Trivedi, 1986).

Les champs, thermique et solutal, à l'état stationnaire, sont représentés en considérant les équations de transports thermique et solutal. Nous devons noter que le repère des coordonnées cartésiennes est attaché à l'interface.

$$\nabla^2 c + \frac{V}{D_1} \frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

$$\nabla^2 T_l + \frac{V}{\alpha_l} \frac{\partial T_l}{\partial z} = 0$$

$$\nabla^2 T_s + \frac{V}{\alpha_s} \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0$$

Ces équations doivent être résolues pour les deux cas de diffusion (thermique et solutale). Les solutions pour une interface plane sont :

$$c_1 = c_0 - \frac{D_l G_l}{mV} \exp\left(-\frac{Vz}{D_l}\right)$$

$$T_l = T_0 - \frac{\alpha_l G_T^l}{V} \left[1 - \exp\left(-\frac{Vz}{\alpha_l}\right)\right]$$

$$T_s = T_0 - \frac{\alpha_s G_T^s}{V} \left[1 - \exp\left(-\frac{Vz}{\alpha_s}\right)\right]$$

Où  $c_0$  la concentration à l'infini,  $T_0$  la température à l'interface,  $G_l$  le gradient solutal du liquidus,  $G_T^l$  et  $G_T^s$  sont, respectivement, les gradients de température dans le liquide et dans le solide à une interface non perturbée.

L'analyse linéaire de la stabilité de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) commence par la considération de formation d'une perturbation infinitésimale sur l'interface plane (Fig. 2.9). L'évolution de l'interface est ainsi décrite par une fonction sinusoïdale. Le problème, maintenant, est de savoir si la perturbation est stable ou non.

$$z = \phi(t) = \delta_p(t) \sin \omega x$$

Où  $\delta_p$  l'amplitude de la perturbation ( $|\delta_p| \ll 1$ ),  $\omega = \frac{2\pi}{\lambda}$  le nombre d'onde avec  $\lambda$  la longueur d'onde.

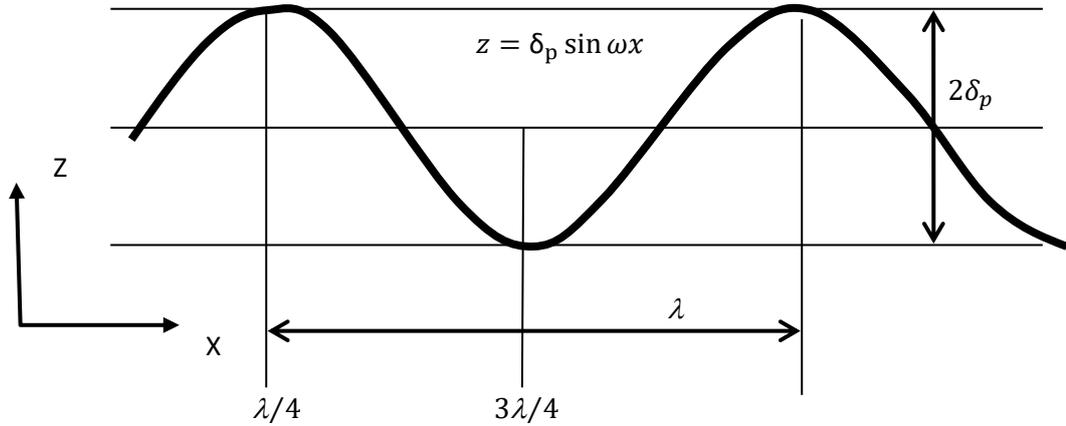


Fig. 2.9 – Partie d'une perturbation sinusoïdale.

A l'interface perturbée, la température  $T_\theta$  et la concentration  $c_\theta$  sont définis par la condition de capillarité :

$$T_\theta = T_f + mc_\theta + \Gamma \kappa_\theta$$

Où  $\kappa_\theta$  la courbure de l'interface perturbée. En considérant que les termes de premier ordre de l'amplitude de la perturbation  $\delta_p$ , elle peut prendre la forme suivante (Galenko, 2004) :

$$\kappa_\theta = \frac{\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}}{\left[1 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)^2\right]^{3/2}} = -\delta_p \omega^2 \sin \omega x$$

$T_\theta$  devient alors :

$$T_\theta = T_f + mc_\theta - \Gamma \delta_p \omega^2 \sin \omega x$$

En utilisant la technique de perturbation, on ajoute un terme ayant la forme de perturbation aux trois équations représentant la solution d'une interface stable, on a :

$$c_1 = c_0 - \frac{D_1 G_1}{mV} \exp\left(-\frac{Vz}{D_1}\right) + a_1 \delta_p \sin(\omega x) \cdot \exp(-b_c z)$$

$$T_1 = T_0 - \frac{\alpha_1 G_T^l}{V} \left[1 - \exp\left(-\frac{Vz}{\alpha_1}\right)\right] + a_2 \delta_p \sin(\omega x) \cdot \exp(-b_1 z)$$

$$T_s = T_0 - \frac{\alpha_s G_T^s}{V} \left[1 - \exp\left(-\frac{Vz}{\alpha_s}\right)\right] + a_3 \delta_p \sin(\omega x) \cdot \exp(-b_s z)$$

$a_1, a_2, a_3, b_c, b_1$  et  $b_s$  doivent être déterminées. Pour satisfaire les équations des champs, thermique et solutal, on doit avoir :

$$b_c = \frac{V}{2D_1} + \left[ \left( \frac{V}{2D_1} \right)^2 + \omega^2 \right]^{1/2}$$

$$b_l = \frac{V}{2\alpha_1} + \left[ \left( \frac{V}{2\alpha_1} \right)^2 + \omega^2 \right]^{1/2}$$

$$b_s = \frac{V}{2\alpha_s} + \left[ \left( \frac{V}{2\alpha_s} \right)^2 + \omega^2 \right]^{1/2}$$

La stabilité d'une interface plane dépend du signe de  $\dot{\delta}_p/\delta_p$ . L'interface est stable lorsque  $\dot{\delta}_p/\delta_p < 0$  et elle est considérée instable lorsque  $\dot{\delta}_p/\delta_p > 0$ . Cependant, on peut déterminer le critère de stabilité marginale en utilisant la condition  $\dot{\delta}_p/\delta_p = 0$ . Ce critère peut s'écrire sous la forme simplifiée :

$$-\Gamma\omega^2 - [\bar{K}_l G_T^l \xi_l + \bar{K}_s G_T^s \xi_s] + mG_l \xi_c = 0$$

Avec

$$\bar{K}_l = \frac{K_l}{K_s + K_l} \text{ et } \bar{K}_s = \frac{K_s}{K_s + K_l}$$

Où  $K_s$  et  $K_l$  sont, respectivement, les conductivités thermiques du solide et du liquide.

Aussi

$$\xi_l = \frac{b_l - \frac{V}{\alpha_l}}{\bar{K}_s b_s + \bar{K}_l b_l}$$

$$\xi_s = \frac{b_s - \frac{V}{\alpha_s}}{\bar{K}_s b_s + \bar{K}_l b_l}$$

Et

$$\xi_c = \frac{b_c - \frac{V}{D_1}}{b_c - \frac{V}{D_1} (1 - k)}$$

La principale différence entre le traitement de Trivedi et Kurz (Trivedi, 1986) et celui de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) est l'introduction des fonctions de stabilités  $\xi_l$  et  $\xi_s$  qui se rapprochent de l'unité aux grandes valeurs de la surfusion.

#### IV. VITESSE CRITIQUE DE STABILITE

L'analyse de la stabilité linéaire du front plan permet de déterminer une certaine vitesse critique. Elle est considérée, en plus des gradients thermique et solutal, pour contrôler la morphologie de l'interface. Différentes morphologies issues de la croissance d'un liquide surfondu en régime stationnaire sont schématisées sur la figure 2.10.

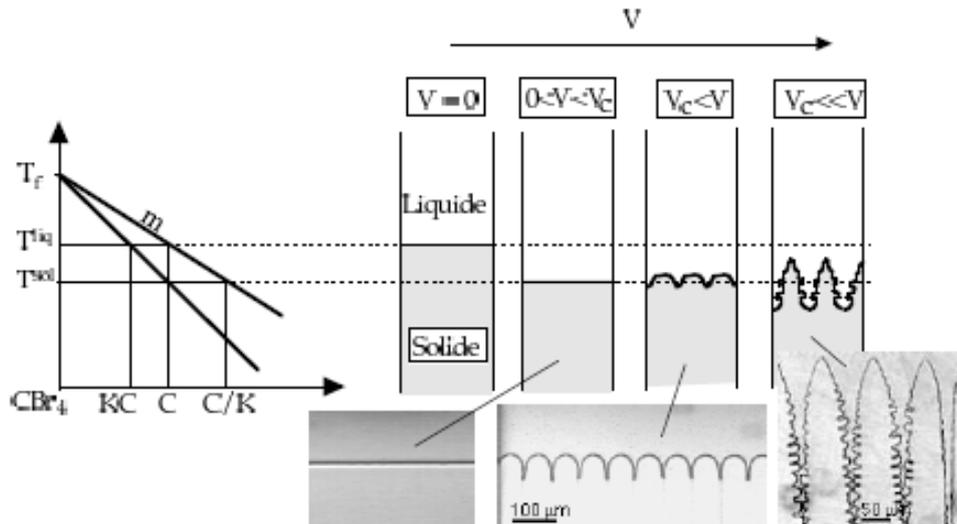


Fig. 2.10 – Différentes morphologies issues de la solidification directionnelle d'un alliage dilué en régime stationnaire (Akamatsu, 2008).

A  $V = 0$  (au repos), le solide et le liquide coexistent dans un état d'équilibre. Le front se solidifiant aux faibles vitesses est stable ( $0 < V < V_c$ ) jusqu'à ce que l'instabilité de Mullins et Sekerka se produise. A ce moment,  $V = V_c$ , appelée vitesse critique. Après cette instabilité, définie primaire, le front se déstabilise en forme de cellules, lorsque  $V > V_c$  ou dendrites, lorsque  $V \gg V_c$ . Aux vitesses de solidification très grandes, ces structures finissent par disparaître et le front redevient stable. L'expression de  $V_c$  est :

$$V_c = \frac{kD_l G}{(1-k)mc_0}$$

En considérant le critère de surfusion constitutionnelle, l'équation de transport peut être écrite en fonction du gradient de température,  $G$ , et le gradient de concentration,  $G_l$  :

$$V_c = \frac{G}{mG_l}$$

$$\text{Avec } G_l = c_0 \left( \frac{k-1}{k} \right) \frac{V}{D_l}$$

## V. CINÉTIQUE DE CROISSANCE DU PIC DE LA DENDRITE

L'instabilité du front plan correspond à un effet de pointe expliqué par une augmentation de flux de diffusion de soluté et un resserrement de lignes d'isoconcentration résultant d'une perturbation du front. Ceci favorise le mouvement du front (Fig. 2.11).

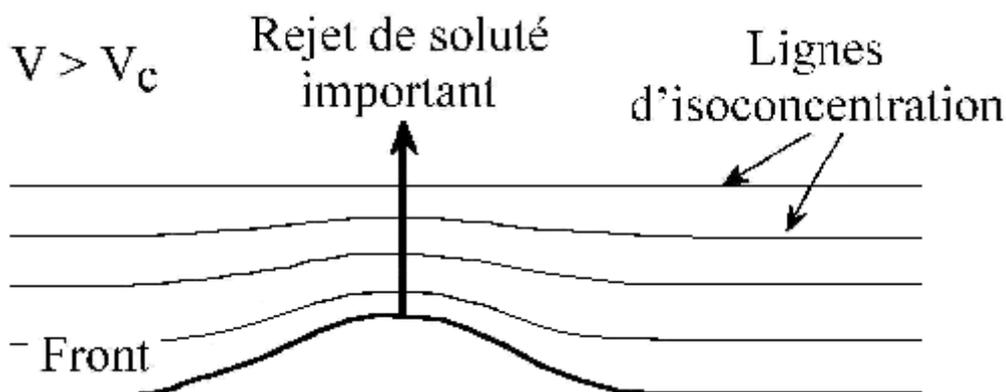


Fig. 2.11 – Front de solidification perturbé.

## VI. RELATION D'IVANTSOV

Plusieurs chercheurs se sont intéressés au traitement mathématique de la croissance dendritique dans un liquide surfondu en tenant compte des observations expérimentales. Papaputrou, en 1935, fut le premier à supposer l'existence d'une solution pour une dendrite assimilée à un paraboloides de révolution. Cette solution a été, par la suite, formulée par Ivantsov (Ivantsov, 1947) et généralisée par Horvay et Cahn (Horvay, 1961).

Ivantsov (Ivantsov, 1947) a développé un calcul mathématique pour déterminer la valeur de la surfusion adimensionnelle (diffusion thermique) ou de la sursaturation (diffusion solutale) à la pointe d'une dendrite en forme parabolique croissant en régime purement diffusif afin de simplifier la résolution des équations de conservation, de la chaleur ou de soluté selon le cas considéré. Un changement de repère est alors indispensable. Le changement de coordonnées du repère cartésien  $(x, y, z)$  au repère paraboloidal  $(\eta, \xi, \theta)$  se réalise par le système d'équations :

$$\begin{cases} x = r\eta\xi \cos \theta \\ y = r\eta\xi \sin \theta \\ z = \frac{r}{2}(\eta^2 - \xi^2) \end{cases}$$

On peut schématiser une dendrite dans un système de coordonnées paraboloidales  $(\eta, \xi, \theta)$  sous la forme d'une surface  $\eta = 1$  (Fig. 2.12).

En fait, Ivantsov (Ivantsov, 1947) résolut l'équation de la conduction de la chaleur devant la pointe d'une dendrite en considérant la croissance d'un cristal pur, dans un liquide au repos et en surfusion thermique. Cette solution a été trouvée en négligeant la tension de surface et la cinétique. Le problème admet, alors, une solution exacte :

$$\Omega_T = Iv(P_T)$$

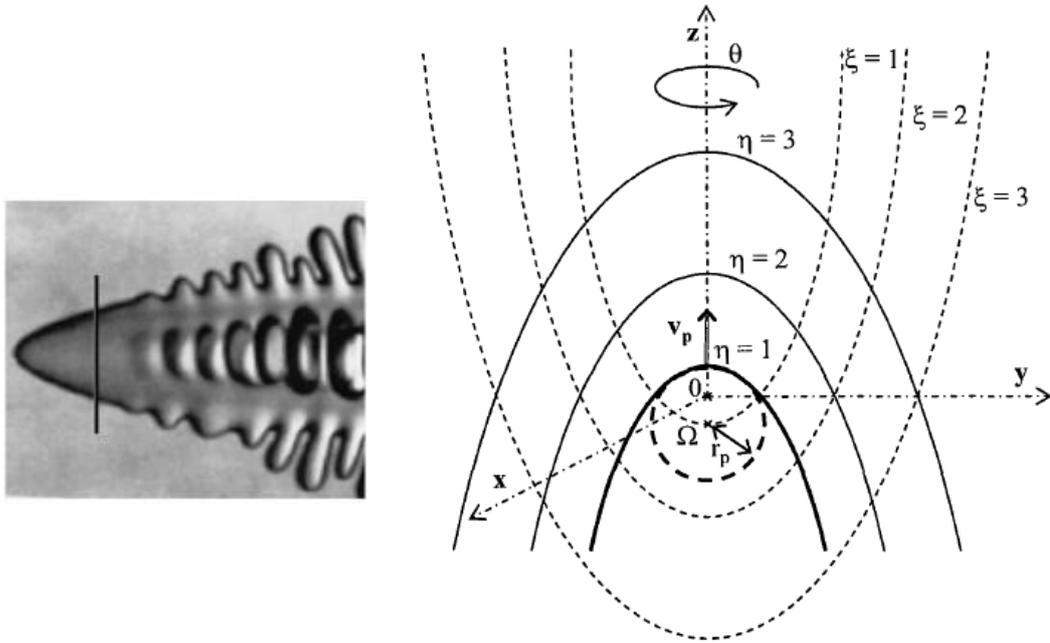


Fig. 2.12 – (a) Une micrographie in situ d'une dendrite SCN. La barre verticale sépare la région stationnaire située à la pointe de la dendrite et la région en cours de révolution au cours du temps contenant les branches primaires (Glicksman, 2011). (b) Représentation d'une dendrite de rayon de courbure à la pointe  $r$  dans un système de coordonnées paraboloidales  $(\eta, \xi, \theta)$ . Les lignes des isovaleurs du transfert de la chaleur sont représentées par les courbes  $\xi = const$  et les isothermes par les lignes  $\eta = const$ . La solution à la pointe de dendrite correspond à la surface  $\eta = 1$  (Guillemot, 2004).

Sachant que :

$$\Omega_T = \frac{\Delta T_T}{L_v/C_p}$$

Et

$$P_T = \frac{rV}{2\alpha_l}$$

Où  $\Omega_T$  la surfusion thermique adimensionnelle du liquide,  $\Delta T_T$  la surfusion thermique,  $C_p$  capacité calorifique massique du liquide,  $P_T$  nombre de Péclet thermique relatif à la pointe,  $r$  rayon de la pointe et  $V$  vitesse de croissance de la pointe.

Une relation généralisée dans le cas de la diffusion solutale, qui relie la sursaturation chimique,  $\Omega_c$ , le rayon de la pointe  $r$  et la vitesse de croissance de la pointe  $V$  pour être appliquée à une dendrite croissant dans un milieu isotherme :

$$\Omega_c = Iv(P_c)$$

Avec

$$\Omega_c = \frac{c_i - c_0}{c_i(1 - k)}$$

Et

$$P_c = \frac{rV}{2D_l}$$

Où  $c_i$  la concentration du liquide à l'interface et  $P_c$  nombre de Péclet chimique relatif à la pointe.

La fonction d'Ivantsov,  $Iv$ , est exprimée par :

$$Iv(P_i) = P_i \exp(P_i) E_1(P_i)$$

Dans laquelle  $E_1(P_i)$  est la fonction exponentielle intégrale, avec :

$$E_1(P_i) = \int_{P_i}^{\infty} \frac{\exp(-u)}{u} du$$

La loi  $V \cdot r = const$  est vérifiée pour une infinité de solutions  $(V, r)$ . Il est donc impossible de déterminer indépendamment  $r$  et  $V$ . Les expériences ont cependant identifié l'existence d'une unique valeur de vitesse et de rayon de la pointe à une sursaturation donnée. De ce fait, plusieurs critères de stabilité ont été proposés afin de retrouver une solution unique de la vitesse et du rayon de la pointe de dendrite.

## VII. CRITERE DE STABILITE MARGINALE

Langer et Müller-Krumbhaar ont menés des calculs théoriques et des simulations numériques (Langer, 1977 ; Langer I, 1978 ; Langer II, 1978 ; Langer III, 1978) en se basant sur l'analyse de stabilité linéaire de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964), pour

introduire un nouveau critère de stabilité appelé critère de stabilité marginale, pour déterminer la morphologie de la pointe de la dendrite en présence de la tension de surface. Il a été proposé qu'une pointe observée de rayon  $r$  est égale à la plus courte longueur d'onde  $\lambda_s$  qui peut se former sous des conditions de croissance locales (Langer, 1977 ; Langer I, 1978) :

$$r = \lambda_s$$

Selon Trivedi (Trivedi, 1980) et Kurz et al. (Kurz, 1981), le critère de stabilité peut être exprimé par :

$$\lambda_s = \left\{ \frac{\Gamma}{\sigma^*(mG_1 - G)} \right\}^{1/2}$$

Où  $\sigma^*$  est une constante de stabilité, elle est de l'ordre de  $1/4\pi^2 \cong 0.025$ .

## VIII. MODELES THEORIQUES DE LA CROISSANCE DE LA DENDRITE

Le critère de stabilité marginale a constitué une base pour plusieurs modèles théoriques concernant la cinétique de croissance d'une pointe de dendrite. Nous avons choisi de rappeler deux modèles : le modèle LGK (Lipton - Glicksman - Kurz) (Lipton, 1984 ; Lipton, 1987) et le modèle LKT (Lipton - Kurz - Trivedi) (Lipton Kurz, 1987) qui sont valide pour la croissance équiaxe.

### VIII. 1 Modèle LGK

#### VIII. 1. 1 Modèle dimensionnel

Ce modèle est basé sur le modèle de croissance dendritique qui a été développé par Lipton et al. (Lipton, 1984 ; Lipton, 1987). Il est fondé sur les hypothèses suivantes :

- La surfusion est constante au cours de la solidification.
- La forme de la dendrite est paraboloidale (sa pointe est isotherme et isoconcentrique).
- Le transfert de chaleur et de la matière dans le solide et le liquide est, uniquement, contrôlé par la diffusion, c'est-à-dire la convection joue un rôle négligeable.

Les transports de chaleur et de matière sont des fonctions de la surfusion totale,  $\Delta T$ , qui détermine la force motrice de la croissance dendritique. On a déjà expliqué que pour un alliage, comme il est illustré sur la figure 2.13, la surfusion totale est somme de plusieurs surfusions :

$$\Delta T = \Delta T_T + \Delta T_C + \Delta T_R$$

En utilisant la solution d'Ivantsov (Ivantsov, 1947), la surfusion thermique,  $\Delta T_T$ , peut être exprimée par :

$$\Delta T_T = \frac{L}{C_p} \text{Iv}(P_T)$$

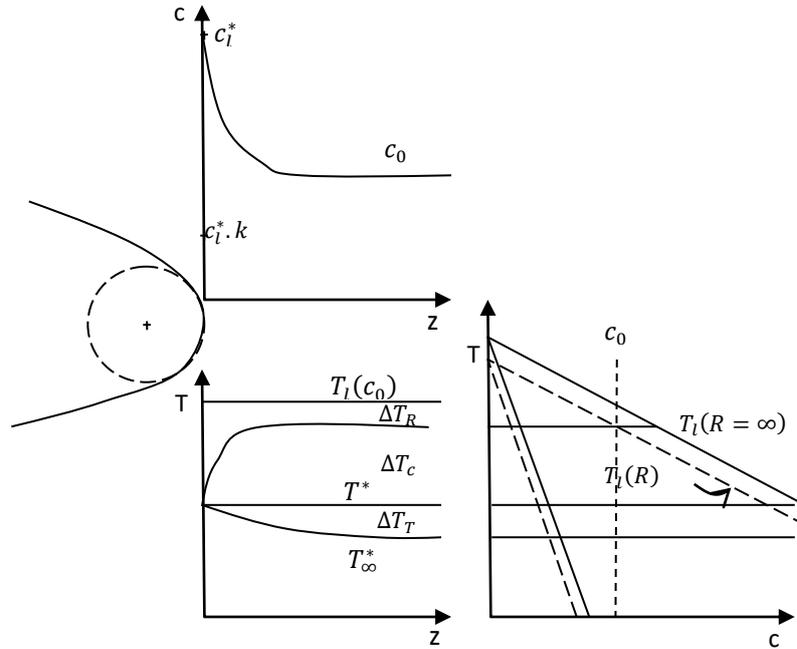


Fig. 2.13 – Champs de température et de concentration à la pointe d'une dendrite en croissance dans un alliage surfondu.

La concentration de l'interface,  $c_i$ , peut être exprimée, en utilisant la solution d'Ivantsov, par :

$$c_i = \frac{c_0}{1 - (1 - k)\text{Iv}(P_c)}$$

La surfusion chimique,  $\Delta T_C$ , est liée à la concentration  $c_i$  à l'interface liquide - solide par le diagramme de phase. Elle s'augmente au fur et à mesure de la solidification à cause du rejet de soluté :

$$\Delta T_c = mc_0 \left\{ 1 - \frac{1}{1 - (1 - k)\text{Iv}(P_c)} \right\}$$

La surfusion de courbure est déterminée par l'équation de Gibbs-Thomson est :

$$\Delta T_R = \frac{2\Gamma}{r}$$

La surfusion totale peut maintenant être exprimée comme :

$$\Delta T = \frac{L_v}{C_p} \text{Iv}(P_T) + mc_0 \left\{ 1 - \frac{1}{1 - (1-k)\text{Iv}(P_c)} \right\} + \frac{2\Gamma}{r}$$

Cette équation établit une relation entre le produit de la vitesse de croissance et le rayon de la pointe ( $V \cdot r$ ) et la surfusion totale ( $\Delta T$ ). Elle n'est, cependant, pas suffisante pour déterminer les valeurs de  $V$  et  $r$ . D'où l'utilisation du critère de stabilité marginale pour établir une seconde équation pour évaluer  $V$  et  $r$  :

$$\lambda_s = \left\{ \frac{\Gamma}{\sigma^*(mG_l - G)} \right\}^{1/2}$$

Les gradients de température et de concentration peuvent être obtenus en examinant l'effet des flux de chaleur et de matière autour de la pointe de la dendrite parabolique. Le gradient de concentration adimensionnel dans le liquide devient  $\bar{G}_l = -2P_c$ . Le gradient thermique est exprimé de la même manière  $\bar{G} = -2P_T$ . Transformer les deux gradients en forme adimensionnelle donne :

$$G_l = \frac{-2P_c c_i (1-k)}{r}$$

Et

$$G = \frac{-2P_T L_v}{C_p r}$$

Le gradient de température moyen mesuré pour une dendrite isotherme est donné par :

$$\bar{G} = \frac{K_s G_T^s + K_l G_T^l}{K_s + K_l}$$

Pour une dendrite isotherme représentée par la solution d'Ivantsov  $G_T^l = 0$ , la forme du gradient de température moyen devient ainsi :

$$\bar{G} = \frac{2P_T L_v}{C_p r}$$

On obtient, alors, une expression pour le rayon de la pointe de la forme :

$$r = \frac{\Gamma / \sigma^*}{\frac{L_v}{C_p} P_T - \frac{-2P_c mc_0 (1-k)}{1 - (1-k)\text{Iv}(P_c)}}$$

Et une autre expression pour la surfusion de courbure à la pointe :

$$\Delta T_R = \frac{2\sigma^*}{\frac{L_v}{C_p} P_T - \frac{-2P_c mc_0 (1-k)}{1 - (1-k)\text{Iv}(P_c)}}$$

Les nombres de Péclet solutal et thermique sont liés entre eux par  $P_c = P_T \left( \alpha_l / D_l \right)$ . Alors le seul inconnu est le produit  $(r \cdot V)$ . La vitesse de croissance peut être calculée à partir de la définition du nombre de Péclet :

$$V = \frac{2\alpha_l P_T}{r}$$

Donc, le problème de la croissance dendritique pour de faibles nombres de Péclet est complètement résolu, le rayon de la pointe et la vitesse de croissance peuvent être calculés.

### VIII. 1. 2 Modèle adimensionnel

Une forme générale adimensionnelle de ce modèle est trouvée en liant les paramètres dimensionnels au cas thermique où  $c_0 = 0$ . Cette procédure consiste à transformer les équations en leurs formes adimensionnelles respectives :

$$\Delta T = Iv(P_T) + \bar{c}_0(A - 1) + 2\sigma^* P_T F(A)$$

$$\bar{r} = \frac{1}{\sigma^* P_T F(A)}$$

$$\bar{V} = \sigma^* P_T^2 F(A)$$

Ici, on a défini deux paramètres adimensionnels  $A$  et  $F(A)$ , tel que :

$$A = \frac{c_i}{c_0} = \frac{1}{1 - (1 - k)Iv(P_T \eta)}$$

et

$$F(A) = 1 - \frac{G_l}{G} = 1 + 2\eta \bar{c}_0 A (1 - k)$$

Les quantités adimensionnelles sont liées aux valeurs dimensionnelles par les normalisations  $\bar{\Delta T} = \frac{\Delta T}{g}$ ,  $\bar{r} = \frac{r}{d}$ ,  $\bar{V} = \frac{Vd}{2\alpha_l}$  et  $\bar{c}_0 = \frac{c_0 |m|}{g}$  avec le rapport de diffusivité défini  $\eta = \frac{\alpha_l}{D_l}$ , et la longueur de capillarité thermique définie par  $d = \frac{\Gamma}{g}$  où  $g = \frac{L_v}{C_p}$  est la surfusion unitaire.

Dans le cas des substances purs  $\bar{c}_0 = 0$ ,  $F(A) = 1$  et on a alors :

$$\Delta T = Iv(P_T) + 2\sigma^* P_T$$

$$\bar{r} = \frac{1}{\sigma^* P_T}$$

$$\bar{V} = \sigma^* P_T^2$$

Et en remplaçant  $k = 1$ , étant donné que dans ce cas  $A = F(A) = 1$ , on obtient la relation :

$$\bar{r}^2 \bar{V} = \frac{1}{\sigma^*}$$

Les constantes de stabilité pour les matériaux purs  $\sigma^* = \sigma^*(0)$  ou pour les alliages de composition donnée  $\sigma^* = \sigma^*(c_0)$  sont indépendantes de la surfusion. Selon les simplifications du modèle, cela n'est vrai que pour de faibles nombres de Péclet, c'est-à-dire pour de petites valeurs de surfusion.

## VIII. 2 Modèle LKT

Les modèles utilisant le critère de stabilité (Langer, 1980 ; Karma, 1984 ; Lipton, 1984 ; Lipton, 1987) permettent de déterminer le comportement de croissance d'une pointe dendritique isolée lors de la solidification d'un alliage légèrement sous-refroidi (surfusion faible). Pour le problème de croissance à grande surfusion, le modèle LGK (Lipton, 1984 ; Lipton, 1987) sera étendu aux grandes surfusions et ainsi pour des grandes valeurs du nombre de Péclet.

Le modèle LKT (Lipton Kurz, 1987) prévoit une analyse développée de la stabilité et permet de calculer la longueur d'onde de la perturbation d'une interface plane aux faibles et grandes valeurs des nombres de Péclet thermique et solutal. Ce modèle est utilisé en conjonction avec la solution d'Ivantsov pour les champs de température et de concentration.

Le modèle est proposé sous forme adimensionnelle. La surfusion du bain est constituée de trois parties (Lipton, 1987) :

$$\bar{\Delta T} = \frac{Iv(P_T)}{\bar{\Delta T}_T} + \bar{c}_0 \left\{ \frac{1}{1 - (1 - k)Iv(P_c)} - 1 \right\} + \frac{2}{\bar{\Delta T}_R}$$

Trivedi et Kurz (Trivedi, 1986) ont étendu l'analyse de Mullins et Sekerka (Mullins, 1964) pour le cas du nombre de Péclet élevé. Récrire leurs résultats sous l'hypothèse d'égalité de la diffusivité et la conductivité thermiques aux états solide et liquide donne une pointe isotherme de rayon  $\bar{r}$ , tel que :

$$\bar{r} = \frac{1}{\sigma^*(\bar{G}_l \xi_c - \bar{G}_s \xi_T)}$$

Le paramètre de stabilité solutal  $\xi_c$  est donné par :

$$\xi_c = 1 + \frac{2k}{1 - 2k - \sqrt{1 + \frac{1}{\sigma^* P_c^2}}}$$

et le paramètre de stabilité thermique  $\xi_T$  est donné par :

$$\xi_T = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\sigma^* P_T^2}}}$$

Pour de grandes valeurs du nombre de Péclet, les équations se simplifient à :

$$\xi_c = \frac{1}{4k\sigma^* P_c^2} \text{ et } \xi_T = \frac{1}{2\sigma^* P_T^2}$$

Afin de simplifier les expressions des équations, nous définissons deux paramètres adimensionnels  $A$  et  $F(A)$ , tels que :

$$A = \frac{1}{1 - (1 - k)Iv(P_c)}$$

et

$$F(A) = \xi_T + \xi_c 2\eta \bar{c}_0 A(1 - k)$$

La surfusion totale, en termes de ces paramètres, devient :

$$\bar{\Delta T} = Iv(P_T) + \bar{c}_0(A - 1) + 2\sigma^* P_T F(A)$$

Et le rayon de courbure :

$$\bar{r} = \frac{1}{\sigma^* P_T F(A)}$$

De la relation  $P_T = \bar{V}\bar{r}$ , la vitesse de croissance peut être écrite sous la forme :

$$\bar{V} = \sigma^* P_T^2 F(A)$$

Cas aux limites

- **Petits nombres de Péclet** – Dans le cas de petits nombres de Péclet  $\xi_T = \xi_c \rightarrow 1$ , la fonction  $F(A)$  sera réduite à :

$$F(A) = 1 + 2\eta \bar{c}_0 A(1 - k)$$

Cela conduit à la forme présentée dans le modèle LGK (Lipton, 1984 ; Lipton, 1987).

- **Matériaux purs et petit nombre de Péclet** – en substituant  $\bar{c}_0 = 0$  dans les équations ci-dessus, on obtient :

$$\bar{\Delta T} = Iv(P_T) + 2\sigma^* P_T$$

et

$$\bar{V}\bar{r}^2 = \frac{1}{\sigma^*}$$

Qui est le résultat obtenu par Langer et Müller-Kurmbhaar (Langer I, 1978).

- **Surfusion maximale** – La surfusion maximale du bain  $\overline{\Delta T}_m$  peut être évaluée à partir des cas aux limites d'un nombre de Péclet élevé. Pour de grandes valeurs de  $P_T$  et  $P_C$ , les valeurs des paramètres de stabilité  $\xi_T$  et  $\xi_C$  seront proches du zéro de sorte que le terme  $F(A)$  sera proche du zéro aussi. Pour les grands arguments, la fonction d'Ivantsov est proche de 1 de sorte que  $A$  deviendra  $1/k$ . Sous ces conditions la surfusion totale, aura la valeur maximale donnée par :

$$\overline{\Delta T}_m = 1 + \bar{c}_0 \left( \frac{1 - k}{k} \right)$$

Ce qui montre que, dans un alliage,  $\overline{\Delta T}_m$  se constitue de la partie thermique (1 = unité de surfusion) et un intervalle de la solidification en équilibre pour une concentration donnée,  $\overline{\Delta T}_0$ .

L'utilisation des approximations maximales des nombres de Péclet pour les équations donnant les fonctions de stabilité  $\xi_C$  et  $\xi_T$  abouti à  $A \rightarrow 1/k$  et la fonction  $F(A)$  devient :

$$F(A) = \frac{1}{2\sigma^*P_T^2} \left[ 1 + \frac{\bar{c}_0(1-k)}{\eta k^2} \right]$$

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 2

**(Dubrovskii, 2014):** V. G. Dubrovskii; Nucleation Theory and Growth of Nanostructures, Nanoscience and Technology.

**(Stefanescu, 2009):** D. M. Stefanescu; Science and Engineering of Casting Solidification, Springer Science+ Business Media, LLC.

**(Akamatsu, 2008) :** S. Akamatsu ; Etude Expérimental par Observation en Temps Réel de la Dynamique Non-linéaire des Fronts de Solidification Directionnelle d'Alliages Transparents, Thèse d'Habilitation à diriger les recherches, Université Pierre et Marie Curie- Paris VI.

**(Deschamps, 2007):** J. Deschamps; Directions de Croissance et Morphologie des Microstructures en Solidification Cristalline Directionnelle, Thèse de Doctorat, Université de Provence AIX-Marseille I.

**(Fornaro, 2006):** O. Fornaro, H. A. Palacio; Planar Front Instabilities during Directional Solidification of hcp Zn-Cd Dilute Alloys, Scripta Materialia, Vol. 54, pp. 2149-2153.

**(Li, 2006):** T. Li, X. Lin, W. Huang; Morphological Evolution during Solidification under Stirring, Acta Materialia, Vol. 54, pp. 4815-4824.

