

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE  
« HOUARI BOUMEDIEN »  
FACULTE DE PHYSIQUE



THÈSE

*Présentée pour l'obtention du grade DOCTORAT*

EN : *PHYSIQUE*

*Spécialité : Energétique et Mécanique des Fluides*

Par : *NOURI Sabrina*

*Sujet*

**ETUDE DU PROCESSUS DE SOLIDIFICATION VERTICALE:  
APPLICATION A LA PHOTOVOLTAIQUE**

*Soutenue le 04/11/2010, devant le jury composé de :*

Mr.M.KECHOUANE. Professeur; USTHB  
Mr.A.BENZAOUI. Maitre de conférence ; USTHB  
Mr.M.BENZHEGHIBA. Maitre de conférence ; USTHB  
Mr.R.Bennacer. Professeur ; U. Cergy Paris  
Mr.M.KESSAL. Professeur ;UMB.Boumerdes  
Mr.M.BOUSSAID. Professeur ; UMB.Boumerdes

Président  
Directeur de thèse  
Co-Directeur de thèse  
Examineur  
Examineur  
Examineur

## Résumé

Une étude paramétrique est entreprise afin de déterminer les conditions optimales d'un système de Solidification verticale de type Bridgman.

Une analyse détaillée est menée sur les structures d'écoulements et les transferts couplés de chaleur et de soluté pendant le changement de phase d'un alliage métallique dans une cavité cylindrique verticale exposée à un profil de température linéaire qui varie avec le temps.

Un code de calcul a été développé sur la base de la méthode des volumes finis pour résoudre les équations conservatives. Celles-ci sont explicitées en coordonnées cylindriques axisymétriques et en formulation primitive ( $2D \frac{1}{2}$ ).

ce travail a traité le transfert de chaleur et de masse dans un four de croissance partagé en trois zones ; chaude, froide et la région du profil de température, en régime transitoire en évaluant les effets couplés des forces d'inertie, des poussées d'Archimède et le terme de changement de phase sur le champ dynamique et le transfert thermosolutal. L'étude a été menée afin de quantifier les effets des groupements adimensionnels gouvernants le système.

L'accent est mis sur l'influence du champ magnétique à travers le nombre de Hartmann sur l'effet de l'écoulement dans le bain et la distribution du soluté. Ces effets de convection naturelle sont exprimés par le nombre de Rayleigh thermique et le rapport des forces de poussées combinées. On montre également l'effet magnétohydrodynamique qui favorise les échanges thermique et massique dans la zone pâteuse, sauf quand celle-ci est faible. La force d'Archimède a, dans ce cas, des effets inverses.

La simulation numérique a été utilisée pour étudier l'influence de la convection thermo-solutale sur les ségrégations chimiques lors de la solidification Bridgman des alliages métalliques semi-conducteur. Les résultats montrent un fort amortissement solutal de la convection thermique pendant la solidification. A la suite de cet amortissement solutal, les ségrégations chimiques augmentent et l'interface devient morphologiquement instable. Les calculs numériques qui décrivent l'effet de la convection sur la distribution du soluté montrent que l'effet de l'amortissement solutal peut être évité et l'amélioration de la qualité des cristaux dans deux cas : a) la croissance à vitesses faibles ; b) la croissance sous champ magnétique permanent.

La simulation numérique montre que les cristaux obtenus à des vitesses de croissance faibles sont plus homogènes et leur qualité structurale est améliorée par rapport aux cristaux obtenus à grandes vitesses. Une très bonne concordance de nos résultats numériques avec les résultats expérimentaux trouvés auparavant.

**Mots Clés :** Solidification vertical, Champ magnétique, Simulation numérique, transfert de chaleur, transfert de masse, technique de Bridgman.

## Abstract

A parametric study is carried out in order to optimize heat and mass transfer conditions during the Bridgman vertical solidification process.

A detailed analysis is conducted on the fluid flow and the coupled heat and mass transfer during the phase change of semiconductor metallic alloys in vertical cylindrical cavity exposed to a linear temperature profile varying with time.

A computer code was