**(Galenko, 2004):** P. K. Galenko and A. Danilov; Linear Morphological Stability Analysis of the Solid-Liquid Interface in Rapid Solidification of a Binary System, Physical. Review E, Vol. 69, 051608.

**(Zhang, 1993):** L. Zhang and S. V. Ganimella; A Modified Mullins-Sekerka Stability Analysis Including Surface Energy Effects, Journal of Applied Physics, Vol. 74, pp. 2494-2500.

**(Trivedi, 1990):** R. Trivedi and W. Kurz; Modeling of Solidification Microstructures in Concentrated Solutions and Intermetallic Systems, Metallurgical transactions A, Vol. 21, pp. 1311-1318.

**(Laxmann, 1989):** V. Laxmann; Morphological Transitions in the Rapid Solidification Regime: A Re-Examination of the Fundamental Validity of the Absolute Stability Concept of Mullins and Sekerka, Acta Metallurgica, Vol. 37, pp. 1109-1119.

**(Lipton, 1987):** J. Lipton, M. E. Glicksman, W. Kurz ; Equiaxed Dendrite Growth in Alloys at Small Supercooling, Metallurgical Transaction A, Vol. 18, pp. 341-345.

**(Lipton Kurz, 1987):** J. Lipton, W. Kurz, R. Trivedi ; Rapid Dendrite Growth in Undercooled Alloys, Acta metallurgica. Vol. 35, pp. 957-964.

**(Kurz, 1986):** W. Kurz, B. Giovanola, R. Trivedi; Theory of Microstructural development During Rapid Solidification, Acta Metallurgica, Vol. 34, pp. 823-830.

**(Trivedi, 1986):** R. Trivedi and W. Kurz ; Morphological Stability of a Planar Interface Under Rapid Solidification Conditions, Acta Metallurgica, Vol. 34, pp. 1663-1670.

**(Miyata, 1985):** Y. Miyata and T. Suzuki; Cellular and Dendritic Growth: Part II-Theory, Metallurgical Transactions A, Vol. 16, pp. 1807-1814.

**(Karma, 1984):** A. Karma and J. S. Langer; Impurity Effects in Dendritic Solidification, Physical Review A, Vol. 30, pp. 3147-3155.

**(Kurz, 1984):** W. Kurz, D. J. Fisher ; Fundamentals of Solidification, Trans Tech Publications.

**(Lipton, 1984):** J. Lipton, M. E. Glicksman, W. Kurz; Dendritic Growth into Undercooled Alloy Melts, Materials Science and Engineering, Vol. 65, pp. 57-63.

**(Kurz, 1981):** W. Kurz and D. J. Fisher; Dendrite Growth at the Limit of Stability: Tip Radius and Spacing, Acta Metallurgica, Vol. 29, pp. 11-20.

**(Langer, 1980):** J. S. Langer; Instabilities and Pattern Formation in Crystal Growth, Reviews of Modern Physics, Vol. 52, pp. 1-28.

**(Trivedi, 1980):** R. Trivedi; Morphological Stability of a Solid Particle Growing From a Binary Alloy Melt, Journal of Crystal Growth, Vol. 48, pp. 93-99.

**(Langer, 1977):** J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar; Stability Effects in Dendritic Crystal Growth, Journal of Crystal Growth, Vol. 42, pp. 11-14.

**(Langer I, 1978):** J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar; Theory of Dendritic Growth – I. Elements of Stability Analysis, Acta Metallurgica, Vol. 26, pp. 1681-1687.

**(Langer II, 1978):** J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar; Theory of Dendritic Growth –II. Instabilities in the Limit of Vanishing Surface Tension, Acta Metallurgica, Vol. 26, pp. 1689-1695.

**(Langer III, 1978):** J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar; Theory of Dendritic Growth –III. Effects of Surface Tension, *Acta Metallurgica*, Vol. 26, pp-1697-1708.

**(Mullins, 1964):** W. W. Mullins and R. F. Sekerka; Stability of a Planar Interface during Solidification of a Dilute Binary Alloy, *Journal of Applied Physics*, V35, pp. 444-451.

**(Mullins, 1963):** W. W. Mullins and R. F. Sekerka; Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow, *Journal of Applied Physics*, V34, pp. 323-329.

**(Horvay, 1961):** G. Horvay and J. W. Cahn; Dendritic and Spheroidal Growth, *Acta Metallurgica*, Vol. 9, pp. 695-705.

**(Tiller, 1953):** W. A. Tiller, K. A. Jackson, J. Rutter and B. Chalmers; The Redistribution of Solute Atoms during the Solidification of Metals, *Acta Metallurgica*, Vol. 1, pp. 428-437.

**(Ivantsov, 1947) :** G. P. Ivantsov, Temperature Field Around a Spherical Cylindrical and Needle-Shaped Crystal Growing in a Pre-Cooled Melt, *Nasa Technical Memorandum* (Translated from the Russian by Protrans, originally published in *Doklady Akad, Nauk SSSR*, Vol. 58, No. 4, 1947), 1985.

## **CHAPITRE 3**

### **MODELES CONNUES POUR LA MODELISATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE DENDRITIQUE**

Les modèles théoriques, établies dans le chapitre 2, pour décrire l'avancement d'une interface liquide - solide durant la solidification d'un liquide surfondu, ont été conçus en considérant une géométrie 1-D. Effectuer la même démarche pour des géométries 2-D et 3D rend la tâche plus difficile. En effet, la résolution théorique des modèles analytiques de la croissance dendritique sur toutes les échelles de longueur en tenant compte d'une interface mobile dans les deux et trois directions est très difficile à réaliser (des fois même impossible). Une résolution numérique s'est, alors, avérée indispensable pour la compréhension détaillée du problème.

Plusieurs modèles numériques ont été développés comme une approche alternative des techniques expérimentales (Glicksman, 1988) et des modèles analytiques (Kurz-Giovanola, 1987 ; Lipton, 1987 ; Lipton Kurz, 1987 ; Luo, 2013). Ces modèles numériques, peuvent résoudre des problèmes compliqués des phénomènes de transports et de la transformation de phases (Boettinger, 2000 ; Ramirez, 2005).

Dans ce chapitre, nous dérivons brièvement deux importantes approches permettant de décrire la croissance des dendrites lors de la solidification, la méthode champ de phase (Phase Field en anglais) (PF) (Kobayashi, 1993 ; Karma, 1998 ; Loginova, 2001 ; Lan, 2003 ; Ramirez, 2004 ; Cartalade, 2014) qui simule directement la croissance

dendritique ; et la méthode d'automate cellulaire (Cellular Automaton en anglais) (CA) (Luo, 2012 ; Krane, 2009 ; Yin, 2009 ; Zinovieva, 2015 ; Dongke, 2016 ; Zyska, 2016) qui est capable de prédire la forme des structures des grains ainsi que la transition CET lors de la solidification (Daming, 2004). Ce ne sont pas bien sûr les seules et de variantes méthodes existent, mais ce sont les principales.

## **I. TECHNIQUE CHAMP DE PHASE (PF)**

La technique PF a émergé comme une méthode de choix pour simuler l'évolution de la microstructure lors de la solidification (Karma, 2001). Elle a été largement utilisée pour résoudre les problèmes de frontière libre sans suivre explicitement l'interface.

Le modèle PF a été initialement appliqué par Kobayashi (Kobayashi, 1993) pour étudier et simuler la croissance des grains dendritiques dans des matériaux purs. Dans cette étude, l'existence de l'anisotropie de l'énergie de surface sous l'effet de la température a été prise en compte (Kobayashi, 1993 ; Karma, 1998). Les modèles PF traitant les alliages binaires, où l'effet de la variation de concentration est plus important que celui de la température, ont été développés récemment. Le premier modèle, appelé modèle de Wheeler - Boettinger – McFadden, a été créé par Wheeler et al., en 1992 (modèle WBM) (Wheeler, 1992) et d'autres modèles ont suivi (Warren, 1995 ; Charach, 1998).

Le modèle PF est conçu à partir de considérations thermodynamiques basées sur les théories analytiques exposées au chapitre 2, et appliqué sur un domaine suffisamment petit où l'interface liquide - solide est considérée comme étant une couche de diffusion d'épaisseur très faible. Une variable thermodynamique, appelée paramètre d'ordre ou champ de phase, est définie  $\phi(x, t)$ . Elle est utilisée pour repérer l'état local du système (Shah, 2014). Elle prend des valeurs limites arbitraires dans le domaine ( $0 \leq \phi \leq 1$ ). 0 pour la phase solide, 1 pour la phase liquide et une valeur intermédiaire entre 0 et 1 pour définir la transition de phase. Des couplages de la méthode PF avec les solveurs éléments finis (FE) ou différences finies (FD) ont été développés pour résoudre les équations d'évolution gouvernant le modèle PF pour décrire la solidification dendritique (Zaeem, 2012).

La méthode PF est fiable dans le domaine de la solidification dendritique, mais elle a besoin d'importantes ressources informatiques pour les domaines à grande échelle comme le cas de la plupart des processus industriels.

## II. TECHNIQUE D'AUTOMATE CELLULAIRE (CA)

Se basant sur les lois de la thermodynamique de la solidification, la germination et la cinétique de croissance, la méthode CA, a été utilisée avec succès dans le domaine de simulation de la croissance dendritique. Elle permet de déterminer les caractéristiques du mouvement de l'interface liquide - solide à l'aide des champs de température et de concentration.

### II. 1 Définition

Un automate cellulaire est constitué, d'après Hesselbarth et Göbel (Hesselbarth, 1991), d'un domaine divisé en un ensemble de cellules régulières. Une cellule est une région de l'espace repérée par ces coordonnées  $(i, j)$  en 2D et  $(i, j, k)$  en 3D. Nous parlerons alors de cellules carrées ou hexagonales en 2D et de cellules cubiques en 3D. Chaque cellule est définie par :

- Un voisinage constitué par l'ensemble de cellules ayant une influence sur la cellule concernée. Le choix du voisinage est un paramètre important de la méthode CA. Deux types de voisinage plus au moins étendu peuvent être considérés : le voisinage de Von Neumann où chaque cellule est entourée par quatre plus proches voisins et le voisinage de Moore où chaque cellule a huit plus proches voisins.

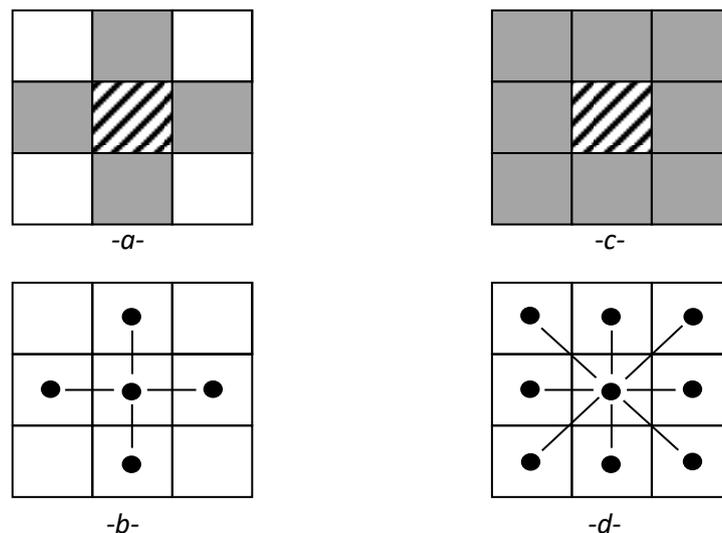


Fig. 3.1 – Représentation d'un automate cellulaire (a et c) et graphes de voisinage correspondants (b et d).

- Plusieurs variables décrivant ses propriétés physiques et thermodynamiques, par exemple sa température, sa concentration en soluté, ...etc..
- Son état et l'état de ses voisins à chaque instant  $t$ . On distingue trois classes de cellules : cellules solides, cellules liquides et cellules d'interface (solide + liquide).
- Une règle de transition. Au cours de la solidification, chaque cellule peut changer son état. Ce changement est pris en compte en considérant une fonction de la fraction solide correspondant à plusieurs valeurs possibles: 1 pour les cellules solides, 0 pour les cellules liquides et une valeur intermédiaire appartenant à l'intervalle ouvert  $]0,1[$  pour les cellules d'interface.

Dans le cas d'une configuration bidimensionnelle, la règle de transition appliquée, pour les deux types de voisinage possibles, est de la forme suivante :

- voisinage de Von Neumann :

$$a_{i,j}^{t+\Delta t} = f(a_{i-1,j}^t, a_{i+1,j}^t, a_{i,j}^t, a_{i,j-1}^t, a_{i,j+1}^t)$$

Où  $a_{i,j}^t$  est l'état de cellule, indiquée par  $(i, j)$ , au temps  $t$ ,  $f$  est une fonction déterminant la règle de transition, elle doit être choisie soigneusement afin de refléter l'objectif de la simulation du phénomène physique.

- voisinage de Moore :

$$a_{i,j}^{t+\Delta t} = f(a_{i-1,j-1}^t, a_{i-1,j}^t, a_{i-1,j+1}^t, a_{i,j-1}^t, a_{i,j}^t, a_{i,j+1}^t, a_{i+1,j-1}^t, a_{i+1,j}^t, a_{i+1,j+1}^t)$$

	$(i - 1, j)$	
$(i, j - 1)$	$(i, j)$	$(i, j + 1)$
	$(i + 1, j)$	

(a)

$(i - 1, j - 1)$	$(i - 1, j)$	$(i - 1, j + 1)$
$(i, j - 1)$	$(i, j)$	$(i, j + 1)$
$(i + 1, j - 1)$	$(i + 1, j)$	$(i + 1, j + 1)$

(b)

Fig. 3.2 – Application de la règle de transition sur les configurations de Von Neumann (a) et Moore (b)

## II. 2 Principe de la méthode CA

D'une manière générale, le principe de la méthode consiste à diviser un domaine de calcul entier en un réseau de cellules (solides, liquides et d'interface) formant ainsi un maillage. L'interface liquide - solide est supposée se situer dans les cellules d'interface. Les équations gouvernantes de la température et de la concentration de soluté sont résolues dans tout le domaine. La fraction solide dans les cellules d'interface est mise à jour chaque fois que la température et la concentration en soluté sont modifiées. Lorsque la fraction solide dans les cellules d'interface est mise à 1, elles sont définies comme étant des cellules solides. Les nouvelles cellules solidifiées captureront certaines cellules liquides voisines selon certaines règles et les définiront comme des cellules d'interface. Il est alors clair que l'algorithme entier pour la résolution par la méthode CA se compose de trois parties :

- a) résoudre les équations gouvernantes de température et de concentration de soluté,
- b) mettre à jour la fraction solide dans les cellules d'interface,
- c) capturer les cellules liquides voisines des nouvelles cellules solidifiées en tant que cellules d'interface.

Un exemple d'un automate cellulaire utilisé pour la modélisation de la croissance des grains est représenté sur la figure 3.3.

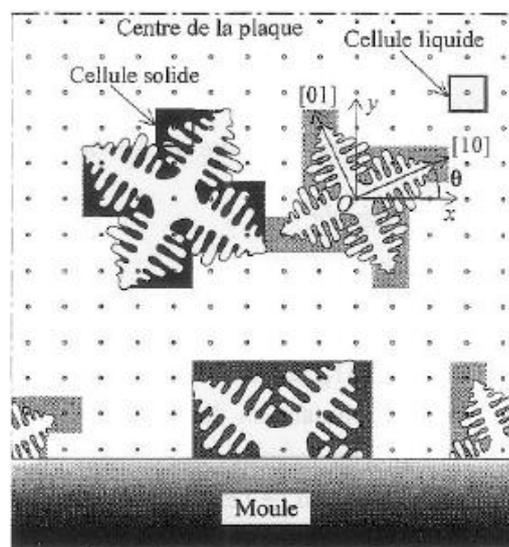


Fig. 3.3 – Schéma représentatif d'une partie d'un maillage d'automate cellulaire en 2D. La dégradation de la couleur gris nous permis de distingué l'état de cellule (Rappaz, 1993).

Parmi les modèles CA, deux types principaux ont été largement développés pour traiter la croissance dendritique : ceux basés sur des solutions analytiques de croissance dendritique et ceux basés sur des solutions numériques des équations de transport y compris les conditions aux limites à l'interface liquide - solide (Beltran-Sanchez, 2003). Dans le premier type de modèles (Rappaz, 1993; Zhu, 2001, Zhu Kim, 2001; Zhu, 2002), les auteurs résolvent, numériquement, les équations de chaleur et de diffusion sur tout le domaine CA. Les valeurs obtenues de la température et de la composition équivalentes à chaque point de maillage sont, ensuite, utilisées pour déterminer la surfusion locale correspondante à une valeur unique de la vitesse de l'interface liquide - solide. La détermination de la vitesse en fonction de la surfusion se fait analytiquement à l'aide des modèles théoriques, le modèle KGT (Kurz-Giovanola-Trivedi) (Kurz-Giovanola, 1986) est le plus souvent utilisé.

Dans le deuxième type (Sasikumar, 1994; Nastac, 1999; Daming, 2004, Zhu, 2004; Ying, 2006, Zhan, 2008; Luo, 2013), les modèles sont basés sur une solution complète des équations de transport y compris des conditions aux limites à l'interface liquide - solide définissant le problème de la croissance dendritique. Dans ce cas, la vitesse est obtenue des conditions d'équilibre de l'interface, c'est à dire en considérant l'équilibre local ainsi que la conservation de chaleur et de soluté à l'interface liquide – solide qui évolue au cours du processus. Les équations de conservation sont résolues indépendamment pour chaque phase, puis reliées ensemble par le coefficient de partition à l'interface.

## II. 3 Historique de la méthode CA

L'algorithme CA, établi par Von Neumann en 1940 pour reproduire les phénomènes physiques complexes avec de simples règles, a été utilisé, durant les dernières décennies du siècle dernier, dans la science des matériaux et surtout appliqué dans la solidification et la recristallisation (Zhan, 2008). Hesselbarth et Göbel (Hesselbarth, 1991) ont été les premiers à utiliser la méthode CA dans le domaine des matériaux. Ils ont simulé la cinétique de germination et de croissance des grains lors de la recristallisation statique d'un métal déformé à froid. Brown et al. (Brown, 1994) et Sasikumar et al. (Sasikumar, 1994) ont essayé de simuler une dendrite thermique en utilisant la méthode CA.

La croissance des dendrites solutales a été, aussi, prise en compte dans la simulation en utilisant la méthode CA. Notons que nous nous intéressons qu'aux travaux axés sur

l'évolution des grains et des dendrites en absence de la convection. Rappaz et Gandin (Rappaz, 1993 ; Gandin, 1994 ; Gandin, 1995 ; Gandin, 1997) ont utilisé la méthode CA pour simulé et décrire, pour la première fois, la formation de grains dendritiques lors de la solidification. Ils ont proposé une approche 2D, qui tient compte de la germination hétérogène et de la cinétique de croissance, pour modéliser la croissance anisotrope des grains d'un alliage binaire Al-7%pds Si en utilisant des lois de probabilité (Von Neuman ou Moore) pour la capture des cellules voisines (Rappaz, 1993). Ensuite, ils ont proposé un couplage CA-FE entre la méthode CA et un solveur éléments finis (FE) basé sur une méthode enthalpique pour résoudre le problème thermique (Gandin, 1994). Cette amélioration de la technique CA a permis de valider l'approche CA-FE par une comparaison des résultats obtenus avec les observations expérimentales de la solidification dirigée dans un dispositif de type Bridgmann d'un alliage organique et la solidification unidirectionnelle d'un alliage Al-7%pds Si. Une comparaison qualitative des résultats de simulation avec une solution analytique a été présentée par la suite (Gandin, 1995).

Ensuite, Spittle et Brown (Spittle, 1995) ont proposé une nouvelle méthode de couplage CA-FD entre la méthode CA et le maillage des différences finies (FD) pour la diffusion du soluté durant la solidification des alliages pour prédire leurs structures dendritiques. Dans leur modèle, chaque cellule individuelle a, seulement, deux états, solide ou liquide, en donnant un suivi discret du mouvement de l'interface. Nastac (Nastac, 1999) a appliqué une technique de suivi de front (Front Tracking en anglais) (FT) à variable continue pour permettre une évolution progressive de la fraction solide à travers chaque cellule de croissance. Cette nouvelle technique tient en compte les calculs couplés, en fonction du temps, des équations de transport thermique et solutal, la courbure de l'interface et des calculs de l'anisotropie de croissance. Selon Nastac, le modèle est capable de simuler non seulement l'évolution des morphologies dendritiques (colonnaire et équiaxe) mais aussi la transition colonnaire - équiaxe (CET). Il permet, aussi, l'analyse des effets des surfusions solutale et de la courbure sur l'évolution morphologique et les modèles de ségrégation durant la solidification des alliages binaires.

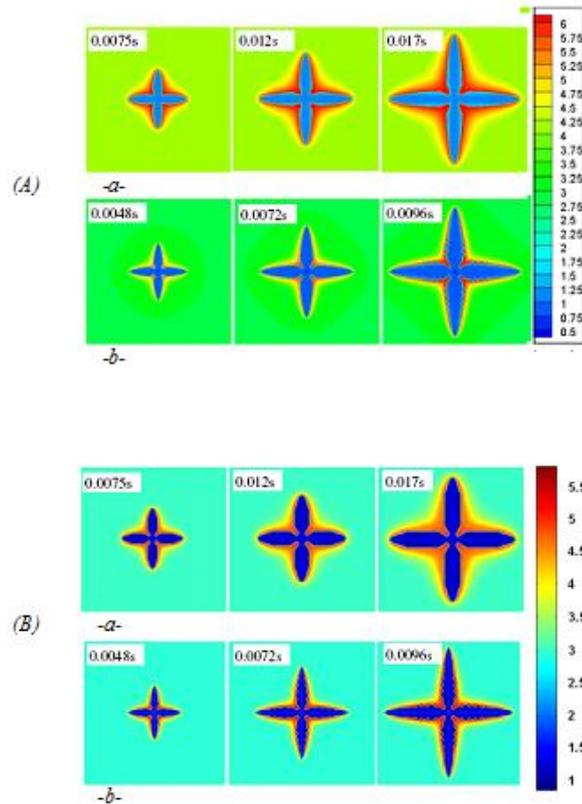


Fig. 3.4 – Distribution du soluté à différentes valeurs du temps de calcul en utilisant la méthode CA-FE (A) et la méthode PF-FE (B) avec une orientation de croissance privilégiée  $0^\circ$  par rapport à l'horizontale pour (a) transport solutale seulement (le gradient de température est constant) et (b) avec un gradient de température de  $400\text{K/m}$  imposé aux limites (Zaeem, 2013).

Cependant, la méthode CA est plus rapide et peut être incorporée dans un PC. Elle produit des résultats similaires à ceux de la méthode PF (Choudhury, 2012 ; Zaeem, 2012 ; Zaeem, 2013). Une représentation des résultats obtenus de la simulation de la croissance dendritique d'un métal cubique lors de la solidification en utilisant les deux modèles CA-FE et PF-FE est illustrée sur la Figure 3.4. Le domaine de calcul considéré est un domaine carré de  $90\mu\text{m} \times 90\mu\text{m}$  contenant un alliage binaire Al-3%Cu avec une température initiale de chaque cellule  $930\text{K}$ .

Malgré l'efficacité du calcul, lors de l'exécution du modèle CA, un important problème, qui est considéré comme un inconvénient, a été identifié au début du développement de la méthode et rester presque sans solution surtout lorsqu'on simule la croissance des grains ou des dendrites à des différentes orientations (Sasikumar, 1994). En effet, l'utilisation d'un maillage cartésien du domaine de calcul, pour suivre l'évolution de la croissance dendritique, donne une évidente simplicité de l'organisation des règles de la

méthode CA et permet de simuler la diffusion de soluté, mais elle provoque une anisotropie artificielle, indésirable, sur la direction et la cinétique de croissance. Son effet sur la direction de croissance était en forçant la croissance dendritique à s'aligner avec les axes du maillage ( $0^\circ$ , à une cellule voisine plus proche) ou à  $45^\circ$  (à coté de la cellule la plus proche voisine) indépendamment de l'orientation cristallographique initiale. Un autre effet est l'effet sur la cinétique de croissance. Il a été remarqué que même sur les dendrites alignées avec les axes auraient des pointes plus étroites que prévu par les théories classiques (Marek, 2013, Reuther, 2014). La simulation dendritique a attiré beaucoup d'intérêt afin d'éliminer l'effet de l'anisotropie.

### **III. CORRECTION DE L'ANISOTROPIE ARTIFICIELLE**

La réalisation de la simulation de la croissance des grains suivant une direction de croissance stochastique, en considérant la configuration de Von Neumann pour la capture des cellules plus proches voisines, est difficile car la procédure perd habituellement l'orientation cristallographique originale du germe. Pour les métaux cubiques (système 2D), les directions préférentielles de croissance sont les orientations cristallographiques  $\langle 10 \rangle$  comme le montre la figure 3.5. Pour un germe dont l'orientation initiale  $\langle 10 \rangle$  fait un angle  $\theta$  par rapport à la direction  $x$ , le processus de croissance prévu est celui montré dans la figure 3.5b. Cependant, le processus de croissance suit la situation de la figure 3.5c (Zhan, 2008). C'est-à-dire que, dans la procédure de simulation CA, la direction de croissance du grain correspond aux directions du réseau CA et non pas aux orientations cristallographiques initiales  $\langle 10 \rangle$  du germe en raison du principe de croissance CA dans lequel une cellule affecte et est affecté par ses voisins les plus proches.

Par conséquent, bien que l'orientation des axes cristallographiques du germe ait un angle de désorientation par rapport au réseau CA, seuls quatre voisins les plus proches sont dans la direction de croissance et les cellules sur la ligne d'orientation des axes cristallographiques ne sont pas affectées par le germe au moment approprié, Comme le montre la figure 3.5c.

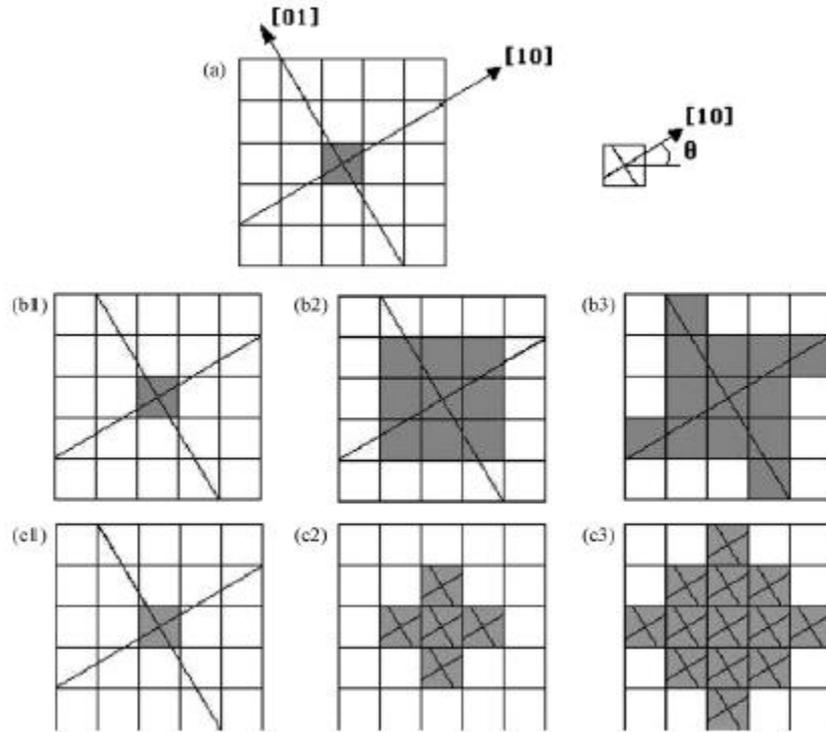


Fig. 3.5 – Schémas pour la croissance des germes dont la direction cristallographique a un angle de divergence par rapport à la grille (a) définition de l'angle; (b) processus de croissance attendu; (C) processus de croissance résultant (Zhan, 2008).

Plusieurs tentatives de corrections ont été apportées, pour éliminer l'anisotropie artificielle et résoudre le problème de changement des orientations de croissance au cours des quinze dernières années, mais sans résultats importants. Le problème d'élimination de l'influence de l'anisotropie du réseau CA s'est alors réduit à la conception d'algorithmes de capture des cellules voisines vis à vis d'une cellule spécifique lorsque la configuration de Von Neumann est considérée. Néanmoins, ils existent deux propositions : celle de Marek (Marek, 2013) et celle de Zinovieva et al. (Zinovieva Zinoviev, 2015), qui ont considéré la configuration de Moore dans la définition du voisinage, sans toute fois arriver à éliminer l'anisotropie artificielle.

### III. 1 Correction apportée par Gandin et Rappaz

Pour résoudre le problème de l'anisotropie artificielle et le changement des orientations de croissance, Rappaz et Gandin (Rappaz, 1993) ont développé une méthode carrée décentrée basée sur une technique de correction de la pointe de la dendrite. A un certain moment de la simulation de la croissance dendritique, on remarque que les cellules sont

toujours à l'état liquide malgré qu'elles doivent changer d'état pour devenir des cellules d'interface ou solides. Ces cellules sont considérées et mises à jour à l'état qu'elles devraient être, c'est la technique de correction de pointe de dendrite. Cette mise à jour est exécutée à chaque pas de temps pendant le processus de simulation. La technique est compliquée et prend du temps malgré qu'elle a été proposée pour être appliqué uniquement à des températures uniformes. Pour cette raison, une nouvelle procédure a été développée par Gandin et Rappaz (Gandin, 1994), définie par l'algorithme rectangulaire bidimensionnel (2D). Cette technique peut être utilisée pour n'importe quel champ de température, mais il est difficile de l'étendre au cas 3D. C'est pourquoi Gandin et Rappaz (Gandin, 1997) ont construit un algorithme décentré carré qui était trop compliqué à exécuter et présente l'inconvénient que les résultats simulés demeurent influencés par l'anisotropie artificielle.

### III. 2 Correction apportée par la méthode des maillages multicouches (Zhan, 2008)

Zhan et al. (Zhan, 2008) ont élaboré une méthode à angle limité. Ils ont utilisé des maillages multicouches pour simuler la croissance des grains dont les orientations cristallographiques ont des angles différents par rapport au réseau CA (des orientations stochastiques). Les auteurs ont considéré une configuration de voisinage de Von Neumann dans une grille carré. L'angle formé entre l'orientation cristallographique préférentielle de ce germe et la direction  $x$  (Fig. 3.6) peut être déterminé par:

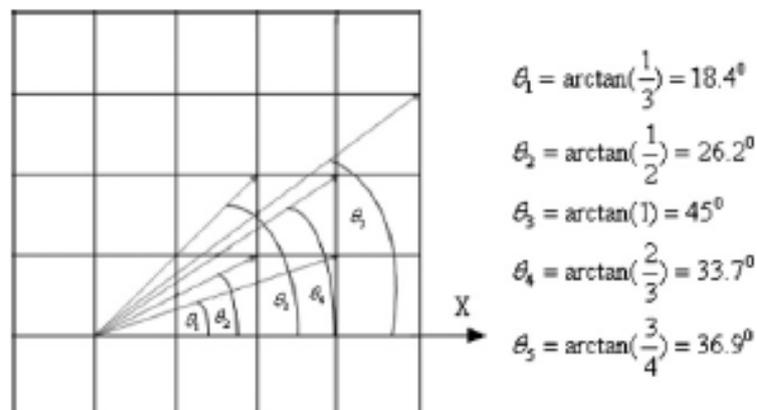


Fig. 3.6 – Représentation de différents angles par rapport au réseau CA

$$\theta = \arctan\left(\frac{n}{m}\right) \quad n, m = 1, 2, \dots (n < m)$$

Où  $n$  et  $m$  sont des nombres naturels déterminés au hasard. Lorsque  $n$  et  $m$  changent aléatoirement,  $\theta$  change de  $0^\circ$  à  $45^\circ$ .

Comme les valeurs grandes de  $n$  et  $m$  rendent l'exécution du calcul trop compliquée à réaliser, les auteurs ont considéré un nombre limité de valeurs de  $n$  et  $m$ . Afin de simuler les différents angles de directions préférentielles de croissance, plusieurs grains sont considéré avec des valeurs différentes de  $\theta$  situés aux nœuds et non au centre des cellules d'où la nécessité d'un maillage multicouches.

Un grain, et ainsi un angle de divergence  $26.56^\circ = \arctan(1/2)$ , est considéré par les auteurs (voir Fig. 3.7). Dans la ligne d'orientation des axes cristallographiques, la distance entre les deux nœuds les plus proches est  $\sqrt{5}a$ . Dans la simulation du processus de croissance de ce grain, ils utilisent un maillage à deux couches. Si un nœud est dans la ligne de l'orientation des axes cristallographiques, les quatre cellules d'origine autour de ce nœud sont considérées comme une nouvelle cellule. Évidemment, la longueur du côté de cette nouvelle cellule est  $2a$ . Une fois que quatre cellules les plus proches sont considérées comme une nouvelle cellule, elles ont des valeurs uniformes de paramètres qui appartiennent à la cellule d'origine. Chacune de ces nouvelles cellules comprend quatre cellules d'origine. Ces nouvelles cellules seront appelées nouvelles cellules maximales. Seulement si l'un des quatre nœuds d'une cellule originale est sur la ligne d'orientation des axes cristallographiques, cette cellule originale est incluse dans la nouvelle cellule maximale. Pour les autres cellules qui n'ont pas été incluses dans les nouvelles cellules maximales, c'est la fraction solide qui décide de leurs états.

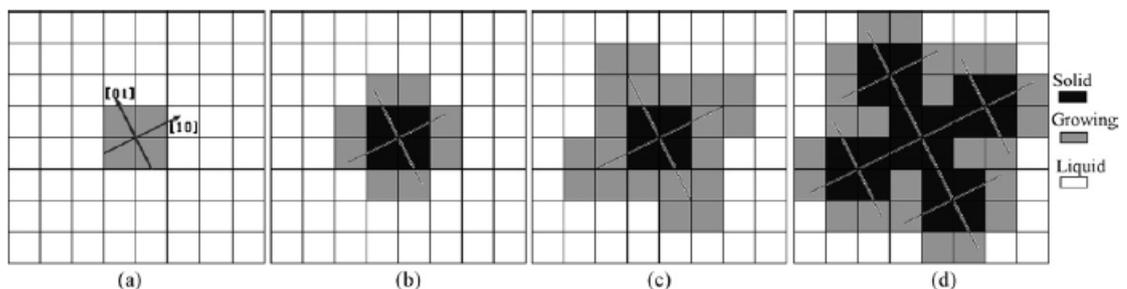


Fig. 3.7 – Procédure de croissance d'un germe dont la direction cristallographique a un angle  $26.56^\circ$  par rapport à la direction  $x$ .

La méthode est très simple à mettre en œuvre et efficace en considérant la croissance d'une seule ou multiple dendrites avec différentes orientations de croissance. Cependant, un inconvénient de l'approche est que les simulations prennent beaucoup de temps à cause du maillage multicouches.

### III. 3 Correction apportée par la méthode de suivi virtuel de front

Stefanescu et al. (Beltran-Sanchez, 2003 ; Beltran-Sanchez, 2004 ; Zhu, 2007) ont appliqué un modèle de suivi virtuel de front (Virtual Front Tracking en anglais) (VFT) pour éliminer l'anisotropie artificielle introduite en utilisant une grille rectangulaire lors de la simulation de la croissance dendritique durant la solidification des alliages binaires à de faibles valeurs de nombre de Péclet.

Beltran-Sanchez et Stefanescu (BSS) (Beltran-Sanchez, 2003 ; Beltran-Sanchez, 2004) ont développé des modèles adoptant la procédure classique de la méthode CA, donnée par Nastac (Nastac, 1999), en calculant la cinétique de croissance des solutions complètes des équations de transport thermique et solutal et en considérant les conditions aux limites pour la conservation de soluté. Un couplage de la méthode CA et le solveur FD a été considéré pour la résolution des équations.

Dans leur premier modèle (Beltran-Sanchez, 2003), Beltran-Sanchez et Stefanescu ont proposé une solution pour éliminer l'anisotropie artificielle introduite par la grille pour la croissance d'une dendrite à  $0^\circ$  et  $45^\circ$  par rapport aux axes de la grille et ils ont présenté, également, une solution pour le calcul de la courbure locale pour éliminer la dépendance des calculs au maillage. Pour ces raisons, ils ont développé une procédure dans laquelle l'augmentation de la fraction solide dans une cellule interface a été calculée à partir des composantes de la vitesse normale de l'interface établie en fonction des flux de soluté dans le liquide et le solide. Ce changement a été utilisé pour déterminer une nouvelle méthode de capture du voisinage. Dans leur nouvelle formulation, un voisinage est défini par un ensemble de quatre cellules centré sur un site dans la direction cristallographique de la croissance de la dendrite (Fig. 3.8.a) formant, ainsi, un bloc de construction. La capture de nouvelles cellules d'interface se fait lorsque toutes les cellules du bloc sont à l'état solide. Ainsi, toutes les cellules liquides voisines sont prises comme des cellules d'interface (Fig. 3.8.b).

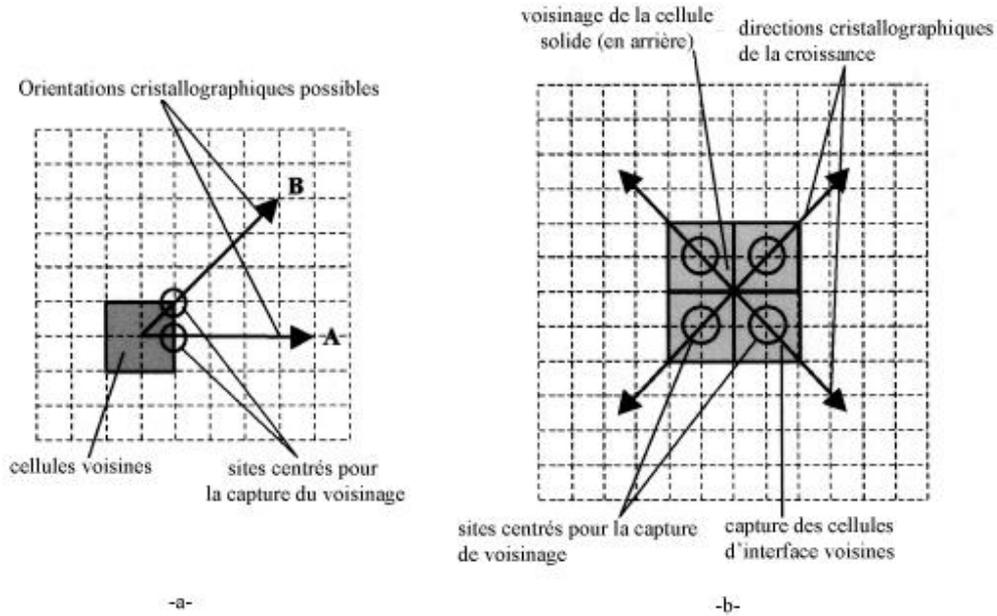


Fig. 3.8 – Définition de la méthode de capture des cellules voisines durant la solidification. (a) Définition du voisinage autour d'un point centré permettant la croissance suivant deux orientations cristallographiques possibles (A et B). (b) Capture des quatre nouvelles cellules d'interface voisines, après que l'ancien voisinage a changé d'état pour devenir solide, pour une dendrite croissant dans la direction B (indiquée sur la figure a). (Beltran-Sanchez, 2003).

Se basant sur leurs résultats (Beltran-Sanchez, 2003) et leurs discussions (Beltran-Sanchez, 2004), malgré que la méthode de capture proposée par (Beltran-Sanchez, 2003) couvre plusieurs cellules en une seule exécution, les directions  $0^\circ$  et  $45^\circ$  restent dominantes. Même si on admet que ces directions ont été choisies, par les auteurs, comme directions de croissance, l'anisotropie n'a pas été éliminée totalement.

Dans une nouvelle tentative, Beltran-Sanchez et Stefanescu (Beltran-Sanchez, 2004) ont proposé des améliorations dans les méthodes de calcul de la vitesse et de la fraction solide et ont utilisé un ensemble différent de règles de capture, toujours basé sur un suivi virtuel de l'interface. Une fois que la nouvelle fraction solide est calculée, un balayage de cellules se fait afin de déterminer les nouvelles cellules d'interface. La capture des cellules liquides est effectuée par une méthode d'interpolation entre les points localisant l'interface réelle. L'interface liquide – solide est uniquement reconstruite à la fin de la capture au niveau de chaque position des cellules d'interface. Les auteurs ont estimé qu'étant donné que cette méthode était basée sur l'interface mobile dans la direction de sa normale locale, elle a réduit, de manière significative, l'anisotropie artificielle sans toute fois l'éliminer complètement.

Reuther et Rettenmayr (Reuther, 2014) croient qu'avec l'approche développée par Beltran-Sanchez et Stefanescu (Beltran-Sanchez, 2004), l'anisotropie artificielle affecte le modèle de la croissance dendritique.

Plus récemment, Zhu et Stefanescu (Zhu, 2007) ont adopté le même modèle BSS (Beltran-Sanchez, 2004) pour capturer explicitement les nouvelles cellules d'interface. Dans leur modèle, le processus de la croissance dendritique est contrôlé par la différence entre la composition locale d'équilibre du liquide à l'interface et la composition locale réelle du liquide. La fraction solide calculée est utilisée pour déterminer la vitesse et la morphologie de croissance dendritique. Le modèle a non seulement les capacités quantitatives pour les prévisions de croissance des dendrites dans la solidification des alliages, mais aussi il est capable de reproduire des caractéristiques très réalistes de la croissance dendritique pour les deux types de dendrites équiaxe et colonnaire. Malgré ces capacités, l'anisotropie semble toujours présente.

### III. 4 Corrections apportées par la modification de la redistribution de soluté (Krane, 2009)

L'anisotropie artificielle est introduite aux calculs lors de l'addition du solide et la redistribution de soluté durant le changement de phase. Le premier problème se produit parce que le solide ne peut être ajouté qu'aux voisins les plus proches (le long de  $0^\circ$ ) ou les prochains plus proches voisins (le long de  $45^\circ$ ) en raison de la grille discrète. Si la quantité de solide prédite pour la croissance est la même pour un pas de temps donné en deux cellules, l'une à  $0^\circ$  et l'autre à  $45^\circ$ , la vitesse effective de croissance est plus rapide le long de  $45^\circ$  que le long de  $0^\circ$ , car la distance entre une cellule solide et une cellule à coté de la plus proche voisine (le long de  $45^\circ$ ) est plus grande que celle entre la cellule solide et la plus proche voisine (le long de  $0^\circ$ ). Dans le cas où la vitesse de croissance est la même dans toutes les directions (cas isotrope), la forme des grains doit être un cercle (Fig. 3.9). La zone occupée par le solide dans une cellule à coté de plus proche voisin correspond à 55% de la surface occupée par le solide dans une cellule proche voisine. Pour cette raison, un facteur de 0.55 est ajouté à la fraction solide estimée pour une cellule interface.

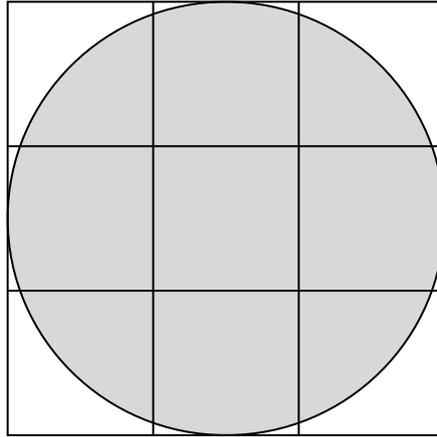


Fig. 3.9 – Zones occupées par le solide représentées par un cercle.

Le deuxième problème se produit en raison de la redistribution de soluté aux cellules liquides voisines. Pour la même raison précédente (distance entre une cellule solide et une cellule à côté de la plus proche voisine est plus grande que celle entre la cellule solide et la plus proche voisine), la redistribution de soluté doit être considérée isotrope. La quantité de soluté diffusée vers une nouvelle cellule à côté de la plus proche voisine doit être 0.55 fois celle vers un voisin plus proche. Par conséquent, la concentration des cellules à côté des plus proches voisins après une redistribution est donnée par :

$$c_l^{NNN} = c_l + 0.55(c_l^* - c_l)$$

Où  $c_l$  la composition du liquide de la cellule avant la redistribution de soluté (composition initiale).

Pour tester l'effet des corrections des deux problèmes, déjà discutés, des simulations ont été réalisées pour la solidification directionnelle d'un alliage Pb-5wt%Sn avec une orientation de  $20^\circ$  par rapport au gradient thermique (qui est à la direction verticale) (Fig. 3.10). Il a été observé que sans corrections, les dendrites se développent initialement à  $20^\circ$  et se déplacent lentement à  $25^\circ$ . Mais lorsque les corrections sont appliquées, la croissance des dendrites est maintenue à  $20^\circ$  (Fig. 3.10). Cependant, avec corrections, l'anisotropie artificielle est réduite mais pas complètement éliminée.

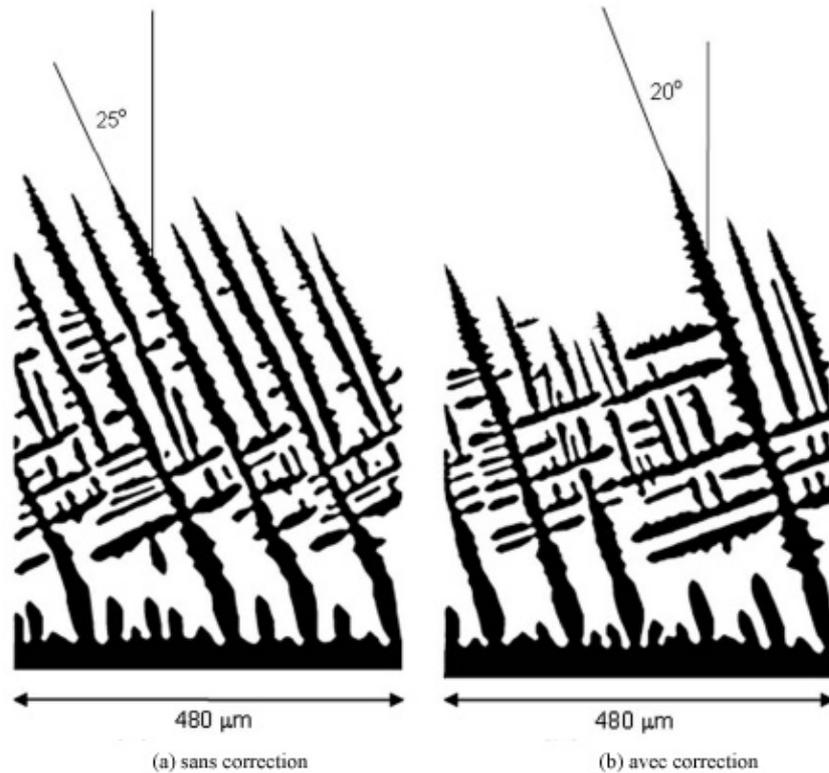


Fig. 3.10 – Simulation de la croissance dendritique d’un alliage Pb-5wt%Sn montrant (a) présence et (b) réduction de l’anisotropie artificielle lors de la simulation sans (a) et avec (b) considération des corrections. L’orientation cristallographique préférée est 20° (Krane, 2009)

### III. 5 Correction apportée par la technique de rotation de la grille (Ying, 2006)

Le modèle proposé par Ying et al. (Ying, 2006) est basé sur la méthode classique CA. Il tente d’obtenir une morphologie précise d’une dendrite par la résolution des équations de conservation thermique et solutale, à l’interface et en considérant d’autres importants facteurs comme la fraction solide, la vitesse de la pointe et le processus de diffusion de soluté. La capture des cellules d’interface se fait par les procédures de germination et de croissance des grains.

Afin d’éliminer l’anisotropie artificielle, les auteurs ont utilisé une technique de rotation avec une transformation des coordonnées. La direction de la croissance de la grille est ajustée pour coïncider avec l’orientation de croissance cristallographique privilégiée (Fig. 3.11).

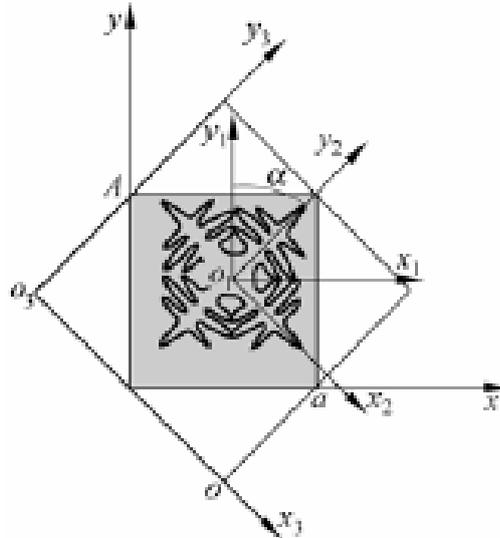


Fig. 3.11 – Principe de la technique de rotation durant la croissance dendritique (Ying, 2006)

Un domaine de calcul de taille  $a$ , représenté en gris, est considéré. Au début de la simulation, un germe solide (centre de la dendrite) est supposé être un point de coordonnées  $(x_0, y_0)$  est localisé au centre du domaine. La technique de rotation est effectuée en suivant les étapes :

- (1) le germe solide  $(x_0, y_0)$  est considéré comme origine du système de coordonnées  $xoy$ ,
- (2) faire tourner le système de coordonnées  $x_1o_1y_1$  par un angle d'orientation  $\alpha$ ,
- (3) remplacer le système de coordonnées  $x_2o_1y_2$  par le système  $x_3o_3y_3$  à travers les points  $0$  et  $a$  et mettre en place les grilles dont les axes de directions correspondent aux directions préférées,
- (4) marquer les grilles dans le système  $x_3o_3y_3$  couvertes par le domaine de calcul en gris,
- (5) calculer les résultats dans le système  $x_3o_3y_3$  et transformer les coordonnées du système  $x_3o_3y_3$  au système  $xoy$  en utilisant les équations suivantes :

$$x = x_0 + [x_3 - (a - y_0) \sin \alpha - x_0 \cos \alpha] \cos \alpha + [y_3 - (y_0 \cos \alpha + x_0 \sin \alpha)] \sin \alpha$$

$$y = y_0 + [y_3 - (y_0 \cos \alpha + x_0 \sin \alpha)] \cos \alpha - [x_3 - (a - y_0) \sin \alpha - x_0 \cos \alpha] \sin \alpha$$

Une simulation de la croissance dendritique d'un alliage Al-4.5wt%Cu a été réalisée en utilisant la technique de rotation. Malgré que les résultats obtenus ont été en accord avec les mesures expérimentales et théoriques, l'anisotropie artificielle n'a pas été éliminée complètement.

### III. 6 Correction apportée par Marek (Marek, 2013)

Pour résoudre le problème de l'anisotropie artificielle, Marek (Marek, 2013) a élaboré une nouvelle méthode appelée GARED (Growth Anisotropy Reduction with Diffusion Method) qui impose une diffusion supplémentaire pour contrôler le taux de croissance du grain.

La fonction introduite pour mettre en échelle la vitesse d'interface du grain dépend d'un paramètre numérique  $\varphi$  obtenu à partir d'une solution de différence finie (FD) de l'équation de diffusion et défini en un point. Ainsi, le domaine de calcul est caractérisé par un champ pilote  $\varphi_{i,j}$  qui est considéré comme étant une version étendue du champ d'état de la cellule. Le modèle résultant démontre la capacité de la méthode pour simuler la croissance anisotrope avec un effet de maillage réduit. Le principal avantage de la nouvelle méthode est sa simplicité. Du point de vue numérique, seule la mise en œuvre d'un schéma explicite de différences finies pour l'équation de diffusion est nécessaire, à côté du modèle classique CA. Une conséquence importante est qu'une réduction réussie de l'anisotropie artificielle est atteinte sans introduire de variations dans les règles de capture de cellule ou de suivi de front. Puisque les résultats ont été obtenus à l'aide de maillages à très haute résolution, seuls les stades de croissance des dendrites précoces ont été discutés, et seule une croissance de dendrite unique a été simulée.

### III. 7 Corrections apportées par Zinovieva et al. (Zinovieva, 2015)

Zinovieva et al. (Zinovieva, 2015) ont construit un nouveau modèle CA à 2D basé sur l'approche développée par Rappaz et Gandin (Rappaz, 1993). Les améliorations proposées dans l'algorithme de base reposent sur des corrections, pour la procédure de croissance de grain utilisée, pour minimiser l'anisotropie artificielle introduite par la grille. Pour des différents objectifs, les auteurs ont considéré deux types de voisinage: le voisinage de Moore de second et troisième ordre et le voisinage de Von Neumann de premier ordre. Les voisinages de second et troisième ordre de Moore comprennent respectivement 24 et 48 cellules entourant la cellule spécifique.

Un grain est supposé germer dans une cellule d'index  $i$ , la cellule  $i$  est à l'état liquide et a la tendance à se transformer. Elle est, alors, considérée comme étant une cellule de croissance. L'orientation cristallographique [10] de cette cellule, à un certain temps, forme un angle  $\theta$  avec l'axe  $x$  ( $0^\circ < \theta < 45^\circ$ ) (Fig. 3.12. a)

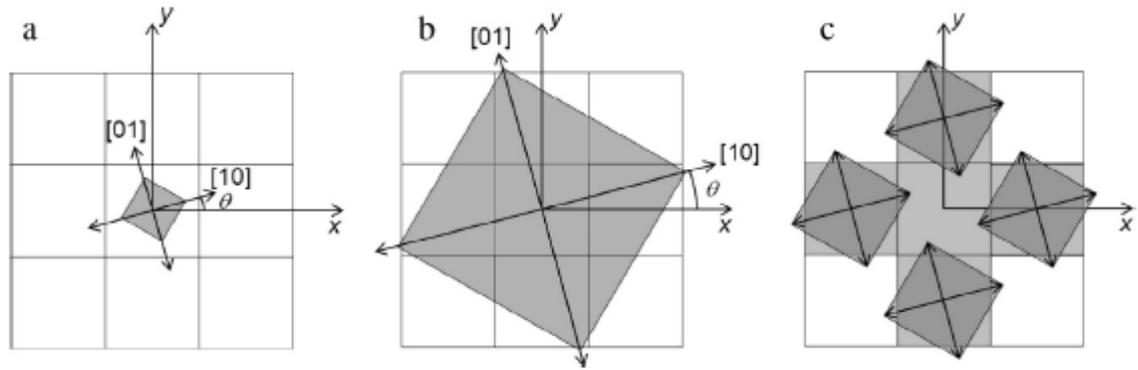


Figure. 3.12 – Représentation de la croissance d'un seul grain.

Le site de germination  $i$ th a quatre directions de croissance perpendiculaires l'une par rapport à l'autre et quatre vecteurs (vecteurs de croissance) associés à ces directions (Fig. 3.12. b). La première direction de croissance est alignée avec la direction préférée [10]. Pour chaque pas de temps, une ligne droite relie les extrémités des vecteurs (Fig. 3.12. c), et les centres des cellules voisines sont vérifiés pour être dans la zone de croissance du grain  $i$ th. Si le centre de la cellule voisine  $j$ th se trouve à l'intérieur d'un grain  $i$ th, la cellule  $j$ th rejoint le grain  $i$ th et hérite de son orientation cristallographique et de son index. De nouvelles cellules en croissance se développent selon le même algorithme. Lorsque toutes les cellules voisines rejoignent le germe (centre de croissance parent), ce dernier cesse de croître.

Des calculs CA à 2D de grains simples avec différentes orientations cristallographiques et de structures polycristallines ont été réalisés. Les résultats de simulation obtenus pour les cas de croissance monocristalline et d'évolution de la structure polycristalline lors de la solidification d'alliages ont démontré que les corrections proposées permettent de résoudre le problème d'anisotropie artificielle.

### RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 3

**(Dongke, 2016):** S. Dongke, P. Shiyan, H. Qinyou and S. Baode; Numerical Simulation of Dendritic growth in Directional Solidification of Binary Alloys Using a Lattice Boltzmann Scheme, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 103, pp. 821-831.

**(Zyska, 2016):** A. Zyska, Z. Konopka, M. Lagiewka and M. Nadolski; Modelling of the Dendritic Crystallization by the Cellular Automaton Method, *Archives of Foundry Engineering*, Vol. 16, pp. 99-106.

**(Zinovieva, 2015):** O. Zinovieva, A. Zinoviev, V. Ploshikhin, V. Romanova and R. Balokhonov; Two Dimensional Cellular Automata Simulation of Grain Growth during solidification and recrystallization, *Materials Science and Engineering*, Vol. 71, 012073.

**(Zinovieva Zinoviev, 2015):** O. Zinovieva, A. Zinoviev, V. Ploshikhin, V. Romanova and R. Balokhonov; A Solution to the Problem of the Mash Anisotropy in Cellular Automata Simulations of Grain Growth, *Computational Materials Science*, Vol. 108, pp. 168-176.

**(Cartalade, 2014):** A. Cartalade, A. Younsi, E. Régnier and S. Schuller; Simulations of Phase-Field Models for Crystal Growth and Phase Separation, *Procedia Materials Science*, Vol. 7, pp. 72-78.

**(Reuther, 2014):** K. Reuther and M. Rettenmayr; Perspectives for Cellular Automata for the Simulation of Dendritic Solidification – A Review, *Computational Materials Science*, Vol. 95, pp. 213-220.

**(Shah, 2014):** A. Shah, A. Haider and S. K. Shah; Numerical Simulation of Two-Dimensional Dendritic Growth Using Phase-Field Model, *World Journal of Mechanics*, Vol. 4, pp. 128-136.

**(Luo, 2013):** S. Luo, M. Y. Zhu; A Two-Dimensional Model for the Quantitative Simulation of the Dendritic Growth with Cellular Automaton Method, *Computational Materials Science*, Vol. 71, pp. 10-18.

**(Marek, 2013):** M. Marek; Grid Anisotropy Reduction for Simulation of Growth Processes with Cellular Automaton, *Physica D*, Vol. 253, pp. 73-84.

**(Zaeem, 2013):** M. A. zaeem, H. Yin and S. D. Felicelli; Modeling Dendritic Solidification of Al-3%Cu Using Cellular Automaton and Phase Field Methods, Applied Mathematical Modelling, Vol. 37, pp. 3495-3503.

**(Choudhury, 2012):** A. Choudhury, K. Reuther, E. Wesner, A. August, B. Nestler and M. Rettenmayr; Comparaison of Phase-Field and Cellular Automaton Models for Dendritic Solidification in Al-Cu Alloy, Computational Materials Science, Vol. 55, pp. 263-268.

**(Luo, 2012):** S. Luo, M. Zhu and S. Loukenkilpi; Numerical Simulation of Solidification Structure of High Carbon Steel in Continuous Casting Using Cellular Automaton Method, ISIJ International, Vol. 52, pp. 823-830.

**(Zaeem, 2012):** M. A. zaeem, H. Yin and S. D. Felicelli; Comparison of Cellular Automaton and Phase Field Models to Simulate Dendrite Growth in Hexagonal Crystals, Journal of Materials Science and Technology, Vol. 28, pp. 137-146.

**(Krane, 2009):** M. J. Krane, D. R. Johnson and S. Raghavan; The Development of a Cellular Automaton-Finite Volume Model for Dendritic Growth, Applied Mathematical Modeling, Vol. 33, pp. 2234-2247.

**(Yin, 2009):** H. Yin and S. D. Felicelli; A Cellular Automaton Model for Dendrite Growth in Magnesium Alloy AZ91, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 17, 075011.

**(Zhan, 2008):** X. Zhan, Y. Wei and Z. Dong; Cellular Automaton Simulation of Grain Growth with Different Orientation Angles during Solidification Process, Journal of Materials Processing Technology Vol. 208, pp. 1-8.

**(Zhu, 2007):** M. F. Zhu and D. M. Stefanescu; Virtual Front Tracking Model for the Quantitative Modeling of Dendritic Growth in Solidification of Alloys, Acta Materialia, Vol. 55, pp. 1741-1755.

**(Ying, 2006):** L. Ying, X. Qingyan and L. Baicheng; A Modified Cellular Automaton Method for the Modeling of the Dendritic Morphology of Binary Alloys, Tsinghua Science and Technology, Vol. 11, pp. 495-500.

**(Ramirez, 2005):** J. C. Ramirez and C. Beckermann ; Examination of Binary Alloy Free Dendritic Growth Theories with a Phase-Field Model, Acta Materialia, Vol. 53, pp. 1721-1736.

**(Beltran-Sanchez, 2004):** L. B. Sanchez and D. M. Stefanescu; A Quantitative Dendrite Growth Model and Analysis of Stability Concepts, Metallurgical and Materials Transactions A, Vol. 35, pp. 2471-2485.

**(Daming, 2004):** L. Daming, L. Ruo and Z. Pingwen; A New Coupled Model for Alloy Solidification, Science in China Ser. A Mathematics, Vol. 47, supp, pp. 41-52.

**(Ramirez, 2004):** J. C. Ramirez, C. Beckermann, A. Karma and H. J. Diepers ; Phase-Field Modeling of Binary Alloy Solidification with Coupled Heat and Solute Diffusion, Physical Review E, Vol. 69, 051607.

**(Zhu, 2004):** M. F. Zhu and C. P. Hong; Modeling of Dendritic and Eutectic Microstructures in Solidification of Aluminum Alloys, Materials Forum, Vol. 28, pp. 895-900.

**(Beltran-Sanchez, 2003):** L. B. Sanchez and D. M. Stefanescu; Growth of Solutal Dendrites: A Cellular Automaton Model and its Quantitative Capabilities, Metallurgical and Materials Transactions A, Vol. 34, pp. 367-382.

**(Lan, 2003):** C. W. Lan, Y. C. Chang and C. J. Shih; Adaptive Phase Field Simulation of Non-Isothermal Free Dendritic Growth of a Binary Alloy, Acta Materialia, Vol. 51, pp. 1857-1869.

**(Zhu, 2002):** M. F. Zhu and C. P. Hong; A Three Dimensional Modified Cellular Automaton Model for the Prediction of Solidification Microstructures, ISIJ International, Vol. 42, pp. 520-526.

**(Karma, 2001):** A. Karma; Phase-Field Formulation for Quantitative Modeling of Alloy Solidification, Physical Review Letters, Vol. 87, 115701.

**(Loginova, 2001):** I. Loginova, G. Amberg and J. Agren; Phase-Field Simulations of Non-Isothermal Binary Alloy Solidification, Acta Materialia, Vol. 49, pp. 573-581.

**(Zhu, 2001):** M. F. Zhu and C. P. Hong; A Modified Cellular Automaton Model for the Simulation of Dendritic Growth in Solidification of Alloys, ISIJ International, Vol. 41, pp. 436-445.

**(Zhu-Kim, 2001):** M. F. Zhu, J. M. Kim and C. P. Hong; Modeling of Globular and Dendritic Structure Evolution in Solidification of an Al-7mass%Si Alloy, ISIJ International, Vol. 41, pp. 992-998.

**(Boettinger, 2000):** W. J. Boettinger, S. R. Coriell, A. I. Greer, A. Karma, W. Kurz, M. Rappaz and R. Trivedi; Solidification Microstructures : Recent Developments. Future Directions, *Acta Materialia*, Vol. 48, pp. 43-70.

**(Nastac, 1999):** I. Nastac; Numerical Modeling of Solidification Morphologies and Segregation Patterns in Cast Dendritic Alloys, *Acta Materialia*, Vol. 47, pp. 4253-4262.

**(Charch, 1998):** C. Charach and P. C. Fife; Solidification Fronts and Solute Trapping in a Binary Alloy, *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Vol. 58, pp. 1826-1851.

**(Karma 1998):** A. Karma and W. J. Rappel; Quantitative Phase-Field Modeling of Dendritic Growth in Two and Three Dimensions, *Physical Review E*, Vol.57, pp. 4323-4349.

**(Gandin, 1997):** Ch. A. Gandin and M. Rappaz; A 3D Cellular Automaton Algorithm for the Prediction of Dendritic Grain Growth, *Acta Materialia*, Vol. 45, pp. 2187-2195.

**(Gandin, 1995):** Ch. A. Gandin, R. J. Schaffer and M. Rappaz; Analytical and Numerical Predictions of Dendritic Grain Envelopes, *Acta Materialia*, Vol. 44, pp. 3339-3347.

**(Spittle, 1995):** J. A. Spittle and S. G. R. Brown; A Cellular Automaton Model of steady – State Columnar – Dendritic Growth in Binary Alloys, *Journal of Materials Science*, Vol. 30, pp. 3989-3994.

**(Warren, 1995):** J. A. Warren and W. J. Boettinger; Prediction of Dendritic Growth and Microsegregation Patterns in a Binary Alloy Using the Phase-Field Method, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 43, pp. 689-703.

**(Brown, 1994):** S. G. R. Brown, T. Williams and J. A. A. Spittle; A Cellular Automaton Model of the Steady - State “Free” Growth of a Non - Isothermal Dendrite, *Acta Metallurgica*, Vol. 42, pp. 2893-2898.

**(Gandin, 1994):** Ch. A. Gandin and M. Rappaz; A Coupled Finite Element – Cellular Automaton Model for the Prediction of Dendritic Grain Structures in Solidification Processes, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 42, pp. 2233-2246.

**(Sasikumar, 1994):** R. Sasikumar and R. Sreenivasan; Two Dimensional Simulation of Dendrite Morphology, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 42, pp. 2381-2386.

**(Kobayashi, 1993):** R. Kobayashi; Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 63, pp. 410-423.

**(Rappaz, 1993):** M. Rappaz and Ch. A. Gandin; Probabilistic Modelling of Microstructure Formation in Solidification Processes, *Acta Metallurgica et Materialia*, Vol. 41, pp. 345-360.

**(Wheeler, 1992):** A. A. Wheeler, W. J. Boettinger and G. B. McFadden; Phase-Field Model for Isothermal Phase Transitions in Binary Alloys, *Physical Review A*, Vol. 45, pp. 7424-7439.

**(Hesselbarth, 1991):** H. W. Hesselbarth and I. R. Göbel; Simulation of Recrystallisation by Cellular Automata, *Acta Metallurgica*, Vol. 39, pp. 2135-2143.

**(Glicksman, 1988):** M. E. Glicksman, E. Winsa, R. C. Hahn, T. A. Lagrasso, S. H. Trimizi and M. E. Selleck; Isothermal Dendritic Growth – A Proposed Microgravity Experiment, *Metallurgical Transactions A*, Vol. 19, pp. 1945-1953.

**(Lipton, 1987):** J. Lipton, M. E. Glicksman, W. Kurz ; Equiaxed Dendrite Growth in Alloys at Small Supercooling, *Metallurgical Transaction A*, Vol. 18, pp. 341-345.

**(Lipton Kurz, 1987):** J. Lipton, W. Kurz, R. Trivedi ; Rapid Dendrite Growth in Undercooled Alloys, *Acta metallurgica*. Vol. 35, pp. 957-964.

**(Kurz–Giovanola, 1986):** W. Kurz, B. Giovanola and R. Trivedi; Theory of Microstructural Development during Rapid Solidification, *Acta Metallurgica*, Vol. 34, pp. 823-830.

## CHAPITRE 4

# MODELISATION DE LA SOLIDIFICATION DE L'ALLIAGE Al-8%Mg

### I. DESCRIPTION DU MODELE CHOISI

Nous avons choisi un modèle qui puisse mettre en évidence les phénomènes physiques qui se produisent au cours de la solidification d'une manière claire et simple afin de nous permettre l'étude avec le minimum de cout computationnel possible. C'est un modèle du front virtuel (modèle CA) inspiré des travaux qui nous ont précédé (Zhu, 2007 ; Zhao, 2003 ; Zhu Hong, 2007 ; Jacot, 2002) et nous l'avons appliqué pour la simulation de la formation et croissance d'une dendrite dans un alliage Al-Mg hypoeutectic.

Un alliage Al-8%Mg à l'état liquide, est considéré dans un domaine carré de  $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ , divisé en un arrangement orthogonal uniforme de cellules de même taille, à deux dimensions. Chaque cellule est caractérisée par sa température  $T$ , sa concentration en soluté  $c$ , son orientation cristallographique et la fraction de solide formée dedans  $f_s$ . L'état de la cellule peut être liquide ( $f_s = 0$ ), solide ( $f_s = 1$ ) ou un équilibre entre les deux, le cas où elle appartient à l'interface liquide - solide ( $0 < f_s < 1$ ), et le processus de la solidification est simulé par sa transition de l'état liquide à l'état solide.

Au début de la simulation, un germe solide (une cellule à l'état solide), avec une orientation initiale de 0 ou 15 degrés par rapport à la direction horizontale, est localisé au centre du domaine (cellules liquides toutes à la même température initiale  $T_0$  et ayant une même composition  $c_0$ ). La présence de ce cristal modifie la composition de l'équilibre local du liquide (sa composition locale en soluté est alors inférieure à la composition locale de l'équilibre thermodynamique). Pour rétablir la composition de l'équilibre, le processus de solidification s'amorce par nucléation hétérogène d'une dendrite sur le site formé par le cristal seed.

Au cours de la croissance de cette dendrite un rejet de soluté et de chaleur latente s'effectue. Le liquide en avant de l'interface s'enrichit en soluté et sa température augmente. Un gradient thermique et solutal se crée continuellement au voisinage du front de solidification et c'est sa transmission à travers tout le domaine qui fera avancer ce front. L'évolution de la solidification de l'alliage est ainsi gouvernée par un transport thermique et un transport de masse au sein du liquide.

La simulation de la croissance de la dendrite formée a été réalisée par deux méthodes pour comparer les résultats. Dans les règles de capture des cellules liquides, pour les joindre à l'interface, nous avons choisis deux types de cellules voisinant le solide formé (les cellules d'interface). Soit les quatre soit les huit cellules entourant le germe solide ont, en effet, été considérés comme interface dans l'une ou l'autre des deux méthodes. Les équations mathématiques qui permettent de calculer les champs, thermique et solutal, sont décrites ci-dessous.

## II. FORMULATION MATHÉMATIQUE

Pour modéliser la formation (par germination sur la particule d'impureté) et la croissance de la dendrite équiaxe, nous avons considéré les aspects reliés aux mouvements microscopiques qui se produisent au sein du liquide. Les phénomènes de transport seront donc considérés sur la base des processus de transfert se produisant par diffusion (la convection a été négligée étant donné l'absence de coulée continue).

## II. 1 Equations de conservation

Les équations de conservation de l'énergie totale de l'alliage et de la masse de soluté peuvent s'écrire dans le référentiel galiléen lié à l'interface pour ne pas tenir compte de l'énergie cinétique du système (si jamais il en a). Dans le cas où la variation de l'énergie thermique résulte uniquement du transfert par un mode diffusif, le bilan est exprimé par les équations suivantes :

$$\rho C_P \frac{\partial T_l}{\partial t} = K \nabla^2 T_l \quad (\text{dans le liquide}) \quad (1)$$

$$\rho C_P \frac{\partial T_s}{\partial t} = K \nabla^2 T_s \quad (\text{dans le solide}) \quad (2)$$

A l'interface liquide-solide, la continuité de la température implique que :

$$T_s = T_l = T \quad (3)$$

La transformation d'un état liquide en un état solide libère de la chaleur. Si on représente par  $\frac{\partial f_s}{\partial t}$  la fraction de solide formé et par  $\rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t}$  la chaleur libérée par cette formation alors le bilan thermique à l'interface liquide - solide peut être déterminé à l'aide de l'équation :

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (K \vec{\nabla} T) + \rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t}$$

Qui donne, lorsqu'elle est exprimée à deux dimensions, dans un espace cartésien :

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (4)$$

La quantité  $\rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t}$  représente ainsi la chaleur cédée au liquide voisinant l'interface. Les indices  $s$  et  $l$  dénotent les phases solide et liquide respectivement,  $\rho$  représente la densité,  $C_P$  la chaleur spécifique,  $K$  la conductivité thermique,  $L_v$  la chaleur latente de fusion de l'alliage et  $t$  la durée de la transformation liquide - solide.

Le rejet de chaleur, résultant de la formation de cette fraction de solide, fait augmenter la température du liquide au voisinage de l'interface par la quantité :

$$\Delta T = \Delta f_s \frac{L_v}{C_P} \quad (5)$$

Le bilan volumique gouvernant le transfert de masse s'obtient de la même manière :

$$\frac{\partial c_l}{\partial t} = D_l \nabla^2 c_l \quad (\text{dans le liquide}) \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = D_s \nabla^2 c_s \quad (\text{dans le solide}) \quad (7)$$

A l'interface liquide - solide, l'équilibre impose une concentration en soluté  $c_s$ , de la phase solide formée, inférieure à la composition initiale  $c_0$  (Fig. 4.1). Chaque fraction de liquide solidifiée doit donc rejeter une quantité de soluté au voisinage de l'interface.

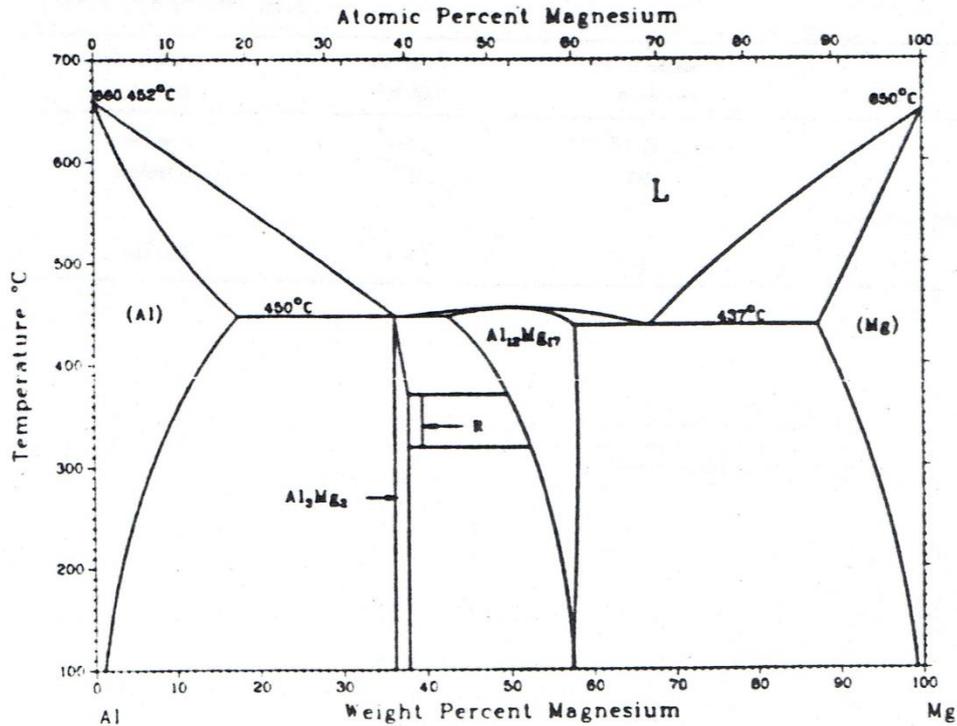


Fig. 4.1 –Diagramme de phases Al-Mg (ASM, 1992).

La partition solutale entre le liquide et le solide est calculée à l'aide des équations du liquidus et solidus, supposés linéaires.

$$T_l = T_f - m_l c_l \quad (\text{pour le liquidus})$$

$$T_s = T_f - m_s c_s \quad (\text{pour le solidus})$$

Où  $c_s$  et  $c_l$  étant les concentrations en soluté dans les phases solide et liquide, respectivement, prises à l'interface,  $T_f$  représente la température de fusion de l'alliage,  $m_l$  la pente du liquidus et  $m_s$  la pente du solidus.

A l'interface liquide - solide nous aurons donc :

$$c_s = \frac{m_l}{m_s} c_l = k c_l \quad (8)$$

Et le bilan solutal à l'interface peut être donné par l'équation du transport de masse :

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} = c_e(1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (D_e \vec{\nabla} c_e)$$

Qui s'écrit à 2D sous la forme :

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_e \frac{\partial c_e}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_e \frac{\partial c_e}{\partial y} \right) + c_e(1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (9)$$

Où  $c_e$  est égale à  $c_l$  dans la phase liquide et à l'interface, et égale à  $c_s/k$  dans la phase solide.

$D_e$  est égal à  $D_s$  dans la phase solide et à  $D_l$  dans le liquide et à l'interface.

Entre l'interface et le solide  $D_e = D_s$  et entre l'interface et le liquide  $D_e = D_l$ .

$k$  étant le coefficient de partition de l'équilibre local à l'interface. Pour les alliages Al-

Mg on a  $k = \frac{1}{3}$ .

Chaque fraction de liquide solidifiée doit ainsi rejeter une quantité de soluté au voisinage de l'interface ce qui fait augmenter la concentration du liquide. L'enrichissement du liquide voisin à l'interface peut être calculé à l'aide de l'équation (9) pour donner :

$$\Delta c = (1 - k)c_l \Delta f_s \quad (10)$$

## II. 2 Cinétique de croissance (calcul de la fraction du solide formé)

L'origine de l'instabilité morphologique de l'interface (la force motrice du phénomène de croissance de la dendrite formée) est directement reliée à l'instabilité thermodynamique du liquide au voisinage du front de solidification. Le liquide voisinant l'interface est thermodynamiquement instable si sa température réelle  $T_l$  est inférieure à la température de l'équilibre thermodynamique  $T^*$  donnée par l'équation de Gibbs- Thomson :

$$T^* = T_f + (c_l^* - c_0)m_l - \Gamma \kappa F(\varphi, \theta_0) \quad (11)$$

Où  $T^*$  est la température d'équilibre du liquidus à la composition initiale  $c_0$ ,  $T_f$  étant la température de fusion de l'alliage.  $c_l^*$  étant la composition d'équilibre en soluté à l'interface,  $m_l$  la pente du liquidus,  $\Gamma$  le coefficient de Gibbs – Thomson,  $\kappa$  la courbure de l'interface et  $F(\varphi, \theta_0)$  une fonction pour tenir compte de l'anisotropie de la tension à la surface de l'interface, où  $\theta_0$  représente l'orientation cristallographique initiale (l'orientation attribuée au germe au début de la simulation), et  $\varphi$  est l'angle que fait la normale à l'interface avec la direction horizontale.

L'équation de Gibbs – Thomson exprime que la température d'équilibre à l'interface  $T^*$  est inférieure à la température de fusion de l'alliage, la différence est due à l'énergie soustraite (fournie) pour courber l'interface et donc à une diminution de la température de l'alliage à l'interface.

D'autre part, elle exprime aussi un lien entre l'équilibre thermodynamique et le concept d'équilibre solutal local entre les phases liquide et solide à l'interface. L'instabilité de l'interface est finalement reliée à la différence entre la composition d'équilibre locale à l'interface  $c_l^*$  et la composition locale réelle  $c_l$ .

La composition en soluté de l'équilibre à l'interface peut être calculée à partir de cette équation (équation de Gibbs – Thomson), ce qui donne :

$$c_l^* = c_0 + \frac{T^* - T_f}{m_l} + \frac{\Gamma \kappa F(\varphi, \theta_0)}{m_l} \quad (12)$$

Une fois calculée, cette composition ( $c_l^*$ ) est comparée avec la composition locale réelle  $c_l$  déterminée par l'équation du transport solutal (Eq. 9). Si la différence est supérieure à zéro ( $c_l^* - c_l > 0$ ) alors la fraction solidifiée augmente pour compenser le défaut. Ceci montre encore une fois que la cinétique de la croissance de la dendrite formée est gouvernée par le transport de chaleur et de masse.

Selon les conditions d'équilibre à l'interface, durant un intervalle de temps  $\Delta t$ , l'augmentation de la fraction du solide  $\Delta f_s$  d'une cellule de l'interface (la quantité de soluté cédée, par le solide, à chaque cellule de l'interface) peut être évaluée à l'aide de l'équation :

$$\Delta f_s = \frac{c_l^* - c_l}{c_l^*(1 - k)} \quad (13)$$

Cependant, dans la même cellule, la fraction solidifiée  $f_s$  ne doit pas dépasser 1 (lorsque toute la cellule est totalement solidifiée  $f_s = 1$ ). Après  $N\Delta t$ , l'augmentation de la fraction solidifiée dans la même cellule doit donc être limitée de telle sorte à ce que le totale ne dépasse pas l'unité :

$$f_s^{(N)} = \sum_{i=1}^N (\Delta f_s)_i \quad \text{Avec } f_s^{(N)} \leq 1$$

Si  $\Delta f_s(N) = f_s^{(N)} - f_s^{(N-1)}$  représente la dernière fraction solidifiée, avec

$$f_s^{(N-1)} = \sum_{i=1}^{N-1} (\Delta f_s)_i, \text{ alors l'augmentation qui se produit dans la fraction solidifiée peut}$$

être exprimée par :

$$\Delta f_s = \min \left\{ \Delta f_s^{(N)}, 1 - \sum_{i=1}^{N-1} (\Delta f_s)_i \right\} \quad (14)$$

Pour une cellule de l'interface à l'instant  $t = t_N$ , lorsque la fraction solidifiée arrive à 1  $\left( \sum_{i=1}^N (\Delta f_s)_i = 1 \right)$ , cette cellule est considérée comme étant totalement solidifiée.

### II. 3 Calcul de la courbure de l'interface

La courbure du front de solidification change également pendant la croissance. L'équation de Gibbs-Thomson (Eq. 11) exprime qu'une partie de l'énergie, en relation avec l'anisotropie de la tension superficielle, est fournie pour courber l'interface. Ceci entraîne à une diminution de la température de l'alliage à l'interface. Le nouveau gradient thermique et la nouvelle courbure de l'interface produisent donc continuellement une nouvelle composition d'équilibre à l'interface liquide - solide.

Le calcul de la courbure locale de l'interface a été fait dans le système de coordonnées cartésien à deux dimensions. Nous avons démarré de l'expression du vecteur déplacement élémentaire dont le module exprime l'abscisse curviligne.

$$\vec{ds} = dx\vec{i} + dy\vec{j} \text{ qui donne } ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = dx \sqrt{1 + \left( \frac{dy}{dx} \right)^2}$$

$$\text{Ou bien avec la notation prime } y' = \frac{dy}{dx} \Leftrightarrow ds = dx \sqrt{1 + y'^2}$$

Et la courbure locale de l'interface peut alors être définie par  $\frac{d\vec{u}}{ds} = \kappa \vec{n}$

Où  $\vec{n}$  est le vecteur unitaire normal à l'interface et  $\vec{u} = \frac{d\vec{s}}{ds}$  est donné par :

$$\vec{u} = \frac{dx}{ds} \vec{i} + \frac{dy}{ds} \vec{j} = \frac{1}{\sqrt{1 + y'^2}} \vec{i} + \frac{y'}{\sqrt{1 + y'^2}} \vec{j}$$

D'où:

$$\frac{d\vec{u}}{dx} = -\frac{y' y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} \vec{i} + \frac{y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} \vec{j}$$

et

$$\frac{d\vec{u}}{ds} = \frac{d\vec{u}}{dx} \frac{dx}{ds} = -\frac{y' y''}{(1 + y'^2)^2} \vec{i} + \frac{y''}{(1 + y'^2)^2} \vec{j}$$

Ce qui donne :

$$\kappa = \left| \frac{d\vec{u}}{ds} \right| = \frac{\sqrt{y'^2 y''^2 + y''^2}}{(1 + y'^2)^2} \quad \text{Ou bien :} \quad \kappa = \frac{y''}{(1 + y'^2)^{3/2}} \quad (15)$$

$y'$  et  $y''$  expriment évidemment les dérivées, première et seconde, respectivement, de l'équation de l'interface donnée par la fonction  $y(x)$ .

L'expression de la courbure locale doit être reliée à la fraction du liquide solidifiée et pour cela ces dérivées doivent être transformées comme suit :

$$y' = \frac{\partial y}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial f_s} = \frac{\frac{\partial f_s}{\partial x}}{\frac{\partial f_s}{\partial y}} \quad \text{et} \quad y'' = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\frac{\partial f_s}{\partial x}}{\frac{\partial f_s}{\partial y}} \right],$$

Ce qui nous permet d'écrire :

$$\left[ 1 + y'^2 \right]^{3/2} = \left[ \frac{\left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2} \right]^{3/2} \quad \text{et} \quad y'' = \frac{\frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - \frac{\partial f_s}{\partial x} \overbrace{\left( \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)}^*}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right) &= \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial y} - 2 \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial y} \\ &= \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \frac{\partial f_s}{\partial x} + 2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - 2 \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} \end{aligned}$$

Et nous obtenons :

$$y'' = \frac{\frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - \frac{\partial f_s}{\partial x} \left[ \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \frac{\partial f_s}{\partial x} + 2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - 2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} \right]}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2}$$

Ou bien :

$$y'' = \frac{\frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{1}{\frac{\partial f_s}{\partial y}} - 2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} + 2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y}}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2}$$

Egale aussi à :

$$y'' = \frac{-\frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \frac{\partial f_s}{\partial y} - \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{1}{\frac{\partial f_s}{\partial y}} + 2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y}}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2} \frac{\partial f_s}{\partial y}$$

Ou bien :

$$y'' = \frac{2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 - \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2}{\left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^3}$$

Ce qui donne finalement :

$$\kappa = \frac{2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 - \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2}{\left[ \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{3/2}} \quad (16)$$

## II. 4 Calcul de l'anisotropie de la tension de surface

Pour que la transformation liquide-solide se fasse, il faut que l'énergie libérée soit plus importante que l'énergie nécessaire pour créer l'interface liquide - solide. La formation immédiate d'un gros cristal, à partir d'un bain liquide, est donc très difficile à réaliser. C'est pour cela que pour amorcer la solidification nous avons besoin d'un germe solide (une poussière) qui modifie localement la tension superficielle et permet la poursuite de la formation du gros cristal autour de cette impureté. La croissance de ce cristal se fait toujours selon l'orientation cristallographique associée à l'anisotropie de tension de surface de l'interface formée. La forme du cristal formé à partir d'un bain liquide dépend de la relation qui lie la température autour de l'interface liquide - solide à la

tension de sa surface. Pour la croissance dendritique, cette relation est exprimée par l'équation de Gibbs-Thomson (Eq. 11).

L'anisotropie de l'énergie de surface a été décrite comme étant une perturbation sinusoïdale qui se transmet parallèlement à l'interface et dont les pics croissent dans une direction faisant un angle par rapport à la direction normale à l'interface. Pour un métal, la dépendance angulaire de l'énergie de la surface de l'interface liquide - solide est connue par la relation :

$$\gamma(\varphi, \theta) = \gamma_0(1 + \varepsilon \cos m(\varphi - \theta))$$

$\theta$  représente l'angle que fait la direction de croissance avec la direction normale (l'orientation cristallographique), et  $\varphi$  est l'angle que fait la normale à l'interface avec la direction horizontale.

$\varepsilon$  est un facteur d'anisotropie de l'ordre de quelques pourcents et  $m$  détermine le mode de la symétrie de l'anisotropie, il est défini dans le domaine :

$$0 \leq \varepsilon(m^2 - 1) < 1$$

Pour l'alliage Al-Mg, ayant une structure cristallographique cubique, l'énergie de surface présente une symétrie, dans l'anisotropie, d'ordre 4 ( $m = 4$ ) et la fonction  $F$  est alors donnée par (Beltran-Sanchez, 2003) :

$$F(\varphi, \theta) = \gamma(\varphi, \theta) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \gamma(\varphi, \theta) = 1 - \delta \cos 4(\varphi - \theta) \quad (17)$$

Où  $\delta = 15\varepsilon$  est le coefficient d'anisotropie ( $0 \leq \delta < 1$ ).

L'angle  $\varphi$  a été calculé à l'aide de la relation :

$$\varphi = \cos^{-1} \left[ \frac{-\frac{\partial f_s}{\partial x}}{\left\{ \left( \frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right\}^{1/2}} \right] \quad (18)$$

### III. METHODE NUMERIQUE

La résolution directe de ces équations est très difficile, et on a alors recours à la résolution numérique. Pour cela les équations différentielles doivent être transformées en un système d'équations algébriques (discrétisation). Il existe plusieurs méthodes de

discrétisation des équations différentielles aux dérivées partielles : la méthode des volumes finis, des différences finies et des éléments finis. Pour notre problème, nous utiliserons la méthode des volumes finis.

### III.1 Méthode des volumes finis

Dans cette méthode, on résout l'équation aux dérivées partielles de manière approchée sur un maillage. Chaque cellule de ce maillage constitue un volume fini. Les volumes finis sont des petits volumes (en 3D), des surfaces (en 2D) ou des segments (en 1D) dont la réunion forme le domaine d'étude. Cette méthode consiste à diviser le domaine de calcul en un nombre de volumes, où chaque volume entoure un nœud (un point au centre de la maille) et les termes des équations différentielles modélisantes sont intégrés sur chacun de ces volumes.

### III.2 Maillage

La construction de base du maillage (volumes de contrôle + grille) est montrée dans la figure 4.2. Le maillage utilisé est un maillage structuré dont les volumes de contrôle (surfaces à 2D) sont carrées de côtés  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  où  $\Delta x$  est le côté du volume de contrôle dans la direction X et  $\Delta y$  le côté du volume de contrôle dans la direction Y.

Les lignes discontinuées dénotent les limites des volumes de contrôle, ces derniers (volumes de contrôle) entourent les nœuds de la grille qui se placent à leur centre géométrique. On peut distinguer qu'un nœud donné communique avec quatre nœuds voisins par l'intermédiaire des quatre interfaces du volume de contrôle. Pour les volumes de contrôle près des frontières, une de ces frontières coïncide avec les limites du domaine de calcul, ce qui facilite l'incorporation des conditions aux limites pour toutes les variables.

Dans la figure 4.2, les emplacements des mailles (nœuds) dans les directions X et Y sont dénotés par I et J respectivement.  $J = 1$  fait référence à la ligne de la grille à la limite gauche, alors que  $J = L_1$  indique la ligne de la grille à la limite droite. De la même façon  $I = 1$  et  $I = M_1$  représentent respectivement la ligne en bas et en haut de la grille. On peut, donc, écrire :

$J = 1$  : limite gauche ;  $J = L_1$  : limite droite

$I = 1$  : limite basse ;  $I = M_1$  : limite haute.

Les lignes  $I = 2$  à  $M_2$  et les colonnes  $J = 2$  à  $L_2$  spécifient tous les points internes de la grille, avec  $L_2 = L_1 - 1$  et  $M_2 = M_1 - 1$ .

L'équation générale peut être intégrée sur un volume de contrôle. Le volume de contrôle est construit autour d'un point P du maillage, les autres points voisins sont E (Est), W (Ouest), N (Nord) et S (Sud).

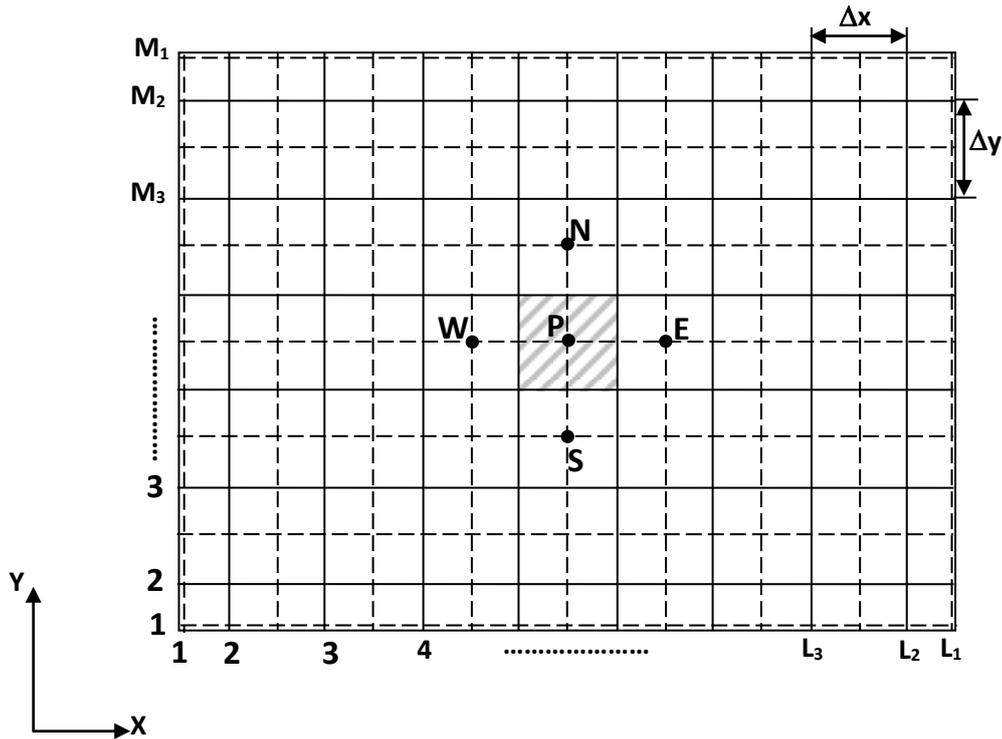


Fig. 4.2 – Schéma du maillage (des volumes finis).

### III. 3 Discrétisation de l'équation de base

La discrétisation consiste à intégrer les équations différentielles partielles par rapport au temps et par rapport au volume dans un domaine limité par les quatre interfaces (Est, Ouest, Nord et Sud) d'un volume de contrôle. Dans les équations discrétisées les inconnues sont les valeurs d'une variable  $\phi$  en un certain nombre de nœuds.

Pour l'équation de diffusion (à 2D) :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = S$$

Le domaine est d'abord discrétisé à l'aide d'une grille bidimensionnelle uniforme orientée positivement vers la droite et vers le haut. Pour chaque point P, nous

désignerons par E, W, N, S les nœuds situés respectivement à sa droite, gauche, haut et bas. Le volume de contrôle centré en P à pour dimension  $\Delta x$  et  $\Delta y$ , les faces correspondantes (du volume de contrôle) sont notées e, w, n, s (Fig. 4.3).

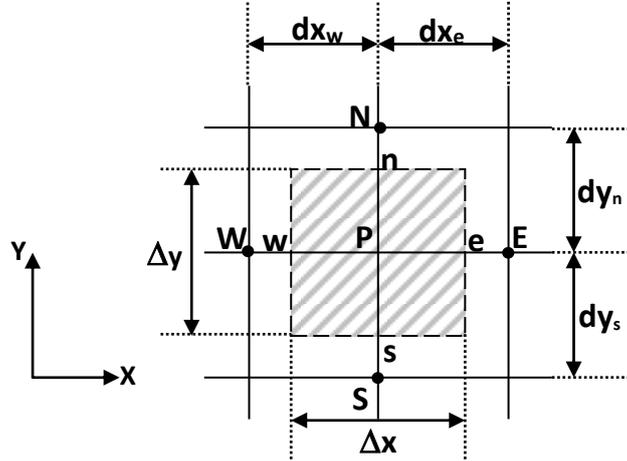


Fig. 4.3 – Discrétisation en éléments de volume de contrôle.

Le principe de la méthode des volumes finis consiste à intégrer l'équation à résoudre sur chacun des volumes de contrôle. Nous avons donc pour chaque point P :

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] dx dy dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S dx dy dt$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dy dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right]_w^e dy dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right]_s^n dx dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S dx dy dt \quad (19)$$

Les termes à gauche de la dernière équation (Eq. (19)) sont respectivement :

- L'intégration sur le volume de contrôle de la variation temporelle de la variable  $\phi$ .
- L'intégration sur les deux faces de volume de contrôle du flux de  $\phi$ , dû à la diffusion, au cours du temps  $\Delta t$ .

La somme de ces intégrations est égale au terme de droite, représenté par l'intégrale du terme source, sur le même volume de contrôle entre les temps  $t$  et  $t + \Delta t$ .

Décomposant cette équation en quatre termes:

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dy dt & 2 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right]_w^e dy dt \\
 3 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right]_s^n dx dt & 4 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S dx dy dt
 \end{aligned}$$

Pour la première itération et par manque de la nouvelle valeur de la fraction solide  $f_s$ , on utilise une approximation du premier ordre pour la discrétisation des dérivées temporelles:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\phi_P|^t - \phi_P|^{t-\Delta t}}{\Delta t}$$

Pour des itérations ultérieures, la discrétisation se fait avec un schéma numérique d'ordre quatre:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{25\phi_P|^{t+\Delta t} - 48\phi_P|^t + 36\phi_P|^{t-\Delta t} - 16\phi_P|^{t-2\Delta t} + 3\phi_P|^{t-3\Delta t}}{12\Delta t}$$

Notons que la démonstration de la discrétisation des quatre termes de l'équation (19) est faite pour les itérations ultérieures:

$$1 = \frac{25\phi_P|^{t+\Delta t} - 48\phi_P|^t + 36\phi_P|^{t-\Delta t} - 16\phi_P|^{t-2\Delta t} + 3\phi_P|^{t-3\Delta t}}{12\Delta t} \Delta x \Delta y$$

$$\begin{aligned}
 2 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right]_w^e dy dt \\
 &= \left[ \Gamma_e \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e^{t+\Delta t} - \Gamma_w \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_w^{t+\Delta t} \right] \Delta y \\
 &= \left[ \Gamma_e \frac{\phi_E|^{t+\Delta t} - \phi_P|^{t+\Delta t}}{dx_e} - \Gamma_w \frac{\phi_P|^{t+\Delta t} - \phi_W|^{t+\Delta t}}{dx_w} \right] \Delta y \\
 &= - \left( \frac{\Gamma_e}{dx_e} + \frac{\Gamma_w}{dx_w} \right) \Delta y \phi_P|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_e \Delta y}{dx_e} \phi_E|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_w \Delta y}{dx_w} \phi_W|^{t+\Delta t}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 3 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ \Gamma \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right]_s^n dx dt \\
 &= \left[ \Gamma_n \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_n^{t+\Delta t} - \Gamma_s \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_s^{t+\Delta t} \right] \Delta x \\
 &= \left[ \Gamma_n \frac{\phi_N \Big|_n^{t+\Delta t} - \phi_P \Big|_n^{t+\Delta t}}{dy_n} - \Gamma_s \frac{\phi_P \Big|_s^{t+\Delta t} - \phi_S \Big|_s^{t+\Delta t}}{dy_s} \right] \Delta x \\
 &= - \left( \frac{\Gamma_n}{dy_n} + \frac{\Gamma_s}{dy_s} \right) \Delta x \phi_P \Big|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_n \Delta x}{dy_n} \phi_N \Big|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_s \Delta x}{dy_s} \phi_S \Big|^{t+\Delta t} \\
 4 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S dx dy dt \\
 &= \bar{S} \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

Où  $\bar{S}$  est la valeur moyenne de S sur le volume considéré

Le résultat de l'intégration de l'équation (19) est alors :

$$\begin{aligned}
 &\left[ \frac{25}{12\Delta t} \Delta x \Delta y + \left( \frac{\Gamma_e}{dx_e} + \frac{\Gamma_w}{dx_w} \right) \Delta y + \left( \frac{\Gamma_n}{dy_n} + \frac{\Gamma_s}{dy_s} \right) \Delta x \right] \phi_P \Big|^{t+\Delta t} = \frac{\Gamma_e \Delta y}{dx_e} \phi_E \Big|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_w \Delta y}{dx_w} \phi_W \Big|^{t+\Delta t} + \\
 &+ \frac{\Gamma_n \Delta x}{dy_n} \phi_N \Big|^{t+\Delta t} + \frac{\Gamma_s \Delta x}{dy_s} \phi_S \Big|^{t+\Delta t} + \left[ \bar{S} + \frac{48}{12\Delta t} \phi_P \Big|^t - \frac{36}{12\Delta t} \phi_P \Big|^{t-\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} \phi_P \Big|^{t-2\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} \phi_P \Big|^{t-3\Delta t} \right] \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

De la forme:

$$A_P \phi_P \Big|^{t+\Delta t} = A_E \phi_E \Big|^{t+\Delta t} + A_W \phi_W \Big|^{t+\Delta t} + A_N \phi_N \Big|^{t+\Delta t} + A_S \phi_S \Big|^{t+\Delta t} + S c \quad (20)$$

Tel que:

$$\begin{aligned}
 A_E &= \frac{\Gamma_e \Delta y}{dx_e}, & A_W &= \frac{\Gamma_w \Delta y}{dx_w} \\
 A_N &= \frac{\Gamma_n \Delta x}{dy_n}, & A_S &= \frac{\Gamma_s \Delta x}{dy_s}
 \end{aligned}$$

Avec

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + \frac{25}{12\Delta t} \Delta x \Delta y$$

Et

$$Sc = \left[ \bar{S} + \frac{48}{12\Delta t} \phi_P|^t - \frac{36}{12\Delta t} \phi_P|^{t-\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} \phi_P|^{t-2\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} \phi_P|^{t-3\Delta t} \right] \Delta x \Delta y$$

Et nous aurons donc une équation algébrique (Eq. 20), solution de l'équation différentielle, pour chaque point, pour la concentration ( $\phi = c$ ), et pour la température ( $\phi = T$ ).

### III. 3. 1 Discrétisation de l'équation d'énergie

L'équation traduisant le transfert d'énergie décrite précédemment (Eq. 4) est:

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t}$$

Nous intégrons cette équation sur chacun des volumes de contrôle. Pour tout point P nous aurons donc :

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} dy dx dt}_1 - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ K \frac{\partial T}{\partial x} \right]_w^e dy dt}_2 - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ K \frac{\partial T}{\partial y} \right]_s^n dx dt}_3 = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t} dy dx dt}_4$$

La dérivée temporelle est discrétisée avec un schéma numérique d'ordre quatre, le gradient thermique aux interfaces est finalement calculé en supposant que T varie linéairement entre chaque point du maillage. On obtient ainsi:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} dy dx dt \\ &= \left( \frac{25T_P|^{t+\Delta t} - 48T_P|^t + 36T_P|^{t-\Delta t} - 16T_P|^{t-2\Delta t} + 3T_P|^{t-3\Delta t}}{12\Delta t} \right) \rho C_P \Delta x \Delta y \\ &= \frac{25}{12\Delta t} \rho C_P \Delta x \Delta y T_P|^{t+\Delta t} + \\ &\quad + \left( -\frac{48}{12\Delta t} T_P|^t + \frac{36}{12\Delta t} T_P|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} T_P|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} T_P|^{t-3\Delta t} \right) \rho C_P \Delta x \Delta y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ K \frac{\partial T}{\partial x} \right]_w^e dy dt \\
 &= \left[ K_e \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_e^{t+\Delta t} - K_w \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_w^{t+\Delta t} \right] \Delta y \\
 &= \left[ K_e \frac{T_E|^{t+\Delta t} - T_P|^{t+\Delta t}}{dx_e} - K_w \frac{T_P|^{t+\Delta t} - T_W|^{t+\Delta t}}{dx_w} \right] \Delta y \\
 &= - \left( \frac{K_e}{dx_e} + \frac{K_w}{dx_w} \right) \Delta y T_P|^{t+\Delta t} + \frac{K_e \Delta y}{dx_e} T_E|^{t+\Delta t} + \frac{K_w \Delta y}{dx_w} T_W|^{t+\Delta t}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 3 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ K \frac{\partial T}{\partial y} \right]_s^n dx dt \\
 &= \left[ K_n \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_n^{t+\Delta t} - K_s \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_s^{t+\Delta t} \right] \Delta x \\
 &= \left[ K_n \frac{T_N|^{t+\Delta t} - T_P|^{t+\Delta t}}{dy_n} - K_s \frac{T_P|^{t+\Delta t} - T_S|^{t+\Delta t}}{dy_s} \right] \Delta x \\
 &= - \left( \frac{K_n}{dy_n} + \frac{K_s}{dy_s} \right) \Delta x T_P|^{t+\Delta t} + \frac{K_n \Delta x}{dy_n} T_N|^{t+\Delta t} + \frac{K_s \Delta x}{dy_s} T_S|^{t+\Delta t}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 4 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \rho L_v \frac{\partial f_s}{\partial t} dy dx dt \\
 &= \left( \frac{25 f_{sP}|^{t+\Delta t} - 48 f_{sP}|^t + 36 f_{sP}|^{t-\Delta t} - 16 f_{sP}|^{t-2\Delta t} + 3 f_{sP}|^{t-3\Delta t}}{12\Delta t} \right) \rho L_v \Delta x \Delta y \\
 &= \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{sP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{sP}|^t + \frac{36}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-3\Delta t} \right) \rho L_v \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
 &\left[ \frac{25}{12\Delta t} \rho C_P \Delta x \Delta y + \left( \frac{K_e}{dx_e} + \frac{K_w}{dx_w} \right) \Delta y + \left( \frac{K_n}{dy_n} + \frac{K_s}{dy_s} \right) \Delta x \right] T_P|^{t+\Delta t} = \\
 &= \frac{K_e \Delta y}{dx_e} T_E|^{t+\Delta t} + \frac{K_w \Delta y}{dx_w} T_W|^{t+\Delta t} + \frac{K_n \Delta x}{dy_n} T_N|^{t+\Delta t} + \frac{K_s \Delta x}{dy_s} T_S|^{t+\Delta t} + \\
 &+ \left( \frac{48}{12\Delta t} T_P|^t - \frac{36}{12\Delta t} T_P|^{t-\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} T_P|^{t-2\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} T_P|^{t-3\Delta t} \right) \rho C_P \Delta x \Delta y + \\
 &+ \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{sP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{sP}|^t + \frac{36}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-3\Delta t} \right) \rho L_v \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

Et nous arrivons à l'équation d'énergie (Eq. 20 pour T) :

$$A_P T_P|^{t+\Delta t} = A_E T_E|^{t+\Delta t} + A_W T_W|^{t+\Delta t} + A_N T_N|^{t+\Delta t} + A_S T_S|^{t+\Delta t} + S_C$$

Sachant que:

$$A_E = \frac{K_e \Delta y}{dx_e}, \quad A_W = \frac{K_w \Delta y}{dx_w}$$

$$A_N = \frac{K_n \Delta x}{dy_n}, \quad A_S = \frac{K_s \Delta x}{dy_s}$$

Avec

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + \frac{25}{12\Delta t} \rho C_P \Delta x \Delta y$$

Et

$$S_C = \left( \frac{48}{12\Delta t} T_P|^{t-\Delta t} - \frac{36}{12\Delta t} T_P|^{t-2\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} T_P|^{t-3\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} T_P|^{t-4\Delta t} \right) \rho C_P \Delta x \Delta y + \\ + \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{SP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{SP}|^{t-\Delta t} + \frac{36}{12\Delta t} f_{SP}|^{t-2\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{SP}|^{t-3\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{SP}|^{t-4\Delta t} \right) \rho L_v \Delta x \Delta y$$

### III. 3. 2 Discrétisation de l'équation de la concentration

Le transfert solutal à l'interface liquide – solide est donné par l'équation décrite précédemment (Eq. 9) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial c}{\partial y} \right) + c(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t}$$

L'intégrale de cette équation est de la forme:

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial c}{\partial t} dy dx dt}_1 - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ D \frac{\partial c}{\partial x} \right]_w^e dy dt}_2 - \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ D \frac{\partial c}{\partial y} \right]_s^n dx dt}_3 = \\ = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n c(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} dy dx dt}_4$$

$$1 = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial c}{\partial t} dy dx dt \\ = \left( \frac{25c_P|^{t+\Delta t} - 48c_P|^{t-\Delta t} + 36c_P|^{t-2\Delta t} - 16c_P|^{t-3\Delta t} + 3c_P|^{t-4\Delta t}}{12\Delta t} \right) \Delta x \Delta y \\ = \left( \frac{25}{12\Delta t} c_P|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} c_P|^{t-\Delta t} + \frac{36}{12\Delta t} c_P|^{t-2\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} c_P|^{t-3\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} c_P|^{t-4\Delta t} \right) \Delta x \Delta y$$

$$\begin{aligned}
 2 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \left[ D \frac{\partial c}{\partial x} \right]_w^e dy dt \\
 &= \left[ D_e \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_e^{t+\Delta t} - D_w \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_w^{t+\Delta t} \right] \Delta y \\
 &= \left[ D_e \frac{c_E|^{t+\Delta t} - c_P|^{t+\Delta t}}{dx_e} - D_w \frac{c_P|^{t+\Delta t} - c_W|^{t+\Delta t}}{dx_w} \right] \Delta y \\
 &= - \left( \frac{D_e}{dx_e} + \frac{D_w}{dx_w} \right) \Delta y c_P|^{t+\Delta t} + \frac{D_e \Delta y}{dx_e} c_E|^{t+\Delta t} + \frac{D_w \Delta y}{dx_w} c_W|^{t+\Delta t}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 3 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[ D \frac{\partial c}{\partial y} \right]_s^n dx dt \\
 &= \left[ D_n \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_n^{t+\Delta t} - D_s \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_s^{t+\Delta t} \right] \Delta x \\
 &= \left[ D_n \frac{c_N|^{t+\Delta t} - c_P|^{t+\Delta t}}{dy_n} - D_s \frac{c_P|^{t+\Delta t} - c_S|^{t+\Delta t}}{dy_s} \right] \Delta x \\
 &= - \left( \frac{D_n}{dy_n} + \frac{D_s}{dy_s} \right) \Delta x c_P|^{t+\Delta t} + \frac{D_n \Delta x}{dy_n} c_N|^{t+\Delta t} + \frac{D_s \Delta x}{dy_s} c_S|^{t+\Delta t}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 4 &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n c(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t} dy dx dt \\
 &= \left( \frac{25 f_{sP}|^{t+\Delta t} - 48 f_{sP}|^t + 36 f_{sP}|^{t-\Delta t} - 16 f_{sP}|^{t-2\Delta t} + 3 f_{sP}|^{t-3\Delta t}}{12\Delta t} \right) c(1-k) \Delta x \Delta y \\
 &= \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{sP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{sP}|^t + \frac{36}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-3\Delta t} \right) c(1-k) \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

Le résultat de l'intégration est alors :

$$\begin{aligned}
 &\left[ \frac{25}{12\Delta t} \Delta x \Delta y + \left( \frac{D_e}{dx_e} + \frac{D_w}{dx_w} \right) \Delta y + \left( \frac{D_n}{dy_n} + \frac{D_s}{dy_s} \right) \Delta x \right] c_P|^{t+\Delta t} = \\
 &= \frac{D_e \Delta y}{dx_e} c_E|^{t+\Delta t} + \frac{D_w \Delta y}{dx_w} c_W|^{t+\Delta t} + \frac{D_n \Delta x}{dy_n} c_N|^{t+\Delta t} + \frac{D_s \Delta x}{dy_s} c_S|^{t+\Delta t} + \\
 &+ \left( \frac{48}{12\Delta t} c_P|^t - \frac{36}{12\Delta t} c_P|^{t-\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} c_P|^{t-2\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} c_P|^{t-3\Delta t} \right) \Delta x \Delta y + \\
 &+ \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{sP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{sP}|^t + \frac{36}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-3\Delta t} \right) c(1-k) \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

De la forme:

$$A_P c_P|^{t+\Delta t} = A_E c_E|^{t+\Delta t} + A_W c_W|^{t+\Delta t} + A_N c_N|^{t+\Delta t} + A_S c_S|^{t+\Delta t} + S c$$

Tel que:

$$A_E = \frac{D_e \Delta y}{dx_e}, \quad A_W = \frac{D_w \Delta y}{dx_w}$$

$$A_N = \frac{D_n \Delta x}{dy_n}, \quad A_S = \frac{D_s \Delta x}{dy_s}$$

Avec

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + \frac{25}{12\Delta t} \Delta x \Delta y$$

Et

$$S c = \left( \frac{48}{12\Delta t} c_P|^{t-\Delta t} - \frac{36}{12\Delta t} c_P|^{t-2\Delta t} + \frac{16}{12\Delta t} c_P|^{t-3\Delta t} - \frac{3}{12\Delta t} c_P|^{t-4\Delta t} \right) \Delta x \Delta y +$$

$$+ \left( \frac{25}{12\Delta t} f_{sP}|^{t+\Delta t} - \frac{48}{12\Delta t} f_{sP}|^t + \frac{36}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-\Delta t} - \frac{16}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-2\Delta t} + \frac{3}{12\Delta t} f_{sP}|^{t-3\Delta t} \right) c(1-k) \Delta x \Delta y$$

### III. 3. 3 Discrétisation des conditions aux limites

- Cas de la température

Les conditions aux limites de la température sont du type Dirichlet ( $a\phi = c$ ), où on impose la valeur de la température sur les frontières du domaine:

- Sur les parois gauche ( $x = 0$ ) et droite ( $x = L$ ), on impose :

$$a_p = 1$$

$$a_E = a_W = 0$$

$$sc = T_{\text{inf}}$$

- Sur les parois inférieure ( $y = 0$ ) et supérieure ( $y = L$ ), on impose :

$$a_p = 1$$

$$a_N = a_S = 0$$

$$sc = T_{\text{inf}}$$

Tel que :

$$T_w = T_0 - \Delta T$$

Avec

$$T_0 = 884.80661K$$

Et

$$\Delta T = 3K, 5K \text{ ou } 10K$$

- Cas de la composition

Pour les quatre surfaces du domaine, le gradient de la composition normal à ces surfaces est nul ( $\frac{\partial c}{\partial x} = 0$  pour les parois gauche et droite et  $\frac{\partial c}{\partial y} = 0$  pour les parois inférieure et supérieure). Ce sont des conditions aux limites du type Neumann.

On introduit cette condition dans l'équation de discrétisation de la composition comme suit :

- Parois gauche ( $x = 0$ )

$$a_p = 1$$

$$a_w = a_n = a_s = sc = 0$$

$$a_e = 1$$

- Parois droite ( $x = L$ )

$$a_p = 1$$

$$a_e = a_n = a_s = sc = 0$$

$$a_w = 1$$

- Parois inférieure ( $y = 0$ )

$$a_p = 1$$

$$a_w = a_w = a_s = sc = 0$$

$$a_n = 1$$

- Parois supérieure ( $y = L$ )

$$a_p = 1$$

$$a_e = a_w = a_n = sc = 0$$

$$a_s = 1$$

### III.4 Résolution des équations algébriques

L'équation de transport discrétisée peut être écrite:

$$a_p \phi_p = \sum a_m \phi_m + b \quad (21)$$

Où  $m = E, W, N$  ou  $S$

La résolution des équations de transport discrétisées précédemment n'est pas immédiate; cela revient aux coefficients, apparaissant dans ces équations, qui dépendent des valeurs des variables  $T$  et  $c$ ; le système n'est donc pas linéaire. Cette difficulté peut être éliminée en faisant appel aux méthodes de résolution d'un système d'équations algébriques.

Il existe plusieurs méthodes de résolution des systèmes d'équations algébriques, essentiellement les méthodes directes (par exemple Gauss – Jordan) et les méthodes itératives (par exemple Gauss – Seidel).

Les méthodes directes exigent une mémoire énorme et un temps de calcul relativement important par rapport aux méthodes itératives qui sont utilisées le plus souvent dans les problèmes non linéaires et qui occupent moins d'espace mémoire.

Une méthode de résolution itérative, dite ligne par ligne a été choisie pour la résolution de l'équation de transport discrétisée. Cette méthode économique, procède par propagation de l'information prise aux limites du domaine, sur toute l'étendue du champ de calcul. Elle emploie pour la résolution du système d'équations l'algorithme **TDMA** (**Tri**diagonal **M**atrix **A**lgorithm), qui est une procédure de résolution des systèmes d'équations à matrices tridiagonales.

### III.5 Développement de la méthode TDMA

Le balayage consiste à décomposer la matrice du système d'équations linéarisées en deux matrices tridiagonales suivant  $X$  et  $Y$ . Si on considère que les termes  $\phi_N$  et  $\phi_S$  dans l'équation (21) sont connus, il ne restera dans l'équation que trois termes inconnus. Ce sont  $\phi_P$ ,  $\phi_E$  et  $\phi_W$ . Si ces derniers forment une équation le long de la direction  $X$ ,

elle sera comme suit :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (22)$$

Où  $i = 2, L_2$

Et

$$\phi_i = \phi_P \quad , \quad \phi_{i+1} = \phi_E \quad , \quad \phi_{i-1} = \phi_W$$

$$a_i = a_P \quad , \quad b_i = a_E \quad , \quad c_i = a_W$$

$$d_i = a_N \phi_N^* + a_S \phi_S^* + b$$

□\* dénote ici la valeur estimée.

Pour  $i = 1, 2, \dots, L_1$  la variable  $\phi_i$  a une relation avec ses voisins  $\phi_{i-1}$  et  $\phi_{i+1}$ . Pour  $\phi_1$  et  $\phi_{L_1}$  aux limites du domaine les valeurs  $\phi_0$  et  $\phi_{L_1+1}$  n'auront aucun sens. C'est à dire que :

$$c_1 = 0 \quad , \quad b_{L_1} = 0$$

Pour tous les nœuds ( $i = 2, NI$  avec  $NI = L_1 - 1$ ) de la ligne, on a un système de la forme :

$$\begin{bmatrix} -c_2 & +a_2 & -b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -c_3 & +a_3 & -b_3 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & -c_{NI} & +a_{NI} & -b_{NI} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{NI+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_2 \\ d_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ d_{NI} \end{bmatrix}$$

La matrice associée au système d'équations est tridiagonale. On utilise l'algorithme TDMA pour sa résolution.

L'équation (22) peut s'écrire aussi :

$$\phi_i = \frac{c_i}{a_i} \phi_{i-1} + \frac{b_i}{a_i} \phi_{i+1} + \frac{d_i}{a_i} \quad (23)$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{b_1}{a_1} \phi_2 + \frac{d_1}{a_1} \\ \phi_2 &= \frac{c_2}{a_2} \phi_1 + \frac{b_2}{a_2} \phi_3 + \frac{d_2}{a_2} \\ \phi_3 &= \frac{c_3}{a_3} \phi_2 + \frac{b_3}{a_3} \phi_4 + \frac{d_3}{a_3} \\ \phi_{L1-1} &= \frac{c_{L1-1}}{a_{L1-1}} \phi_{L1-2} + \frac{b_{L1-1}}{a_{L1-1}} \phi_{L1} + \frac{d_{L1-1}}{a_{L1-1}} \\ \phi_{L1} &= \frac{c_{L1}}{a_{L1}} \phi_{L1-1} + \frac{d_{L1}}{a_{L1}}\end{aligned}$$

De ces équations on peut dire que la variable  $\phi_1$  est connue lorsque  $\phi_2$  est connue. L'équation pour  $i = 2$  est en fonction de  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  et  $\phi_3$  tandis que  $\phi_1$  est en fonction de  $\phi_2$ , alors cette équation se réduit à une relation entre  $\phi_2$  et  $\phi_3$  seulement, et donc  $\phi_2$  peut être exprimée lorsque  $\phi_3$  est connue. Ce processus de substitution peut se poursuivre jusqu'à  $\phi_{L1}$  qui se déduit des conditions aux limites puis obtenir  $\phi_{L1-1}$  de  $\phi_{L1}$ ,  $\phi_{L1-2}$  de  $\phi_{L1-1}$ , ... et ainsi de suite.

Cette explication peut être résumée dans l'équation:

$$\square_i = G_i \square_{i+1} + Q_i \quad (24)$$

De la même façon:

$$\square_{i-1} = G_{i-1} \square_i + Q_{i-1} \quad (25)$$

Substituons l'équation (25) dans l'équation (22) et nous aurons :

$$a_i \square_i = b_i \square_{i+1} + c_i (G_{i-1} \square_i + Q_{i-1}) + d_i$$

Laquelle peut être réarrangée pour ressembler à l'équation (24) :

$$\begin{aligned}(a_i - c_i G_{i-1}) \square_i &= b_i \square_{i+1} + c_i Q_{i-1} + d_i \\ \square_i &= \left( \frac{b_i}{a_i - c_i G_{i-1}} \right) \square_{i+1} + \left( \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i G_{i-1}} \right)\end{aligned} \quad (26)$$

Par analogie, nous aurons donc :

$$\begin{aligned}G_i &= \frac{b_i}{a_i - c_i G_{i-1}} \\ Q_i &= \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i G_{i-1}}\end{aligned}$$

Pour  $i = 1$ , on a  $c_1=0$  et donc:

$$G_1 = \frac{b_1}{a_1}$$

$$Q_1 = \frac{d_1}{a_1}$$

Pour  $i = L_1$ , on a  $b_{L_1} = 0$  et donc:

$$G_{L_1} = 0$$

Ce qui donne, à l'aide de l'équation (24) :

$$\square_{L_1} = Q_{L_1}$$

### III. 6 Algorithme de calcul

Les étapes suivies pour la résolution numérique du modèle mathématique décrit, sont comme suit :

- 1- Initialiser le système de simulation (dimensions du domaine de calcul, taille du maillage, température et composition initiales et la cellule seed avec son orientation cristallographique).
- 2- Commencer le temps de calcul.
- 3- Commencer les itérations internes : faire n itérations pour chaque pas de temps.
- 4- Calculer les coefficients de discrétisation de l'équation de l'énergie par la résolution des équations (3) et (4) dans tout le domaine. Spécifier les valeurs des coefficients de discrétisation de l'équation de l'énergie aux limites du domaine (conditions aux limites thermiques). Utiliser la méthode de balayage (TDMA) pour résoudre les équations. Une fois le balayage terminé déterminer la variation maximale qui se produit dans la température (pour vérifier la convergence).
- 5- Calculer les coefficients de discrétisation de l'équation de conservation de masse à l'aide de la résolution de l'équation (9), pour chaque cellule, dans tout le domaine, pour chaque pas de temps. Spécifier les valeurs des coefficients de discrétisation de l'équation (9) aux limites du domaine. Utiliser la méthode de balayage pour résoudre le système d'équations de composition discrétisées pour obtenir le champ solutal. Une fois le balayage terminé déterminer la variation maximale qui se produit dans la composition pour juger de la convergence des calculs.
- 6- Calculer la courbure de l'interface à l'aide de l'équation (16).
- 7- Calculer l'anisotropie de la tension de surface à l'aide des équations (17) et (18).

8- Calculer la composition d'équilibre  $C_L^*$  à l'aide de l'équation (12), si elle est supérieure à  $C_L$ , déterminer l'incrément de la fraction solidifiée, à l'aide des équations (13) et (14). Cet incrément est ajouté à la fraction solide qui ne doit pas dépasser 1.

9- Effectuer la mise à jour de la fraction solide et capturer les nouvelles cellules interface : tant que la nouvelle fraction solidifiée est inférieure à 1, la quantité

$$\Delta T = \frac{L_v \Delta f_s}{C_p} \text{ (le rejet thermique) et la quantité } \Delta C = (1-k)C_L \Delta f_s \text{ (le rejet solutal)}$$

sont ajoutées à la partie liquide de l'interface. Lorsque la nouvelle fraction solidifiée arrive à la valeur 1, ces rejets, solutal  $\Delta C$  et thermique  $\Delta T$ , sont livrés au liquide voisin de l'interface.

La composition en soluté des cellules interface est calculée à l'aide de la relation :

$$C_s = \frac{\sum_{i=1}^{nin} k C_L^* \Delta f_s}{\sum_{i=1}^{nin} \Delta f_s} .$$

10- Pas de temps suivant à partir de l'étape 4.

#### IV. APPLICATION DU MODELE

Ce modèle est appliqué pour simuler la solidification d'un alliage Al-Mg, avec deux méthodes de définition des cellules interface. Les quatre premières cellules entourant la cellule solide (voisinage de Von Neuman), sont considérées comme interface dans l'une et les huit cellules (c'est à dire tout l'entourage premier voisin de la cellule solide) (voisinage de Moore) dans l'autre.

L'alliage, à l'état liquide, est contenu dans un domaine carré, de  $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ , à la température  $T_0 = 884.80661\text{K}$  et une concentration en soluté  $c_0 = 0.080000$ .

Trois degrés de surfusion thermique,  $\Delta T = T_0 - T_w$ , sont utilisés : ( $\Delta T = 3\text{K}$ ,  $\Delta T = 5\text{K}$  et  $\Delta T = 10\text{K}$ ), et deux pas de temps :  $\Delta t = 10^{-3}\text{s}$  et  $\Delta t = 10^{-4}\text{s}$ .

Le coefficient d'anisotropie de la tension de surface  $\delta$  prend, selon le besoin, différentes valeurs dans le domaine :  $0 \leq \delta < 1$ .

Les conditions aux limites appliquées aux parois du domaine sont :

$$T_w = 884.80661\text{K} - \Delta T$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial y} = 0$$

Les propriétés physiques et thermiques de l'alliage Al-8%Mg utilisé ont été estimés à l'aide des propriétés des éléments Al et Mg données dans le tableau suivant :

Propriété	Symbole	unité	Al	Mg	Al-Mg	
Conductivité thermique	$K$	W/mK	204.0	171.0	/	
Chaleur spécifique	$C_P$	j/kgK	896.0	1013.0	/	
Densité	$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	2707.0	1746.0	/	
Chaleur latente de fusion	$L_v$	j/kg	/	/	3.9E5	
Coefficient de diffusion	L	$D_L$	m <sup>2</sup> /s	/	/	1E-9
	S	$D_S$	m <sup>2</sup> /s	/	/	1E-13
Coefficient de Gibbs-Thomson	$\Gamma$	Km	/	/	1E-7	

#### **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE 4**

**(Zhu, 2007)**: M. F. Zhu and D. M. Stefanescu; Virtual Front Tracking Model for the Quantitative Modeling of Dendritic Growth in Solidification of Alloys, *Acta Materialia*, Vol. 55.

**(Zhu Hong, 2007)**: M. F. Zhu, C. P. Hong D. M. Stefanescu and Y. A. Chang; Computational Modeling of Microstructure Evolution in Solidification of Aluminum Alloys, *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 38B.

**(Beltran-Sanchez, 2004)**: L. B. Sanchez and D. M. Stefanescu; A Quantitative Dendrite Growth Model and Analysis of Stability Concepts, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 35A.

**(Beltran-Sanchez, 2003)**: L. B. Sanchez and D. M. Stefanescu; Growth of Solutal Dendrites: A Cellular Automaton Model and its Quantitative Capabilities, *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 34A.

**(Zhao, 2003)**: P. Zhao, M. Vénere, J. C. Heinrich and D. R. Poirier; Modeling Dendritic Growth of Binary Alloy, *Journal of Computational Physics*, Vol. 188.

**(ASM, 1992)**: ASM Handbook, vol. 3, Alloy Phase Diagram.

## **CHAPITRE 5**

### **SIMULATION DE LA CROISSANCE D'UNE DENDRITE EQUIAXE DANS L'ALLIAGE AL-8%MG**

#### **I. INFLUENCE DES PARAMETRES NUMERIQUES SUR LES RESULTATS DE LA SIMULATION**

##### **I. 1 Anisotropie artificielle**

La simulation de la formation de la dendrite a été réalisée à l'aide des deux méthodes de définition des cellules interface, quatre voisins et huit voisins. Les résultats obtenus pour une orientation, de la cellule seed, de  $0^\circ$  par rapport aux directions orthogonales, dans les trois maillages :  $103 \times 103$ ,  $203 \times 203$  et  $403 \times 403$ , sont reportés dans les figures 5.1-1 – 5.1-5. La première remarque, évidente et très visible sur ces résultats, est que quelque soient les circonstances dans lesquelles nous faisons évoluer la solidification, la dendrite obtenue par la méthode de quatre voisins, se développe suivant les quatre directions orthogonales. La direction de croissance de la dendrite obtenue par cette méthode n'est pas influencée par le maillage. La modification du degré de surfusion n'influe pas non plus. La dendrite simulée par la méthode de quatre voisins se développe suivant l'orientation des cellules du maillage. Que la surfusion n'influe pas, cela pourrait se comprendre mais que la diminution de la résolution à un point assez grossier, n'ait aucun effet, cela prouve que la direction de la croissance est gouvernée par l'orientation de la grille. Il s'agit d'une anisotropie artificielle. La procédure dans laquelle chaque cellule solide réagit uniquement avec ses quatre premiers voisins, induit une anisotropie numérique dans l'orientation cristallographique de la dendrite. Les quatre directions perpendiculaires de la grille dominant le processus

de croissance de la dendrite et les résultats obtenus par cette méthode n'ont donc aucun sens.

Lorsque tout l'entourage de la cellule solide est pris en compte (comme interface), les résultats montrent que la direction privilégiée de la croissance de la dendrite dépend de la résolution et du degré de la surfusion thermique. Pour  $\Delta T = 3K$  (Fig. 5.1-1), la direction  $0^\circ$  n'est obtenue que dans un maillage affiné à  $0.5 \mu m$  ( $403 \times 403$  cellules).

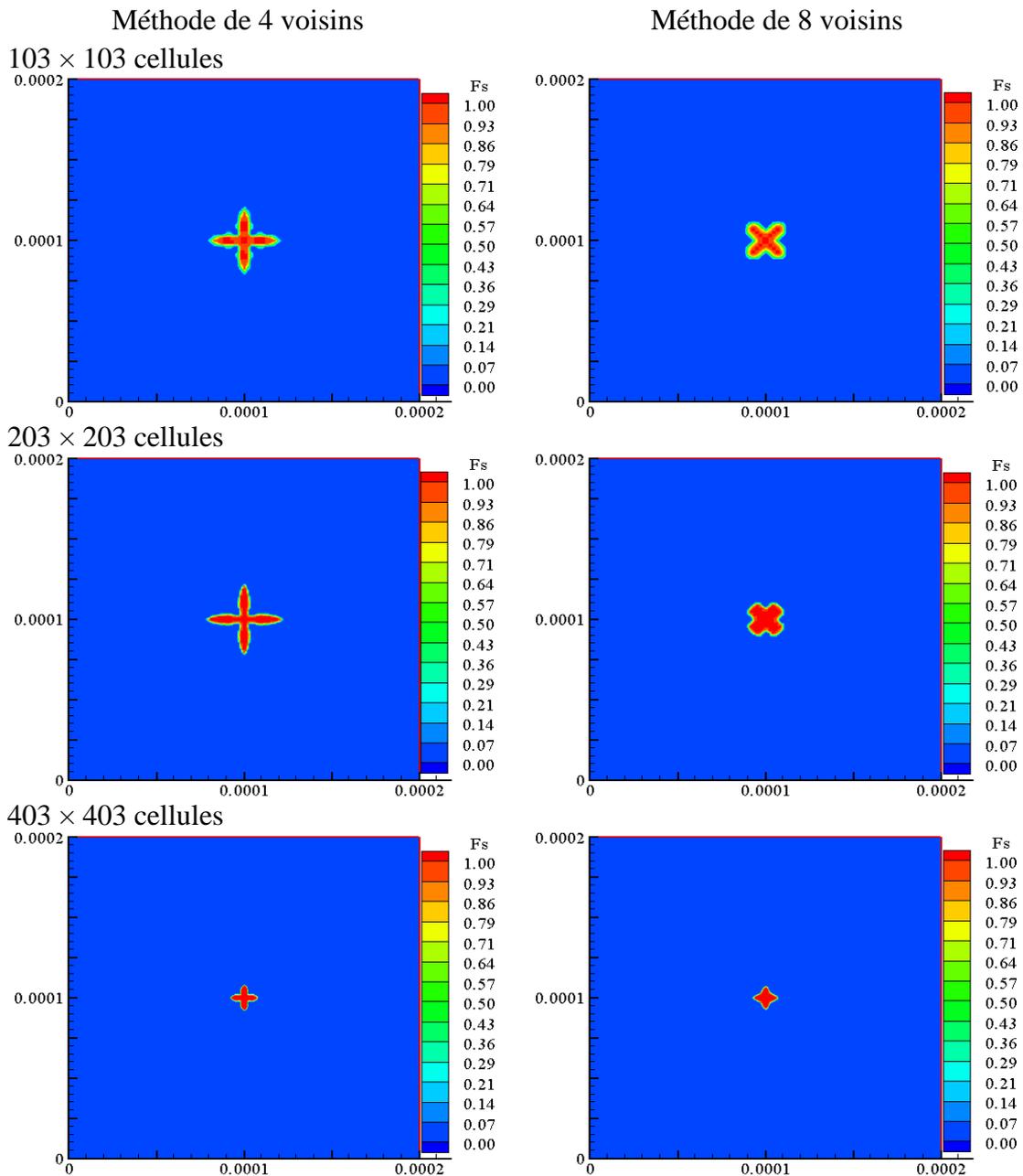


Fig. 5.1- 1 – Simulation d'une dendrite équiaxe dans l'alliage Al-8% Mg avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s à  $\Delta T = 3K$ , pour  $\Delta t = 10^{-3}s$ , en utilisant les deux méthodes de capture des cellules d'interface, dans les trois résolutions choisis.

Pour les autres maillages les quatre pétales de la dendrite se développent dans une direction faisant  $45^\circ$  avec les axes.

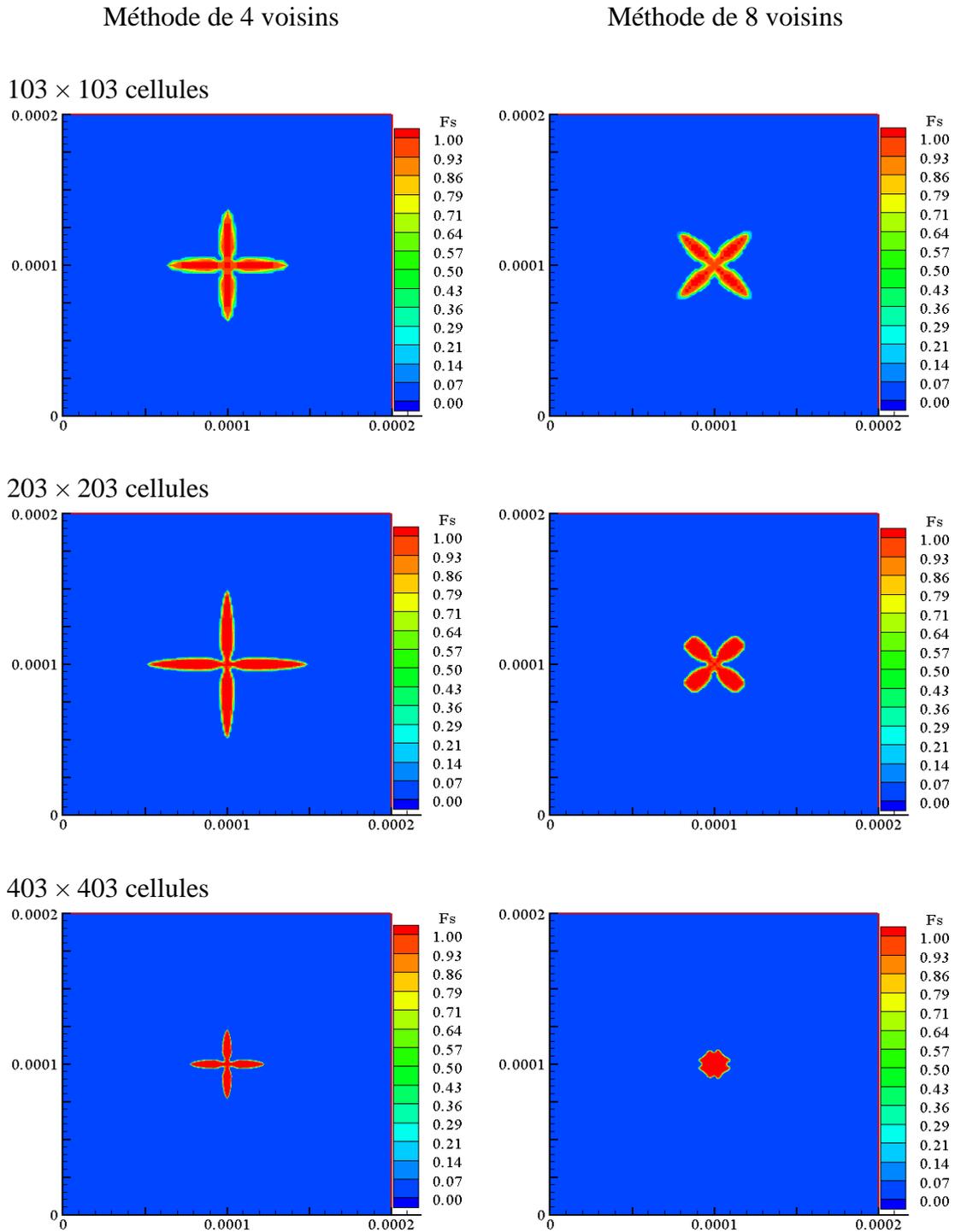


Fig. 5.1- 2 – Simulation d'une dendrite équiaxe dans l'alliage Al-8% Mg avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s à  $\Delta T = 5K$ , pour  $\Delta t = 10^{-3}s$ , en utilisant les deux méthodes de capture des cellules d'interface, dans les trois résolutions choisis.

L'augmentation du degré de surfusion thermique ( $\Delta T = 5K$  (Fig. 5.1-2), ou bien  $\Delta T = 10K$  (Fig. 5.1-3)), impose à la dendrite une orientation cristallographique à  $45^\circ$  par rapport aux directions orthogonales.

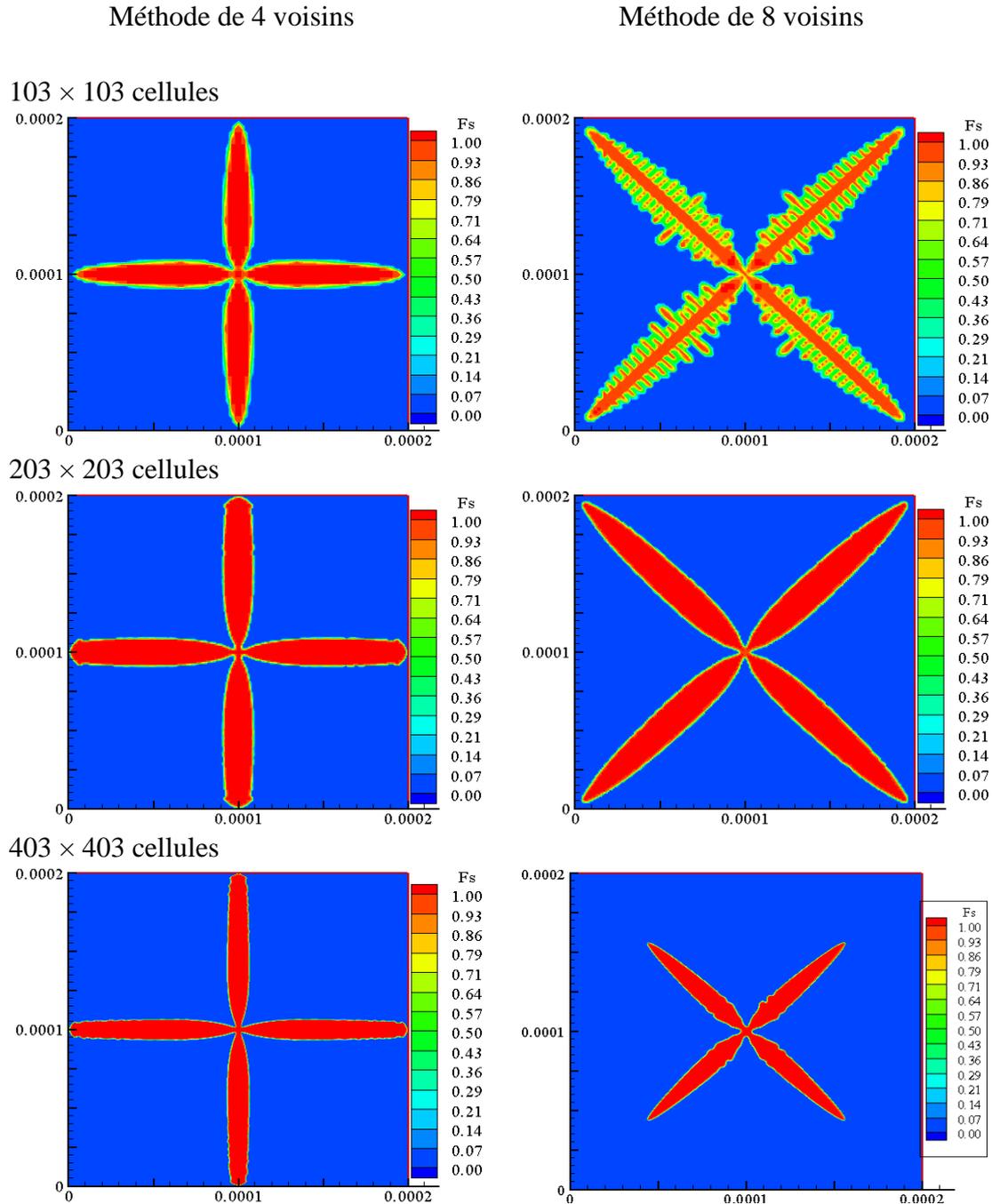


Fig. 5.1- 3 – Simulation d'une dendrite équiaxe dans l'alliage Al-8% Mg avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s à  $\Delta T = 10K$ , pour  $\Delta t = 10^{-3}s$ , en utilisant les deux méthodes de capture des cellules d'interface, dans les trois résolutions choisis.

Lorsque le degré de surfusion augmente, la dendrite semble grandir dans la direction qui lui fournit le plus d'espace possible (selon la diagonale). Ceci peut s'expliquer par le fait que pour les cas de surfusions  $\Delta T = 5K$  et  $\Delta T = 10K$ , la vitesse de croissance de la dendrite est tellement élevée que celle-ci choisit d'éviter la direction qui la rapproche le plus tôt des parois du domaine. C'est pour cette raison que dans les maillages grossiers  $103 \times 103$  et  $203 \times 203$ , la croissance prend cette direction ( $45^\circ$  par rapport aux axes) même pour la surfusion la plus faible ( $\Delta T = 3K$ ). La dendrite grandit plus rapidement dans les mauvaises résolutions et par suite elle choisit la diagonale, qui lui procure le maximum d'espace pour se développer, c'est logique.

Dans tout les cas, les résultats de la simulation par la méthode de huit voisins ne montrent pas d'anisotropie artificielle. Il est très évident que cette anisotropie a été éliminée, mais pour nous assurer encore plus qu'elle résulte d'une mauvaise prise en compte des cellules d'interface, nous avons réduit le pas du temps à  $10^{-4}s$ . Les résultats sont exposés dans les figures 5.1- 4 et 5.1- 5.

Alors que la réduction du pas de temps n'a aucun effet sur les résultats obtenus par la méthode de quatre voisins, elle a amélioré ceux obtenus par la méthode de huit voisins. La simulation de la dendrite a alors donné de bon résultats même dans un maillage moyen, pour le cas de surfusion thermique 3K. La dendrite se développe dans la direction  $0^\circ$  (pour le cas  $\Delta T = 3K$ ), dans un maillage  $203 \times 203$  cellules (Fig. 5.1- 4). La réduction du pas de temps a donc corrigé l'effet du maillage. Pour le cas de surfusion thermique 5K, le résultat s'est aussi amélioré. Pour le cas  $\Delta T = 5K$ , lorsque les dimensions du maillage sont réduites à  $403 \times 403$  cellules, la dendrite grandit dans la direction attribuée à la cellule seed (Fig. 5.1- 5).

Ceci prouve encore une fois que l'anisotropie artificielle disparaît dans les résultats obtenus par des simulations qui prennent en compte tout l'entourage voisin de la cellule solide, comme interface. Il n'y a plus de doute.

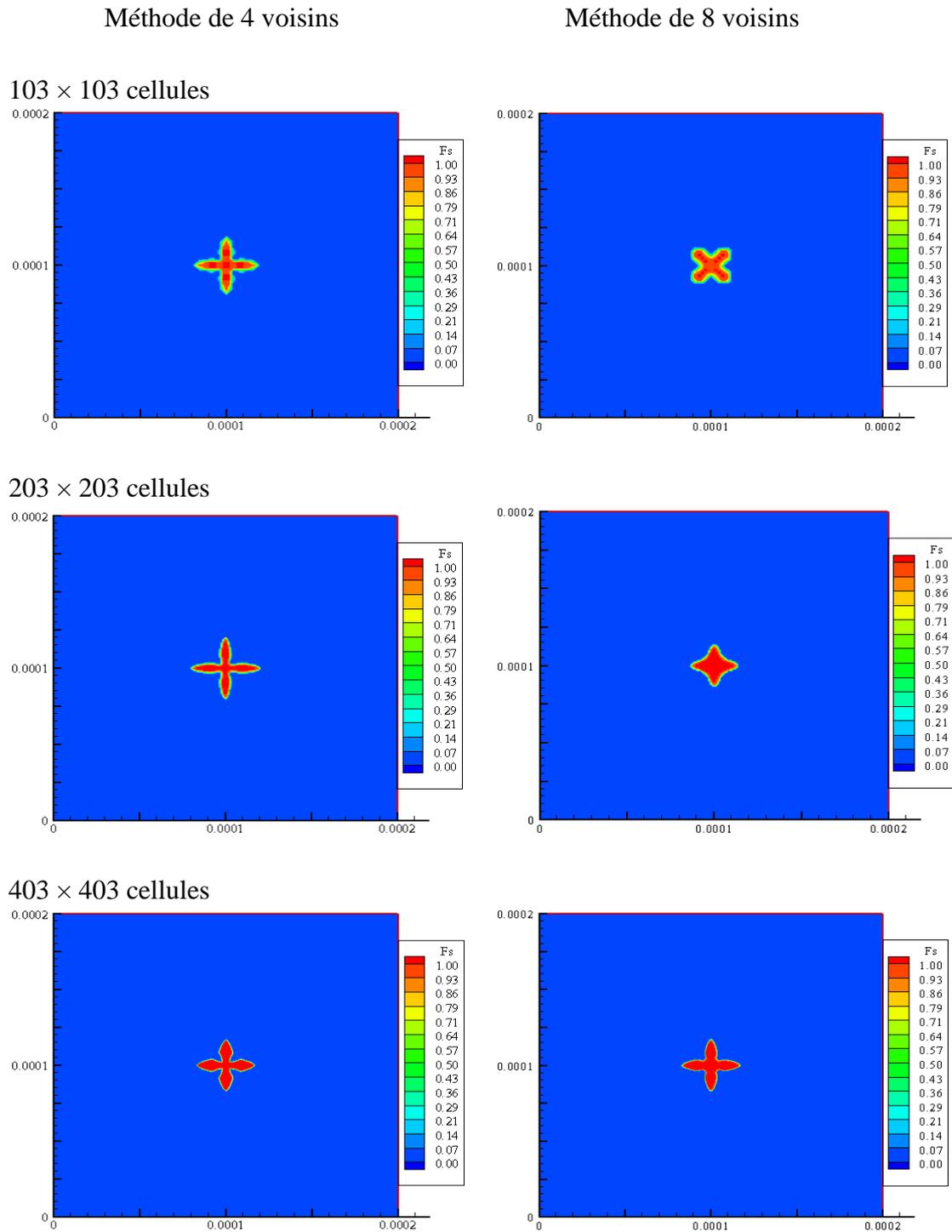


Fig. 5.1- 4 – Simulation de la dendrite avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s à  $\Delta T = 3K$ , en utilisant les deux méthodes de capture des cellules d'interface, dans les trois résolutions choisies.  $\Delta t = 10^{-4}s$ .

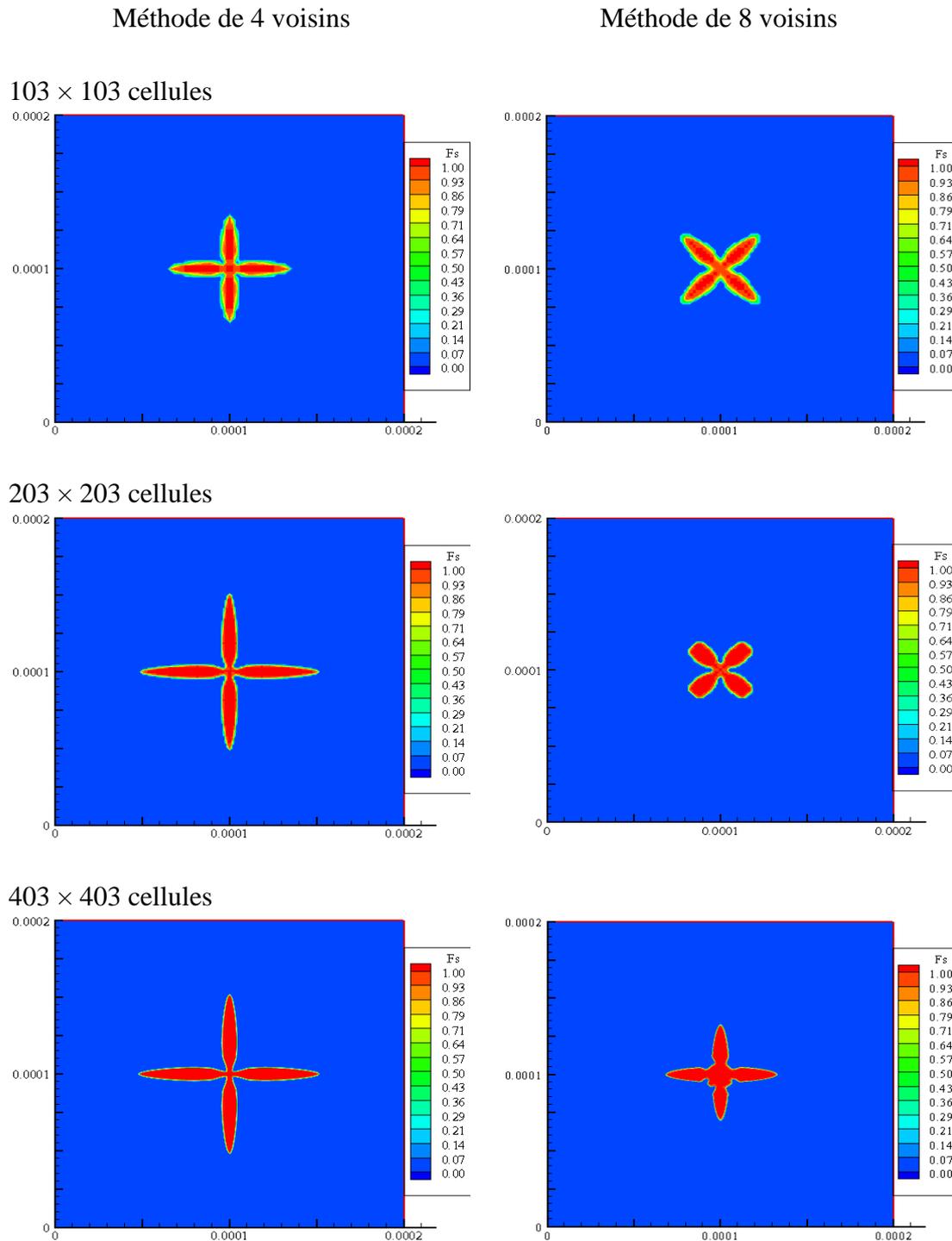


Fig. 5.1- 5 – Simulation de la dendrite avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s à  $\Delta T = 5K$ , en utilisant les deux méthodes de capture des cellules d'interface, dans les trois résolutions choisis.  $\Delta t = 10^{-4}s$ .

Pour mettre en évidence plus clairement cette anisotropie numérique, la direction de croissance confondue avec l'orientation de la grille ( $0^\circ$ ) pourrait être considérée comme pas convenable. Nous avons alors fait incliner la cellule mère (le germe solide) de  $15^\circ$

par rapport aux directions orthogonales pour confirmer nos suggestions. Les simulations obtenues avec la méthode de quatre voisins sont rassemblés dans la figure 5.1- 6, et celles obtenues avec la méthode de huit voisins dans la figure 5.1- 7.

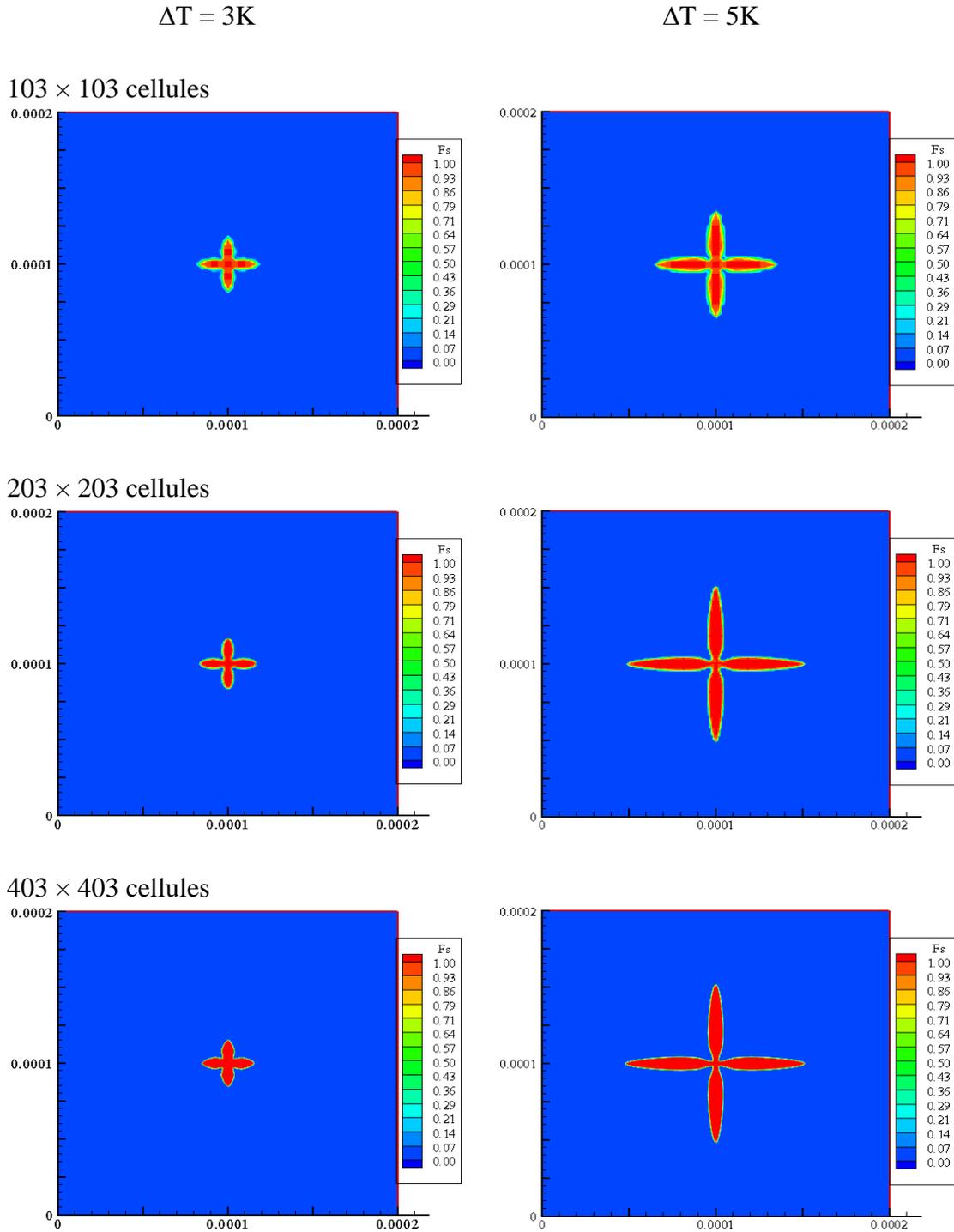


Fig. 5.1- 6 – Simulation de la dendrite obtenue, par la méthode de 4 voisins, après 1s à  $\Delta T = 3K$  et  $\Delta T = 5K$ .  $\Delta t = 10^{-4}s$ , et  $\theta = 15^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

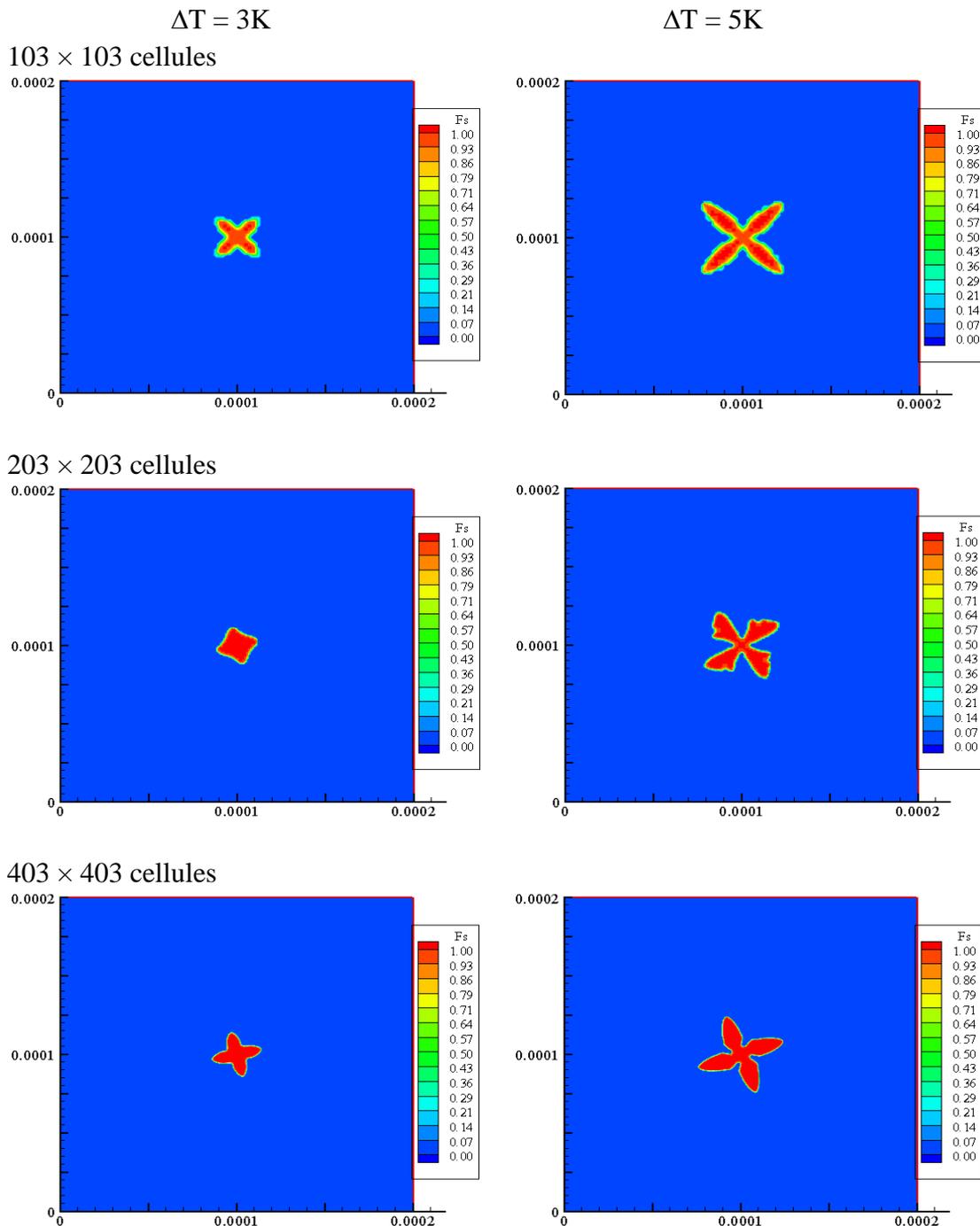


Fig. 5.1- 7 – Simulation de la dendrite obtenue, par la méthode de 8 voisins, après 1s à  $\Delta T = 3K$  et  $\Delta T = 5K$ .  $\Delta t = 10^{-4}s$ , et  $\theta = 15^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

Rien à faire, la dendrite choisi toujours l'orientation de la grille comme direction de croissance lorsque les calculs sont faits par la méthode des quatre premiers voisins (Fig. 5.1- 6), alors qu'elle suit l'orientation qu'on lui impose à l'état initial, lorsque les calculs sont faits par la méthode de huit voisins, à condition de la faire évoluer dans le

maillage adéquat (Fig. 5.1- 7). Il n'y a donc plus de doute que la simulation de la croissance dendritique équiaxe, dans laquelle la capture de l'interface liquide – solide se fait uniquement par les quatre premiers voisins, introduit une anisotropie numérique dans la direction privilégiée par la dendrite.

Cette anisotropie gouverne la croissance de la dendrite à tel point qu'elle atteint même sa morphologie. Les pics de la dendrite ne sont plus paraboliques comme prévus aussi bien par les théories analytiques que par les résultats expérimentaux connus à ce jour. Après 20s, dans la surfusion thermique de 3K, ou bien 5s dans la surfusion de 5K, la dominance des quatre directions orthogonales, donne des pics en forme de losanges (Fig. 5.1- 8).

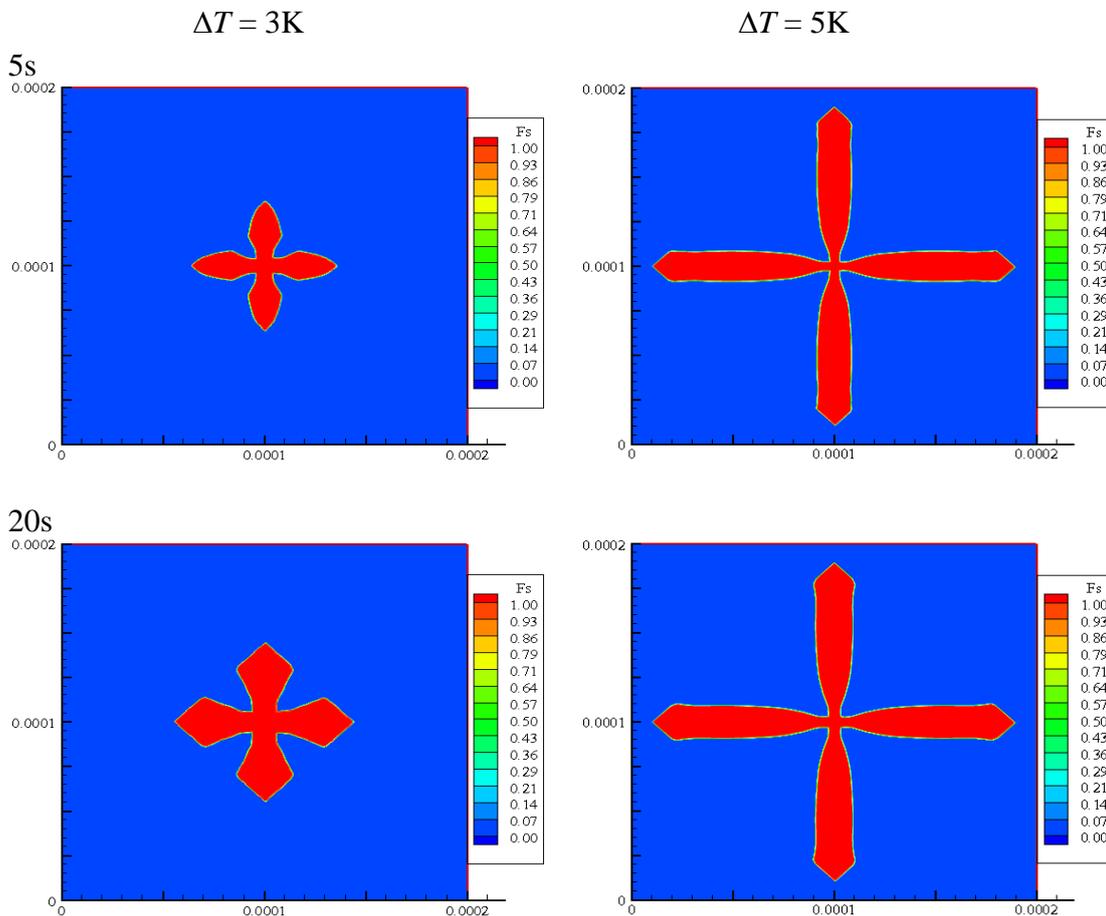


Fig. 5.1- 8 – Simulation de l'évolution de la morphologie de la dendrite au cours du temps dans les deux surfusions  $\Delta T = 3K$  et  $\Delta T = 5K$ , pour  $\Delta t = 10^{-4}s$ . Résultats obtenus dans une résolution de  $403 \times 403$  avec la méthode de 4 voisins.

La figure 5.1- 9 met en évidence que cette anisotropie affecte même la cinétique de croissance de la dendrite. Le rejet du soluté est, en effet, stimulé le long des axes  $x, y$ .

Après 1s dans la surfusion thermique 3K, la concentration du soluté diminue jusqu'à 8.40% dans les directions orthogonales alors qu'elle n'atteint que 8.47% dans le cas simulé par la méthode de huit voisins (Fig. 5.1- 9). La vitesse de croissance de la dendrite simulée par la méthode de quatre voisins est donc favorisée suivant les quatre directions orthogonales.

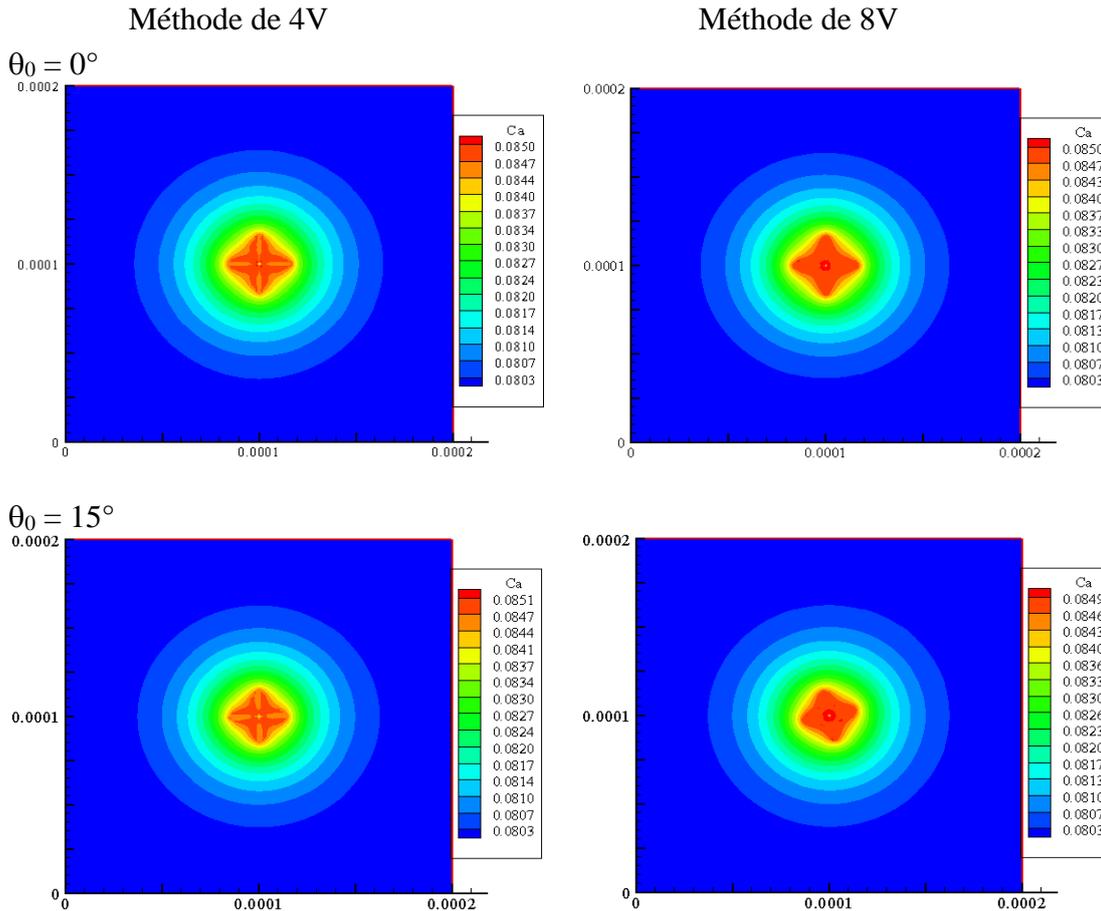


Fig. 5.1- 9 – Champs de soluté obtenu après 1s à  $\Delta T = 3K$ , pour  $\Delta t = 10^{-4}s$ , dans une résolution de  $403 \times 403$  cellules.  $\delta = 0.4$ .

Selon le diagramme d'équilibre de l'alliage Al-Mg, à  $T_0$  et  $c_0$ , la composition de soluté dans la phase solide ( $c_s$ ), doit être inférieure à 8% et celle de la phase liquide ( $c_l$ ) doit être supérieure à 8%. Dans la figure 5.1- 10, on peut remarquer que pendant une durée de 9 secondes, de 1s à 10s,  $c_l$  a augmenté de 8.30% à 8.50% et  $c_s$  a diminué de 8.50% à 8.40%. Les évolutions de  $c_l$  et  $c_s$  sont donc dans le bon sens mais se déroulent lentement. La transmission (transport) du soluté à travers le domaine de calcul se fait à faible vitesse à cause des dimensions réduites ( $200\mu m \times 200\mu m$ ), étant donné que ce système est fermé pour le transport de la matière. Par conséquent, la diffusion est lente

ce qui entraîne aux empilements de soluté (enrichissements) observés dans le liquide voisin de l'interface (Fig. 5.1-9 et 5.1- 10).

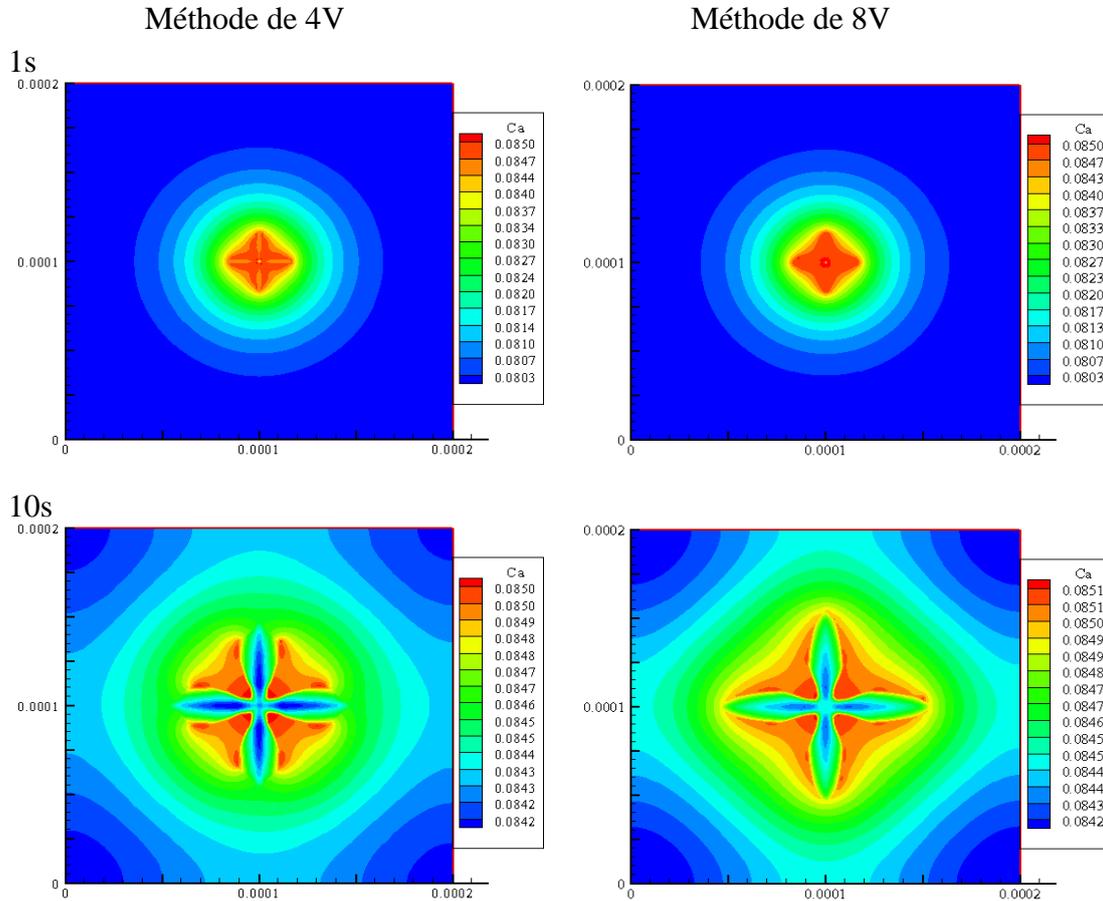


Fig. 5.1- 10 – Champs de compositions obtenus à  $\Delta T = 3K$ , dans une résolution de  $403 \times 403$  cellules, pour  $\Delta t = 10^{-4}s$ , avec  $\delta = 0.4$  et  $\theta_0 = 0^\circ$ .

La quantité de soluté rejetée au liquide à l'interface, peut être estimée à l'aide de l'équation de transport (Eq. 9), par  $\Delta c = c_l(1 - k)\Delta f_s$ , ou bien à l'aide des conditions de la simulation à 8% ( $2/3$ ) = 5.33%. Par conséquent, cette quantité est trop importante pour être évacuée loin de l'interface, et s'empile donc, comme observé dans la figure 5.1- 10, entre les pétales de la dendrite. Après 10s un autre gradient s'installe pour son évacuation.

La simulation par la méthode de quatre voisins montre que ces gradients sont éliminés dans les directions orthogonales (Fig. 5.1- 10) ce qui confirme l'accélération de la vitesse de diffusion le long de cette orientation. L'addition de la quantité de solide et la redistribution du soluté, deux processus qui gouvernent la transformation liquide – solide, sont donc tout les deux affectés par le problème d'anisotropie artificielle lorsque,

lors de la capture du front de solidification, uniquement les quatre premiers proches voisins sont pris en compte.

Concernant la fraction de liquide solidifiée, nous n'avons détecté aucune influence de la méthode numérique. Que les calculs soient faits par la méthode de quatre voisins ou bien par celle de huit voisins, les résultats sont les mêmes (Fig. 5.1- 11).

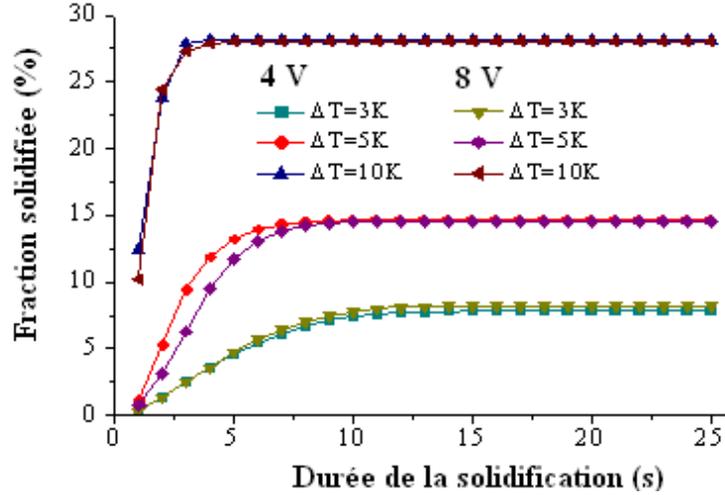


Fig. 5.1- 11 – Variations de la fraction solidifiée, obtenue pour  $\Delta t = 10^{-4}$ s, dans une résolution de  $403 \times 403$  cellules, avec les deux méthodes de capture de l'interface, pour les trois degrés de surfusions thermique.

Le maximum de fraction solidifiée  $f_S$  se forme selon la relation :

$$f_S(c_s - c_l) = c_0 - c_l \text{ qui donne } f_S = \frac{c_0 - c_l}{c_l(k - 1)}$$

Et à l'aide des valeurs de  $c_l$  obtenues pour les degrés de surfusions thermique 3K, 5K et 10K, ce maximum peut être évalué à 8.1122 % pour le cas de surfusion  $\Delta T = 3$ K et à 14.8143 % pour  $\Delta T = 5$ K et à 28.2142 % pour  $\Delta T = 10$ K. Ces valeurs sont en très bon accord avec ceux calculés numériquement (Fig. 5.1- 11)

La quantité de solide formée  $\Delta f_S$  est ajoutée aux quatre ou bien aux huit cellules liquides entourant la cellule solide, tant que  $c_l^* - c_l$  demeure  $> 0$ . Elle dépend de  $c_l^*$  et de  $c_l$  :

$$\Delta f_S = \frac{c_l^* - c_l}{(1 - k)c_l}$$

$c_l^*$  est déterminée à l'aide de  $\Delta T$  et  $\Gamma \kappa F$  (dans l'équation 12) et  $c_l$  est déterminée à l'aide de l'équation de transport solutal (9).  $\Delta f_S$  dépend donc uniquement de  $c_l$  pour les

mêmes valeurs de  $\Delta T$ ,  $\delta$  et  $\theta_0$ , (i.e. de la redistribution du soluté à travers les cellules interface). Par conséquent, pour les mêmes valeurs de  $\Delta T$ ,  $\delta$  et  $\theta_0$ , l'addition du solide dépend directement de la quantité de soluté rejetée (à l'interface). Ceci est bien mis en évidence par la relation (Eq. 10) :

$$\Delta c = (1 - k)c_l \Delta f_s$$

Et comme chaque cellule solide distribue la même quantité de soluté à ses premiers quatre ou huit proches voisins, la quantité de solide formée est indépendante de la définition des cellules d'interface. L'accélération de la cinétique observée dans les résultats des figures 5.1- 9 et 5.1- 10, pour les dendrites obtenues par la méthode de quatre voisins, est due au fait que lorsque la même quantité est divisée par 4, chaque partie du résultat est évidemment plus importante que celle qui résulte de la division par 8. L'anisotropie artificielle affecte donc la distribution du solide formé dans l'espace entourant la cellule solide mais pas sa quantité.

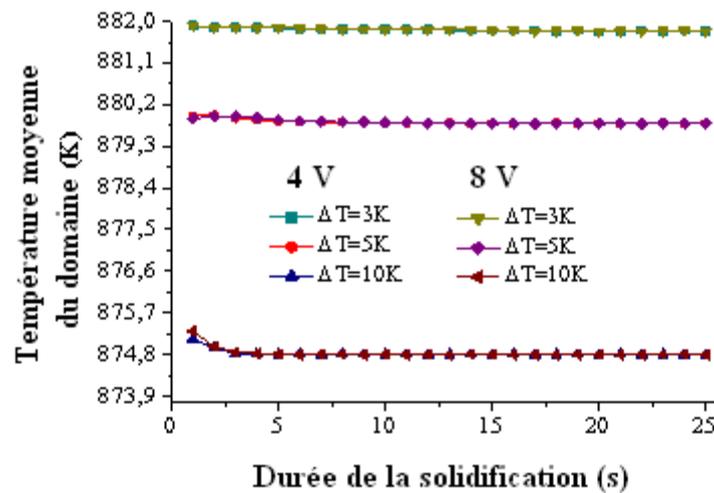


Fig. 5.1- 12 – Variations de la température, obtenue pour  $\Delta t = 10^{-4}$ s, avec les deux méthodes de définition des cellules d'interface, dans les trois degrés de surfusions. Résultats obtenus dans une résolution de  $403 \times 403$  cellules.

Les résultats sont ainsi en très bon accord avec la logique, ce qui prouve l'efficacité de ce modèle pour l'approche physique du phénomène de la solidification dendritique équiaxe. Une autre confirmation du bon déroulement des choses est que la température initiale du domaine ( $T_w = T_0 - \Delta T$ ) est maintenue constante (Fig. 5.1- 12).

Pour  $\Delta T = 3K$  la température moyenne se stabilise autour de 881.80661K, pour  $\Delta T = 5K$  elle se stabilise autour de 879.80661K et pour  $\Delta T = 10K$  autour de 874.80661K.

## I. 2 Influence du maillage

Les simulations réalisées dans les trois maillages  $103 \times 103$  cellules,  $203 \times 203$  cellules et  $403 \times 403$  cellules, pour les trois cas de surfusions thermique montrent que la taille des mailles a une influence remarquable sur la cinétique de la croissance de la dendrite, sa morphologie et son orientation cristallographique (Fig. 5.2- 1 – 5.2- 3).

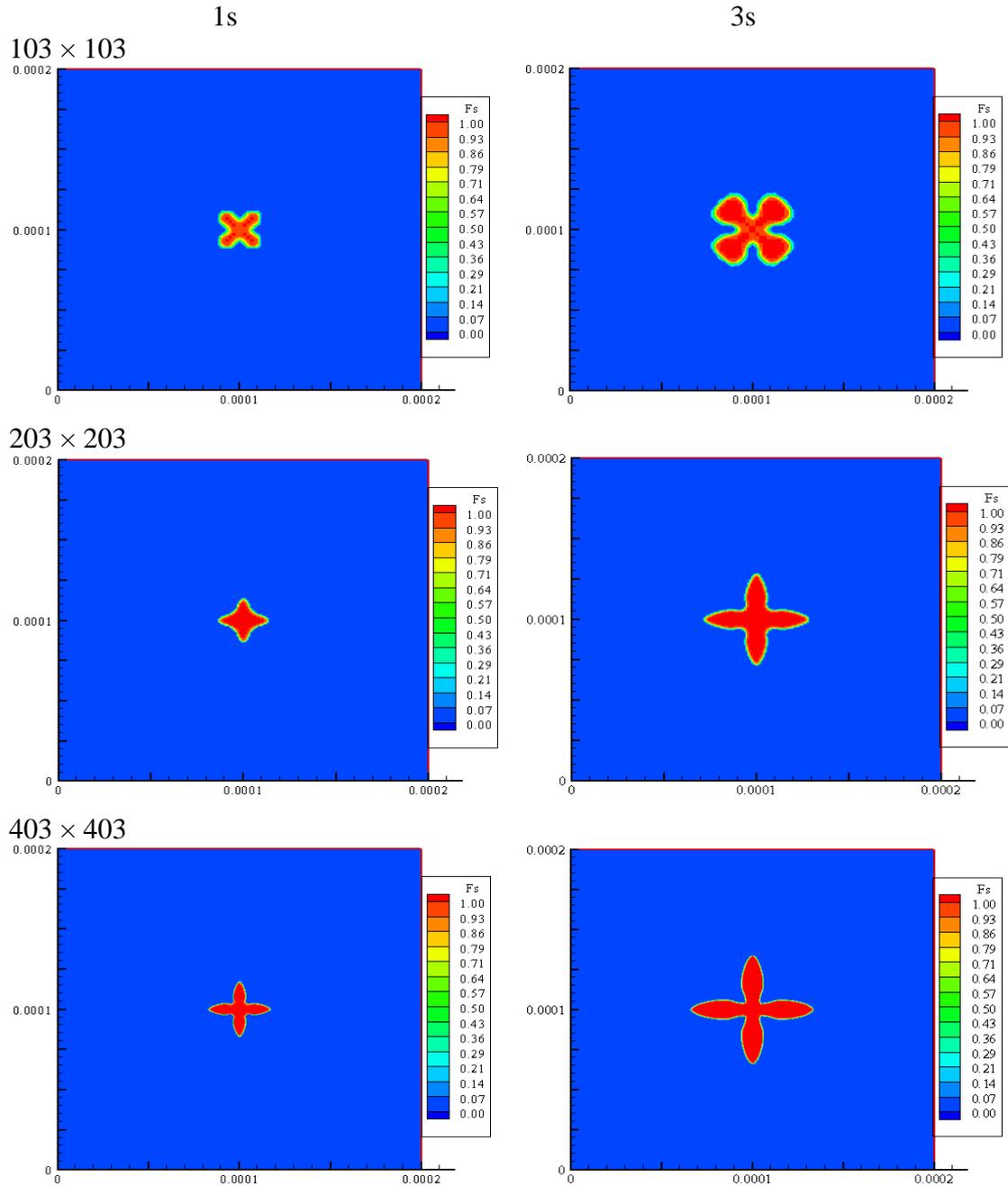


Fig. 5.2- 1 – Influence du maillage sur la morphologie, la cinétique de la croissance et l'orientation cristallographique de la dendrite, au cours de la durée de la solidification, pour le cas : 8 proches voisins,  $\Delta t = 10^{-4}s$ ,  $\Delta T = 3K$ , et  $\theta = 0^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

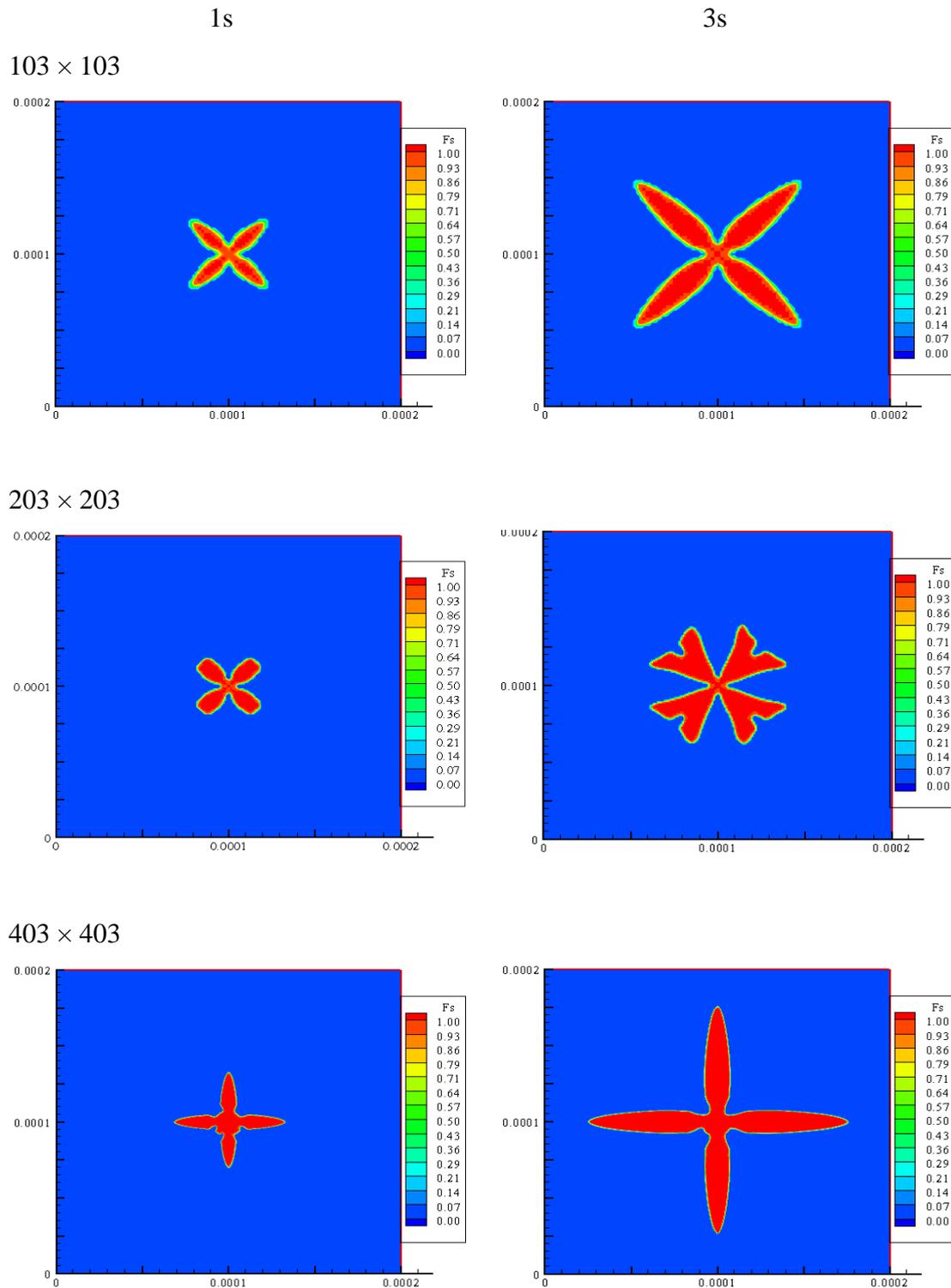


Fig. 5.2- 2 – Influence du maillage sur la morphologie, la cinétique de la croissance et l'orientation cristallographique de la dendrite, au cours de la durée de la solidification, pour le cas : 8 proches voisins,  $\Delta t = 10^{-4}s$ ,  $\Delta T = 5K$ , et  $\theta = 0^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

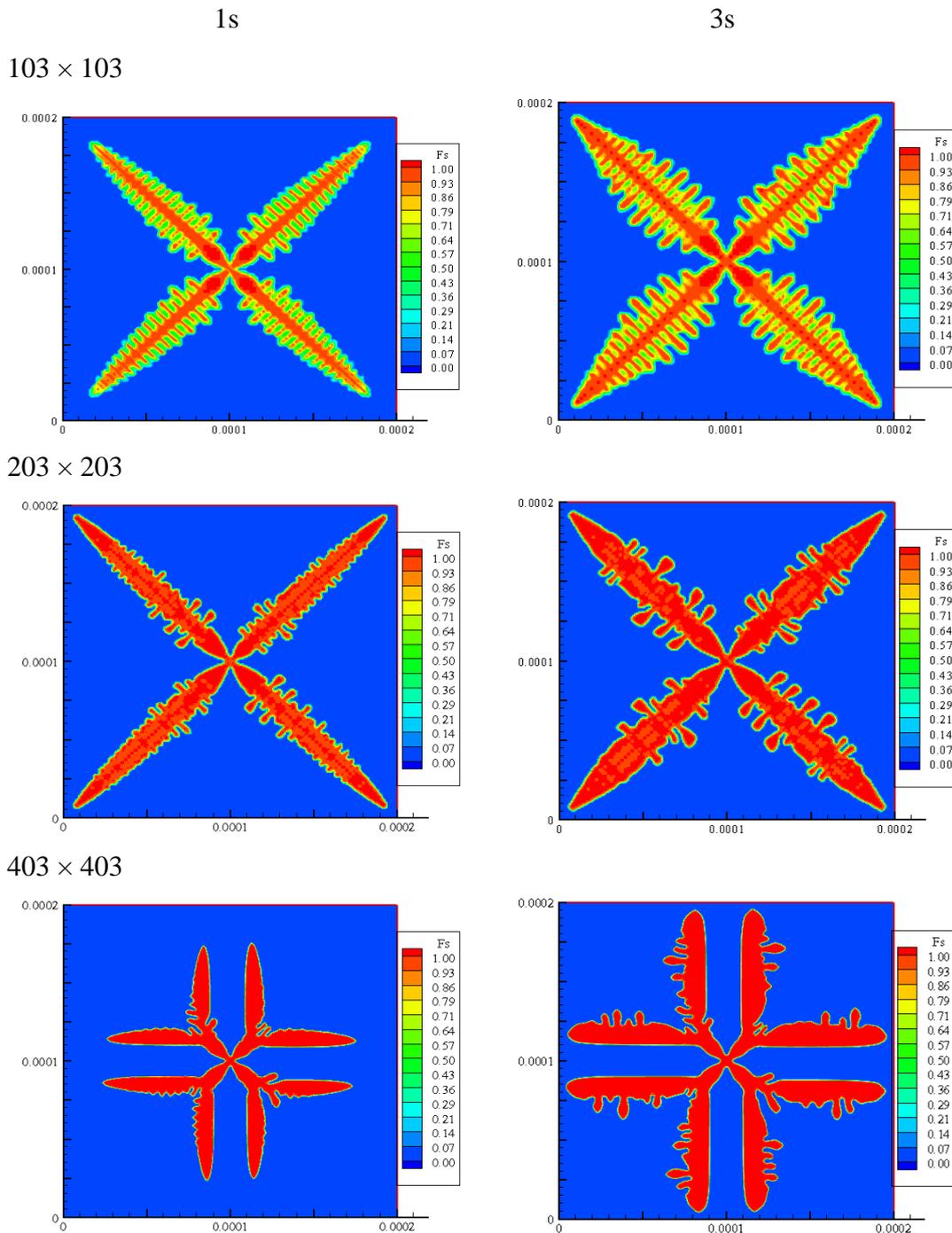


Fig. 5.2- 3 – Influence du maillage sur la morphologie, la cinétique de la croissance et l'orientation cristallographique de la dendrite, au cours de la durée de la solidification, pour le cas : 8 proches voisins,  $\Delta t = 10^{-4}s$ ,  $\Delta T = 10K$ , et  $\theta = 0^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

Après 3 secondes dans chacune des trois surfusions, la taille de la dendrite est nettement la plus grande dans la plus faible résolution (Fig. 5.2- 1 – 5.2- 3). La fraction solidifiée est aussi inférieure lorsque le maillage est affiné (Fig. 5.2- 4). La vitesse de croissance de la dendrite diminue donc avec l'affinement du maillage.

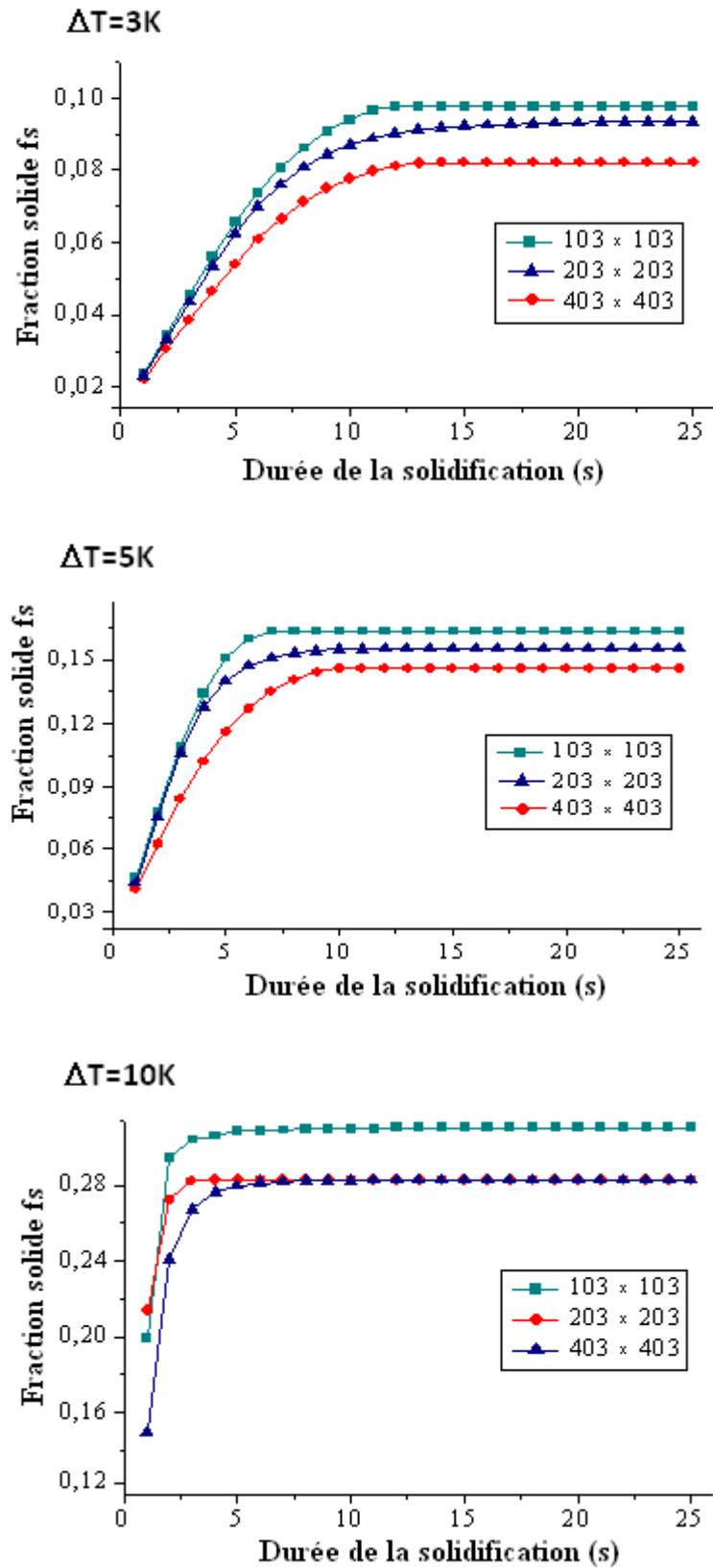


Fig. 5.2- 4 – Variations de la fraction solidifiée, obtenue pour  $\Delta t = 10^{-4}$ s, dans les trois résolutions, avec la méthode de 8 voisins, pour les trois cas de surfusions thermique.

Ceci est dû au fait que l'augmentation du nombre des mailles (cellules) augmente le nombre d'interactions qui se produisent entre elles pour réaliser la transformation liquide – solide, et ralenti de ce fait le processus. Dans le maillage le plus fin ( $403 \times 403$ ), la résolution à l'échelle réduite diminue donc la vitesse de l'évolution.

Concernant l'orientation cristallographique de la dendrite,  $0^\circ$  n'est obtenu que dans la meilleure résolution ( $403 \times 403$ ), et seulement pour  $\Delta T = 3K$  et  $\Delta T = 5K$ . Lorsque le degré de surfusion thermique augmente à  $10K$ , dans les maillages grossiers ( $103 \times 103$  et  $203 \times 203$ ), la dendrite grandit selon la direction qui fait  $45^\circ$  avec les axes du maillage. Cette orientation est obtenue dans les cas des croissances rapides (une faible surfusion dans un maillage grossier ou bien une forte surfusion). Elle est alors adoptée par la dendrite, comme nous l'avons signalé plus haut, pour éviter les parois du domaine. Ce comportement peut être expliqué par le fait que, étant donnée la rapidité du processus de croissance, une grande quantité de soluté est rejetée à l'interface ce qui provoque un gradient assez important pour que la concentration la plus faible,  $\square_\square$ , autrement dit la plus grande force motrice est créée selon la diagonale (la direction au maximum d'espace possible). (Voir la figure 5.1- 10, pour 10s),

Dans les situations intermédiaires ( $\Delta T = 3K$  dans le maillage  $103 \times 103$ ,  $\Delta T = 5K$  dans le maillage  $203 \times 203$  ou bien  $\Delta T = 10K$  dans le maillage  $403 \times 403$ ), la dendrite commence son évolution dans la direction  $45^\circ$  mais lorsque l'état stationnaire commence (après 3s pour  $\Delta T = 3K$  dans  $103 \times 103$  (Fig. 5.2- 1) et  $\Delta T = 5K$  dans  $203 \times 203$  (Fig. 5.2- 2)) et que sa vitesse diminue, une rotation vers  $0^\circ$  est alors observée. Cette rotation se traduit par l'apparition d'un splitting dans les branches de la dendrite.

Ce comportement n'est observé que dans les cas intermédiaires parce que après l'état transitoire les gradients trop forts sont éliminés par diffusion ce qui ralenti le mouvement. A ce moment, l'évolution du front de solidification n'est plus dominée par les degrés de surfusions thermique et constitutionnel mais par celui lié à la courbure ( $F$  dans le terme  $\Gamma KF$  dans l'équation 11). C'est pour cette raison que la dendrite qui se forme dans la surfusion thermique  $10K$  (la plus forte possible) mais dans le maillage le plus fin (qui réduit sa vitesse), se trouve parmi les cas intermédiaires. La figure 5.2- 5 met en évidence très clairement le phénomène de rotation vers l'orientation cristallographique imposée après que l'état transitoire n'ait commencé à disparaître.

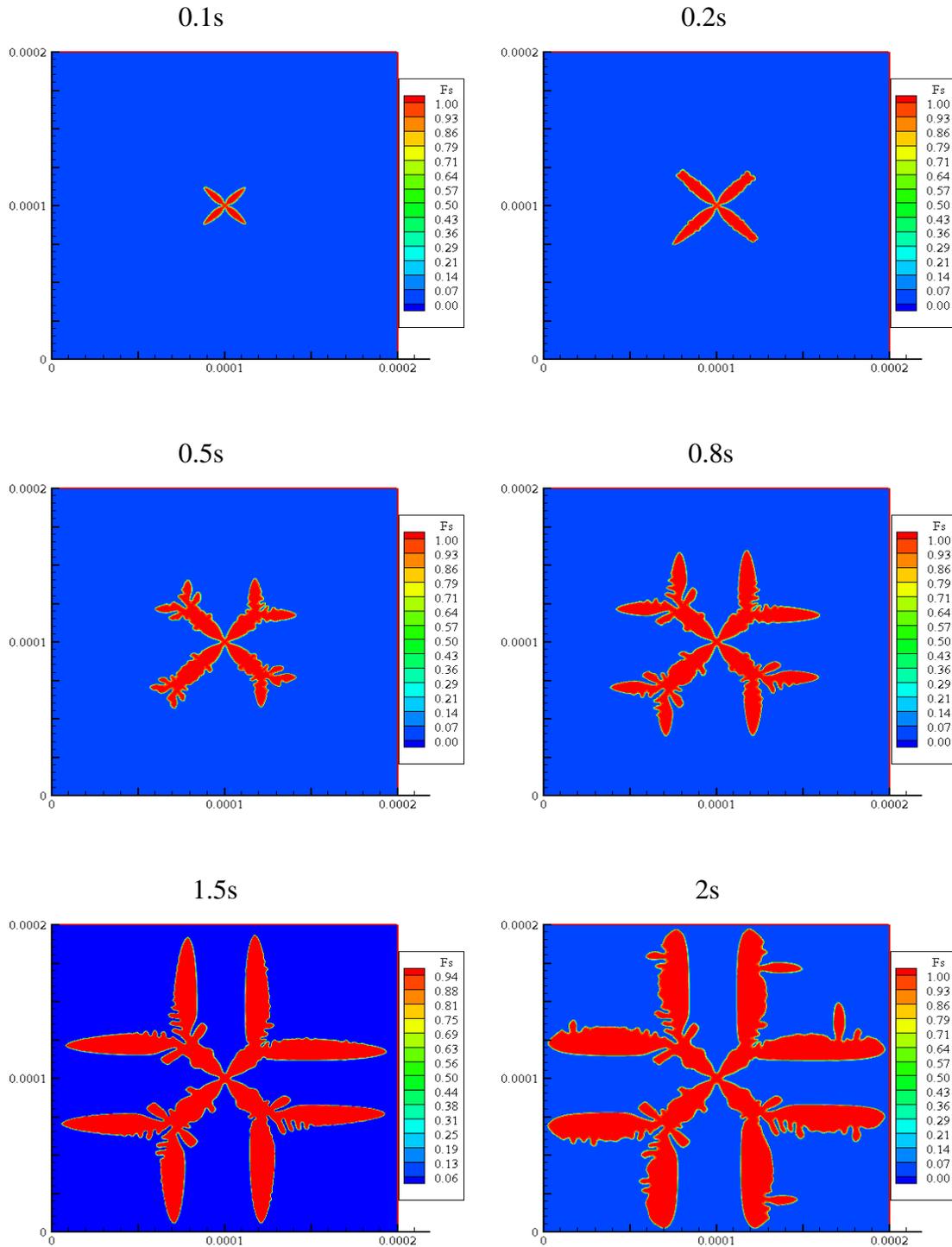


Fig. 5.2- 5 – Simulation de la croissance de la dendrite avec une orientation initiale  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , par la méthode de 8 voisins, pour  $\Delta T = 10\text{K}$  et  $\Delta t = 10^{-4}\text{s}$  dans une résolution de  $403 \times 403$  cellules.

Ce phénomène est aussi mis en évidence à l'aide des simulations dans lesquelles l'orientation cristallographique initiale (de la cellule mère) est de  $15^\circ$  par rapport aux axes  $x$  et  $y$ , dans le maillage  $203 \times 203$  (Fig. 5.2- 6).

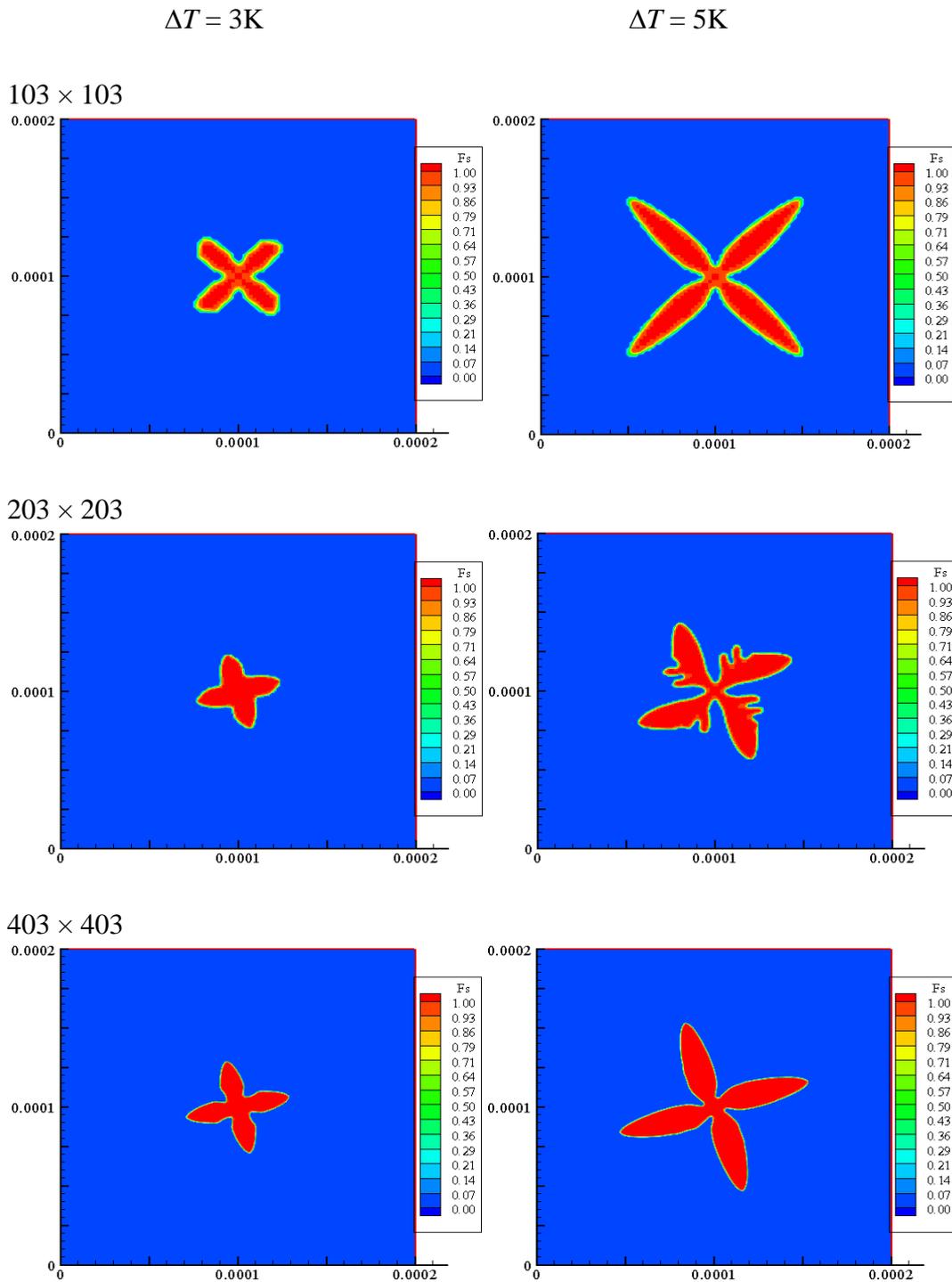


Fig. 5.2- 6 – Simulation de la dendrite après 3s dans chacune des deux surfusions  $\Delta T = 3K$  et  $\Delta T = 5K$ , pour le cas : 8 proches voisins,  $\Delta t = 10^{-4}s$ ,  $\theta = 15^\circ$  et  $\delta = 0,4$ .

Dans les maillages grossiers ( $103 \times 103$  pour  $\Delta T = 5K$  ou bien  $103 \times 103$  et  $203 \times 203$  pour  $\Delta T = 10K$ ), la vitesse de croissance de la dendrite est tellement importante que les gradients thermique et solutal ne sont jamais éliminés et le terme  $\Delta T = T^* - T_f$  (dans l'équation 11) domine l'effet de la courbure ( $F$  dans  $\Gamma KF$  de l'équation 11), pour que la croissance continue dans la direction dans laquelle  $\square_{\square}$  diminue le plus rapidement (la diagonale).

### I. 3 Influence du pas de temps

Le pas du temps doit être choisi sur la base du coefficient de diffusion dans le liquide. Dans le cas de l'alliage Al-Mg,  $\square_{\square}$  est de l'ordre de  $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ , donc dans une résolution de  $0.5 \square \text{ m}$ , le pas de temps le plus stable doit être de l'ordre de  $10^{-5} \text{ s}$ . Nous avons alors choisi de travailler avec  $10^{-3} \text{ s}$  et comparer les résultats avec ceux que donnerait sa diminution à  $10^{-4}$ . Nous avons l'intension de le faire diminuer encore plus (i.e. à  $10^{-5}$ ), mais nous n'avons pas réussi parce que le cout computationnel, des calculs faits avec  $\Delta t = 10^{-5} \text{ s}$ , était trop fort pour nos moyens modestes.

Les résultats obtenus montrent que l'influence du pas de temps dépend du maillage. Dans un maillage de  $103 \times 103$  cellules, aucune des deux valeurs choisies (ni  $10^{-3} \text{ s}$  ni  $10^{-4} \text{ s}$ ) ne donne de résultat (Fig. 5.3- 1 et 5.3- 2). Ce choix ne convient donc pas pour un maillage aussi grossier.

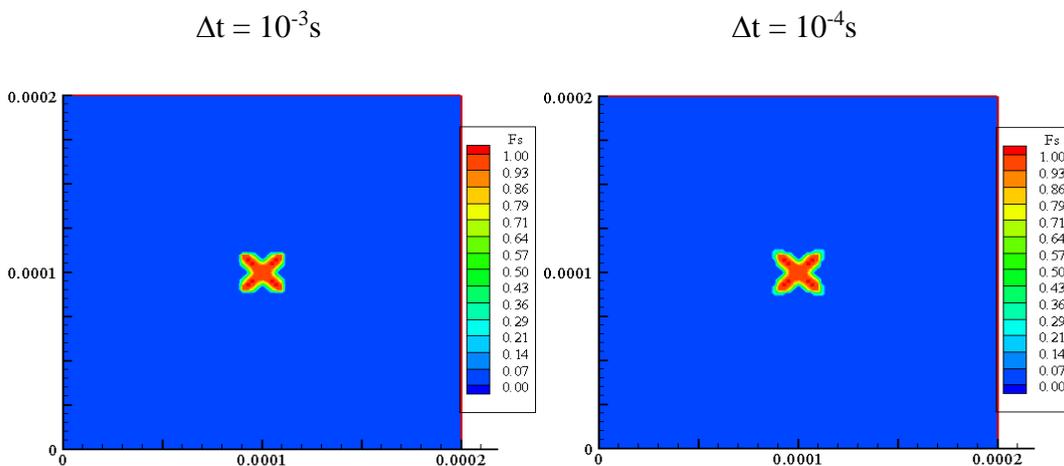


Fig. 5.3- 1 – Résultats de la simulation de la dendrite après 1s à  $\Delta T = 3K$ , dans un maillage à  $103 \times 103$  cellules pour  $\delta = 0.4$  et  $\theta_0 = 15^\circ$ .

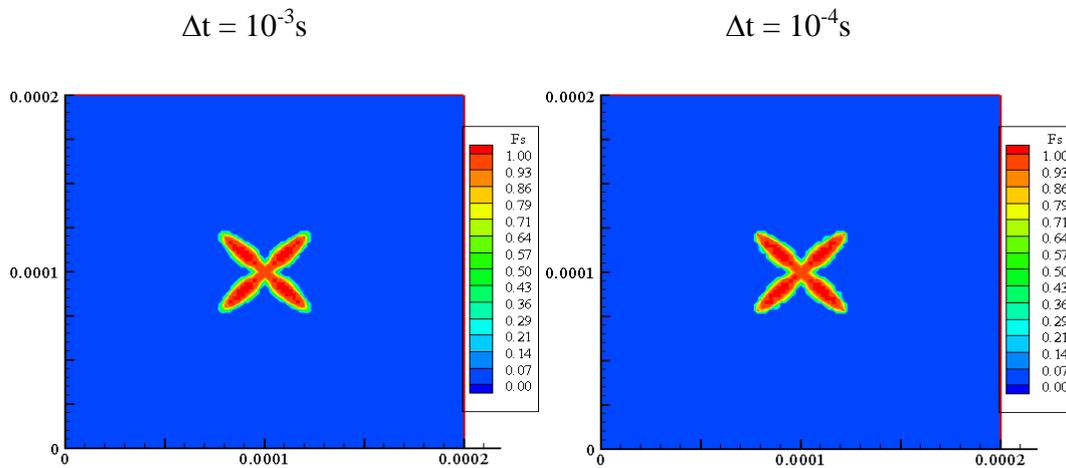


Fig. 5.3- 2 – Résultats de la simulation de la dendrite après 1s à  $\Delta T = 5K$ , dans un maillage à  $103 \times 103$  cellules pour  $\delta = 0.4$  et  $\theta_0 = 15^\circ$ .

Dans ces dimensions de maillage, la croissance de la dendrite ne se fait jamais selon l'orientation cristallographique  $\theta_0$  (que se soit  $0^\circ$  ou  $15^\circ$ , par rapport aux axes  $x, y$ ). Pour les autres maillages, la réduction du pas de temps améliore les résultats.

Dans le maillage le plus fin ( $403 \times 403$ ), elle influe aussi sur la cinétique de la croissance. Une petite correction est alors apportée aux valeurs de la fraction solidifiée lorsque les calculs sont faits par un pas de temps de  $10^{-4}s$ . Les résultats sont, en effet, en un meilleur accord avec les calculs théoriques de la fraction totale de solide formé (Fig. 5.3- 3).

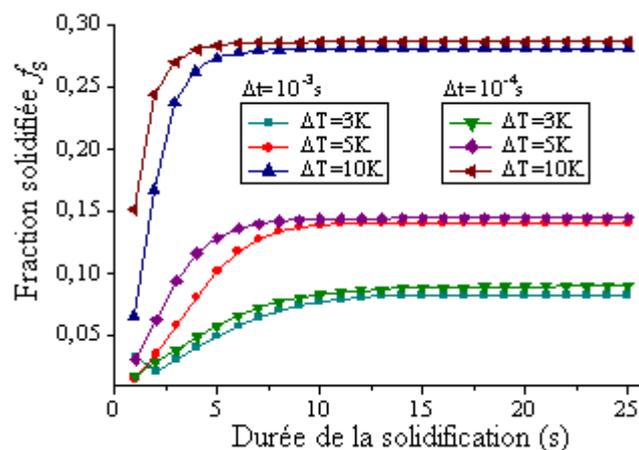


Fig. 5.3- 3 – Variations de la fraction solidifiée pour les trois cas de surfusions, avec les deux pas de temps, dans la résolution  $403 \times 403$ .

Cet effet accélérateur de la cinétique est très visible durant l'état transitoire surtout pour les degrés de surfusions relativement élevés. A ce stade, il est donc très bien mis en évidence (Fig. 5.3- 3 – 5.3- 5).

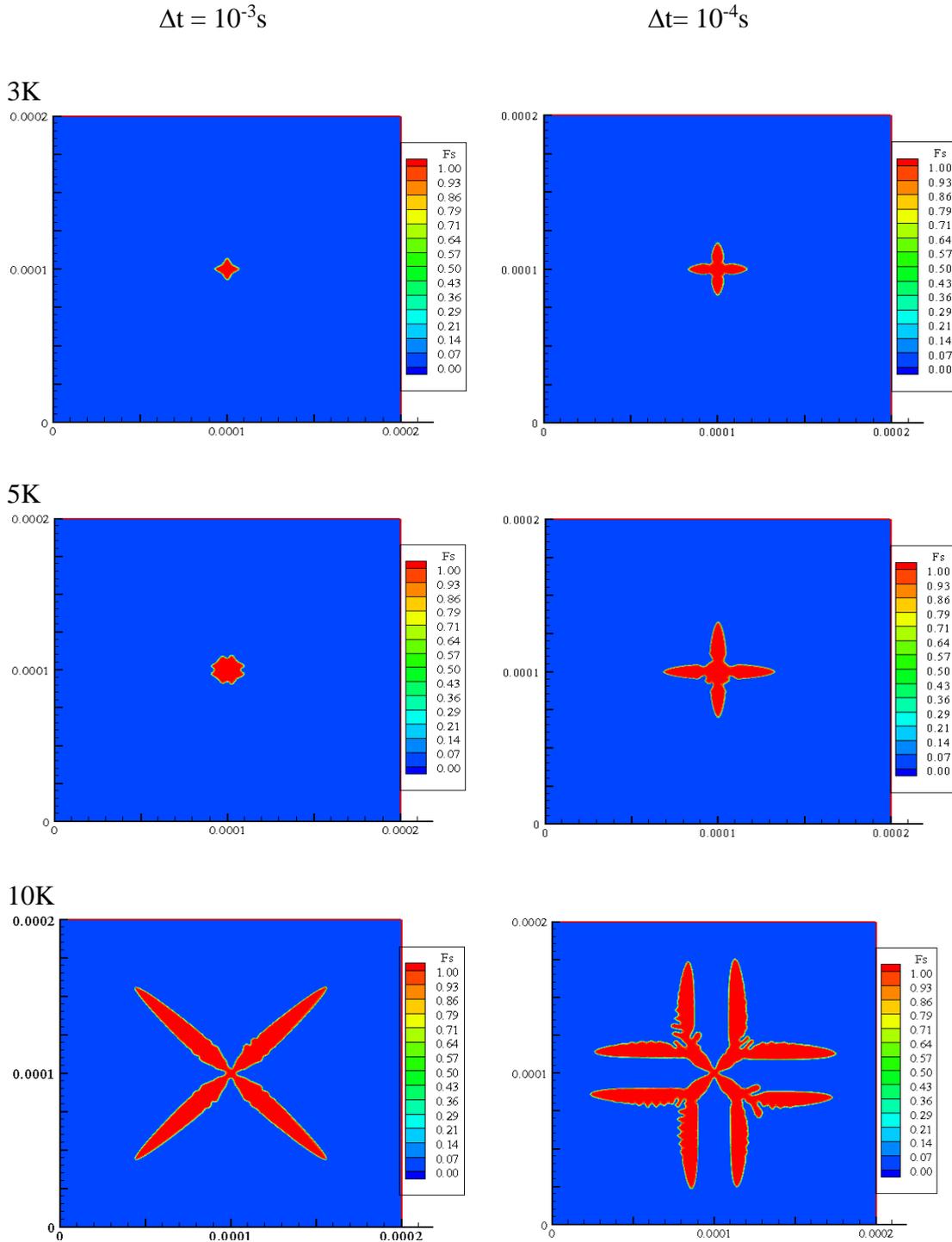


Fig. 5.3- 4 – Simulation de la dendrite avec  $\theta_0 = 0^\circ$  et  $\delta = 0.4$ , après 1s aux différents degrés de surfusions choisis, dans la résolution  $403 \times 403$  cellules.

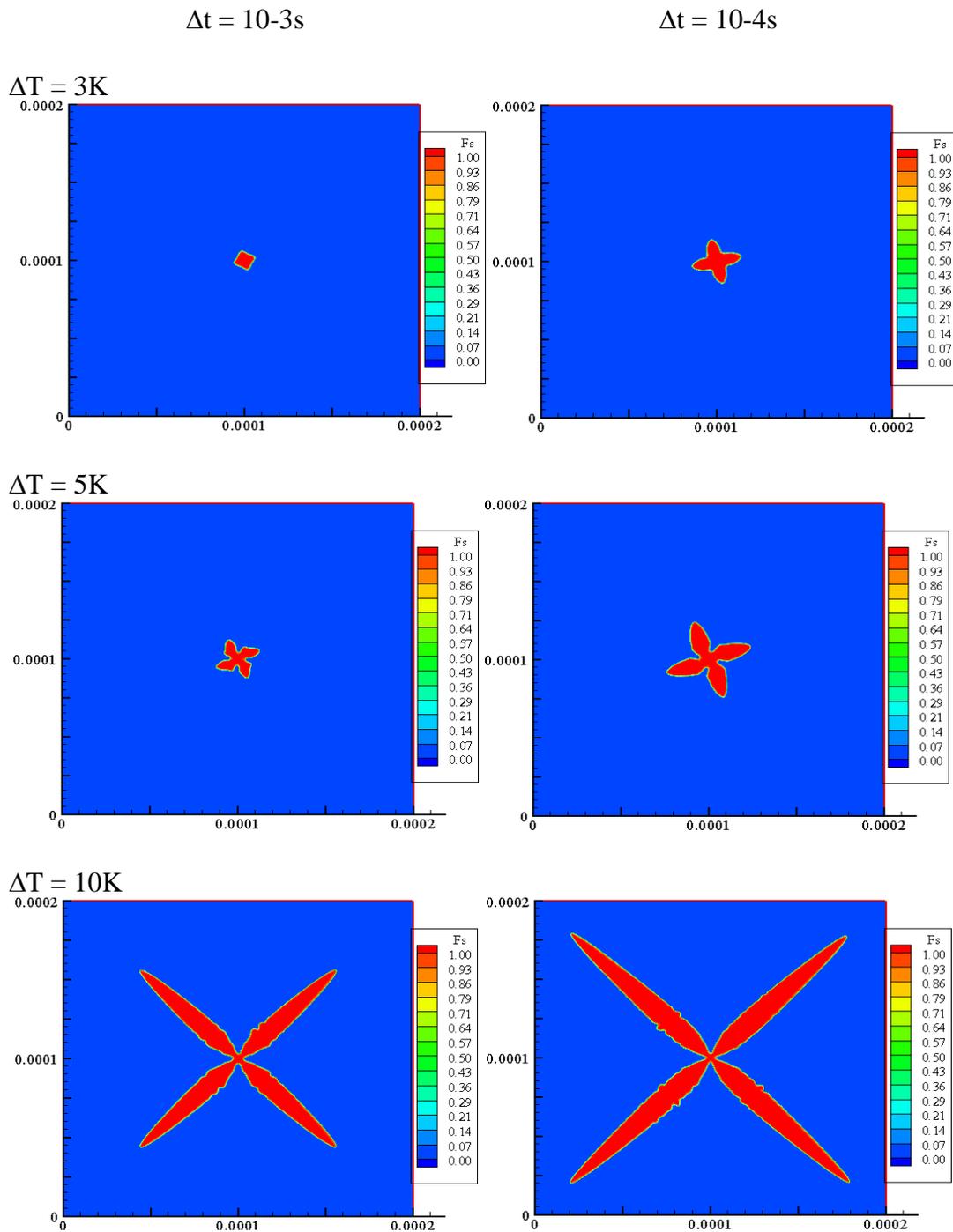


Fig. 5.3- 5 – Influence du pas de temps sur la cinétique et l'orientation cristallographique de la dendrite après 1s dans un maillage à  $403 \times 403$  cellules, pour  $\delta = 0.4$  et  $\theta_0 = 15^\circ$ .

Les figures 5.3- 4 et 5.3- 5 rassemblent les deux corrections apportées par la réduction du pas de temps sur la cinétique et sur l'orientation cristallographique de la croissance de la dendrite. La rotation vers l'orientation  $\theta_0$  est, en effet, très visible pour le cas de surfusion  $\Delta T = 5K$ , lorsque les calculs sont faits par le pas de temps  $\Delta t = 10^{-4}s$ . Cependant, pour  $\Delta T = 10K$ , cette réduction n'a pas d'effet sur l'orientation

cristallographique lorsque  $\theta_0 = 15^\circ$ . La rotation observée dans la figure 5.3- 4, pour la surfusion  $\Delta T = 10\text{K}$ , a donc été favorisée par le fait que l'orientation  $0^\circ$  par rapport aux axes  $x, y$ , est aussi celle du gradient de température. Comme ce gradient est très fort pour ce cas ( $\Delta T = 10\text{K}$ ), le terme  $\Gamma KF$  devient trop faible devant  $(T^* - T_f)$  pour pouvoir diriger l'orientation lorsqu'elle s'éloigne de la direction du gradient thermique.

Dans le maillage intermédiaire ( $203 \times 203$ ), l'effet de la réduction du pas de temps sur la cinétique n'est pas visible mais l'orientation de la dendrite est assez bien corrigée pour les degrés de surfusions thermique de 3K et 5K (Fig. 5.3- 6 et 5.3- 7).

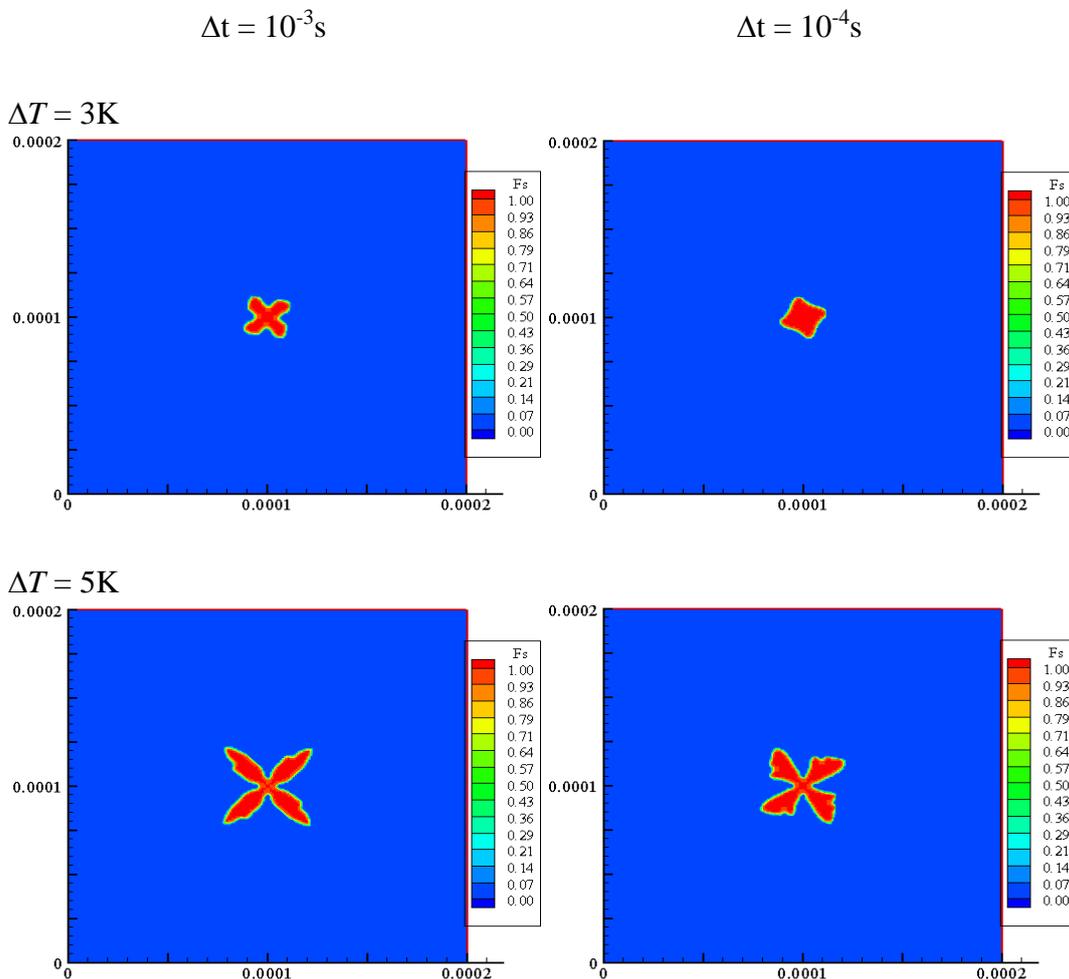


Fig. 5.3- 6 – Influence du pas de temps sur l'orientation cristallographique de la dendrite après 1s dans un maillage à  $203 \times 203$  cellules, pour  $\delta = 0.4$  et  $\theta_0 = 15^\circ$ .

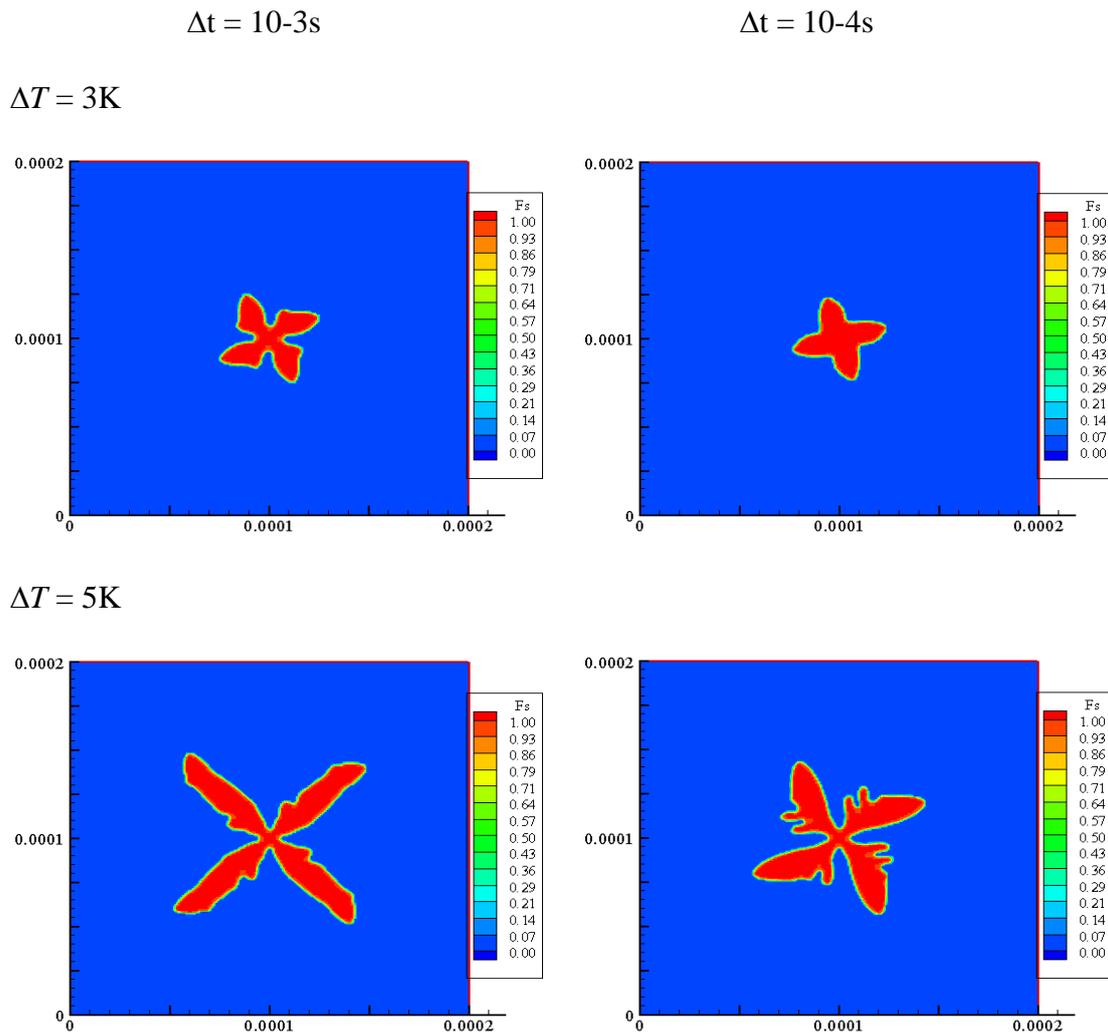


Fig. 5.3- 7 – Influence du pas du temps sur la croissance de la dendrite, après 3s dans un maillage de  $203 \times 203$  cellules.  $\theta_0 = 15^\circ$ ,  $\delta = 0.4$ ,  $\Delta T = 5K$ .

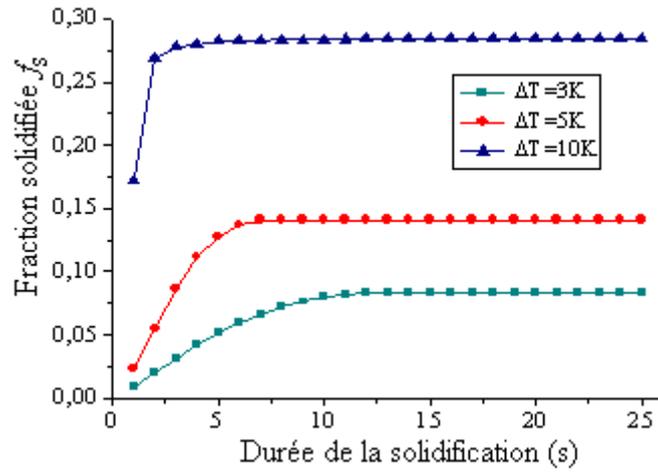
## II. INFLUENCE DES PARAMETRES PHYSIQUES

### II.1 Influence du degré de surfusion thermique

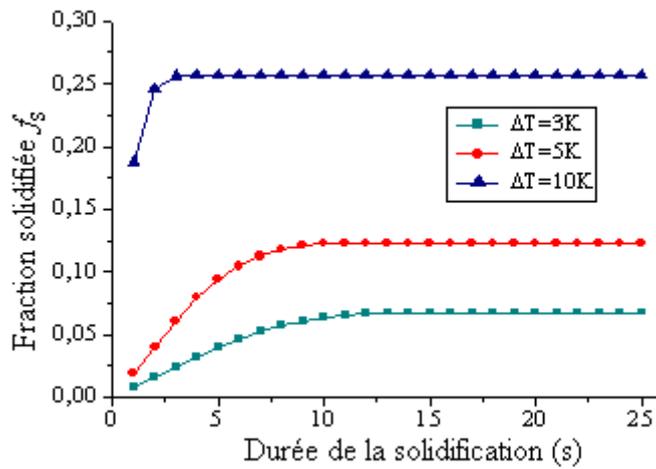
La première remarque évidente est que l'augmentation du degré de surfusion thermique accélère la cinétique de la croissance de la dendrite. Cela est très visible dans les résultats obtenus jusqu'à présent. Son effet sur l'orientation cristallographique a aussi été discuté dans les paragraphes précédents. La morphologie de la dendrite est aussi affectée à cause de la rotation qui se produit vers l'orientation  $\theta_0$ , et qui résulte en un splitting dans les branches de la dendrite.

Un autre effet qui n'a pas été bien discuté est celui observé sur la durée de la période transitoire. Cet effet est résumé dans la figure 5.4.

103 × 103 cellules



203 × 203 cellules



403 × 403 cellules

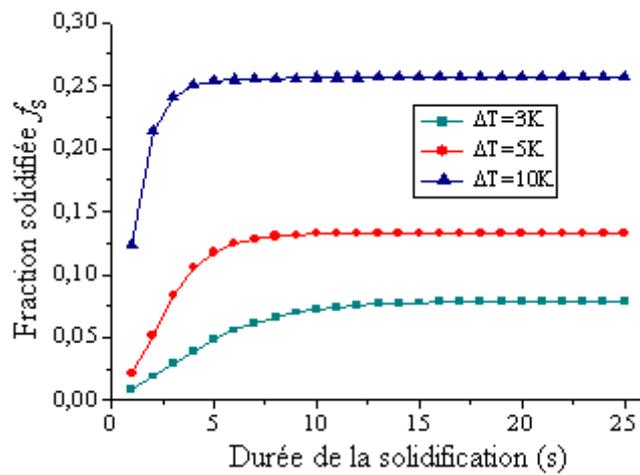


Fig. 5.4 – Variations de la fraction solidifiée pour les trois cas de surfusions dans les trois résolutions, pour  $\Delta t = 10^{-4}$  s.

Comme nous l'avons vu plus haut, la vitesse de croissance de la dendrite est très forte au début du phénomène, surtout pour les surfusions assez grandes. Après une courte durée, cette vitesse décroît et le régime stationnaire s'installe.

Les variations de la fraction solidifiée, obtenue dans chacun des trois maillages, montrent que la durée du régime transitoire diminue avec l'augmentation de la surfusion thermique (Fig. 5.4). Toutes les dendrites simulées confirment cet effet. La croissance de la dendrite arrive au stade stationnaire très vite pour  $\Delta T = 10\text{K}$ . A ce stade sa taille n'augmente presque plus.

D'après la figure 5.4, la durée de l'état transitoire est autour de 7s pour  $\Delta T = 3\text{K}$ , 5s pour  $\Delta T = 5\text{K}$  et 1s pour  $\Delta T = 10\text{K}$  mais ce qui est intéressant est qu'elle ne dépend presque pas du maillage.

## II.2 Influence de l'anisotropie de l'énergie de surface

Dans le but de confirmer la compétition qui se produit entre les deux termes :  $\Gamma KF$  et  $(T^* - T_f)$  de l'équation (11), une simulation est faite pour chacun des deux cas de surfusions  $\Delta T = 3\text{K}$  et  $\Delta T = 5\text{K}$ , pour différentes valeurs du coefficient  $\delta$ . La figure 5.5 résume les résultats obtenus avec  $\delta = 0.1$ ,  $\delta = 0.3$  et  $\delta = 0.5$ . La première observation qu'on peut faire est que l'augmentation du degré d'anisotropie de la tension de surface stabilise l'orientation  $15^\circ$ . Ceci est en très bon accord avec les résultats des théories analytiques exposées dans la partie bibliographique. C'est donc l'anisotropie de la tension superficielle de l'interface en mouvement qui détermine son orientation cristallographique. Elle stabilise la direction de la croissance dendritique.

Cette stabilité qui se crée dans le choix de la direction dans laquelle le front de solidification continue son chemin fait qu'il se libère de toute fluctuation et aile donc plus vite dans sa course. Ceci résulte aussi d'un affinement du pic de la dendrite. L'augmentation du degré d'anisotropie de la tension superficielle augmente donc la vitesse du pic de la dendrite et diminue son rayon. C'est un résultat déjà établi mais analytiquement (par les théories analytiques connues) mais pas expérimentalement ou numériquement, jusqu'à aujourd'hui.

Pour un degré d'anisotropie très faible ( $\delta = 0.1$ ), une rotation vers la direction du gradient thermique est observée. Cette rotation est plus prononcée pour le cas  $\Delta T = 5\text{K}$  et se traduit par un splitting (Fig. 5.5). Pour le cas  $\Delta T = 3\text{K}$  la rotation est un peu

discrète par ce que pour ce cas le gradient thermique est faible. Le splitting résulte donc effectivement de la concurrence entre les deux termes de l'équation (11), i. e. les deux surfusions : la surfusion thermique et la surfusion liée à la courbure de l'interface.

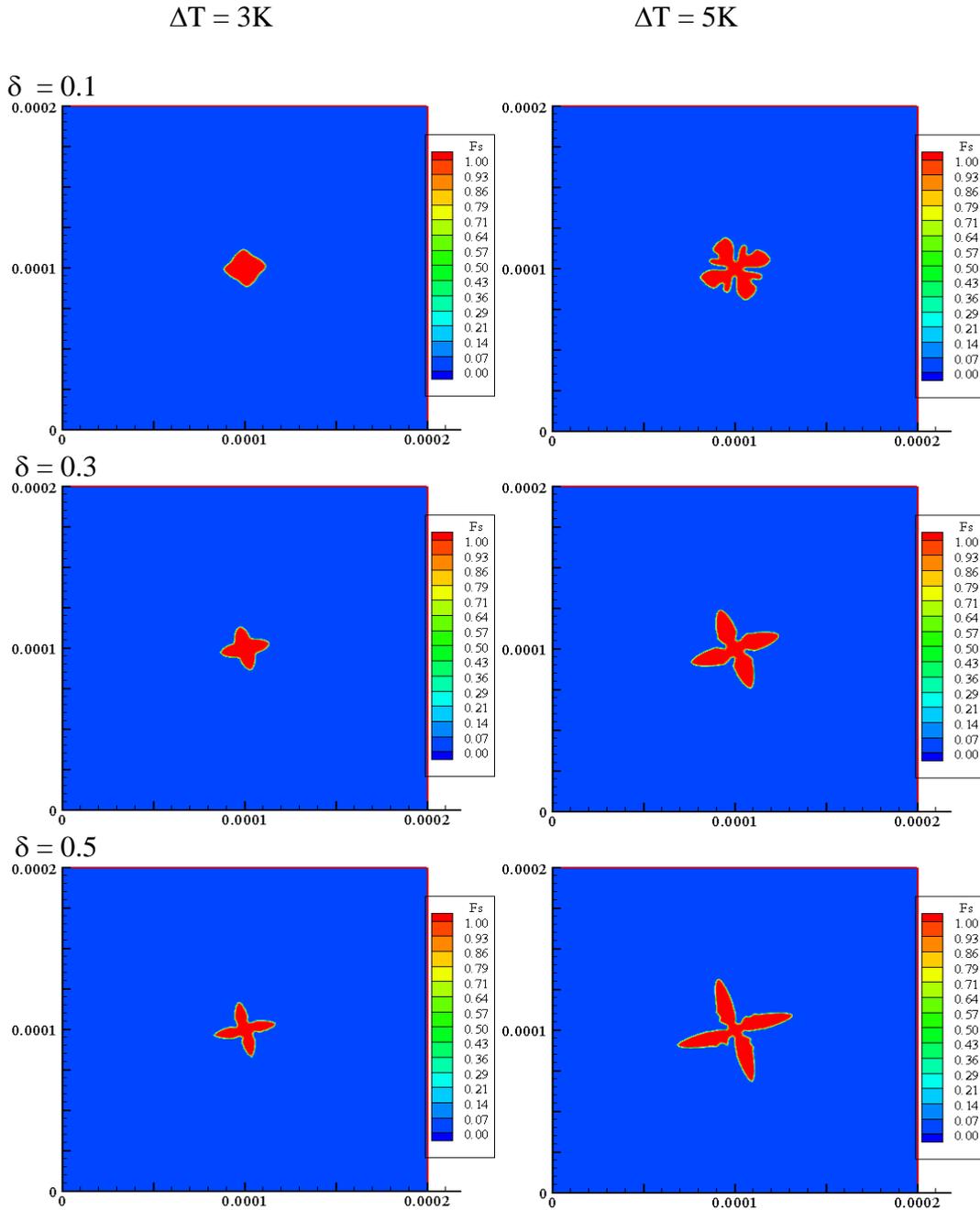


Fig. 5.5 – Simulation de la dendrite après 1s dans le maillage  $403 \times 403$ .  $\theta_0 = 15^\circ$  et  $\Delta t = 10^{-4}s$ .

## CONCLUSION

Le but de ce travail était de déterminer l'origine des rosettes, un défaut très stable et qui contribuait beaucoup dans la cinétique et le mécanisme de la décomposition de la solution solide Al-8%Mg sursaturée par trempe. A l'aide de cette modélisation nous avons pu comprendre qu'il s'agit de dendrites, géantes parce que la surfusion thermique à laquelle a été soumis le liquide était très élevée. Ces dendrites résultent donc d'une germination hétérogène, sur les particules d'impuretés présentes dans l'alliage à l'état liquide. Ces dendrites étaient très stables vis-à-vis des traitements thermiques effectués à l'état solide, parce qu'elles ont été formées à une température très élevée par rapport à celle où ont été effectués les traitements.

Nous avons aussi montré que les résultats de la simulation ne dépendent pas uniquement du modèle. Le choix des conditions numériques (méthode de capture de l'interface, dimensions du maillage et valeur du pas de temps) influe beaucoup et peut même faire aboutir à des résultats erronés. A l'aide du choix adéquat des conditions numériques et physiques nous sommes arrivés à reproduire la dendrite et les résultats de la simulation sont en très bon accord avec ceux prévus par les théories analytiques et même avec les observations expérimentales réalisés dans nos travaux antérieurs.

Avec un petit domaine ( $200\mu\text{m} \times 200\mu\text{m}$ ), un pas de temps relativement grand et des moyens de computation modérés, nous avons pu capturer tout les phénomènes physiques liés à la dynamique de la transition liquide – solide, qui se produit dans cet alliage, pour donner naissance à la structure dendritique équiaxe. Ces défauts, qui se forment lors de la solidification et qui affectent beaucoup la forme des grains, ont mérité cet intérêt parce qu'ils interviennent très fortement dans le déroulement des phénomènes de décomposition dans les alliages binaires.

## **Résumé**

Les caractéristiques de la morphologie de la dendrite équiaxe, se croissant dans un liquide Al-Mg en surfusion, sont simulées numériquement en utilisant le modèle de suivi virtuel de Front. L'équilibre local à l'interface liquide - solide et l'accumulation de soluté en avant de l'interface sont résolus pour simuler le processus de croissance en 2D, dans des conditions de solidification isotherme. On considère les surfusions de constitution et de courbure et l'anisotropie de l'énergie de l'interface liquide - solide. Le mécanisme et la cinétique du mouvement d'interface est simulé pour les deux types de cellules considérées comme cellules d'interface: 4 cellules et 8 cellules.

Les résultats montrent que la méthode de quatre voisins introduit une forte anisotropie artificielle, introduite par la grille, sur l'orientation de croissance cristallographique même dans la croissance avec une orientation de 0°. Lorsque toutes les cellules entourant le seed sont prises comme interface, la morphologie et l'orientation cristallographique de la dendrite dépendent de la vitesse de croissance qui elle même dépend de l'interaction des paramètres de simulation numérique et physique. Les dendrites simulées suivent leurs orientations cristallographiques attribuées et la croissance est stabilisée par le choix de paramètres qui fournissent les résultats prévisibles avec un minimum de cout computationnel possible. Le modèle peut également extraire efficacement la chaleur latente libérée avec une condition aux limites de température constante.

## **Mots Clés:**

Anisotropie artificielle, dendrite équiaxe, interface liquide - solide, alliage Al-Mg.

## **Abstract**

Features of equiaxed dendrite morphology, growing into an undercooled Al-Mg liquid melt, are numerically simulated using the Virtual Front Tracking model. Local equilibrium at the liquid solid interface and the buildup of solute ahead of the interface, are solved to simulate the 2D growth process, in isothermal solidification conditions. Constitutional and curvature undercoolings and anisotropy of the SL interface energy are considered. The mechanism and kinetic of interface movement is simulated for the two kinds of cells assigned as interface cells: 4 cells and 8 cells.

The results show that the four cell neighborhood method introduces strong artificial grid anisotropy on the crystallographic growth orientation even in the growth with 0 degree orientation. When all the cells surrounding the seed are assigned as interface, the dendrite morphology and the crystallographic orientation depends on the growth velocity. On the other hand, the growth velocity depends on the interplay of both numerical and physical simulation parameters. The simulated dendrites follow their assigned crystallographic orientation and the growth is stabilized by the choice of parameters that provide the expected results without any high computational cost. We show also that the model can efficiently extract the released latent heat with constant temperature boundary condition.

## **Key Words:**

Artificial anisotropy, Equiaxed dendrite, liquid - solid interface, Al-Mg alloy.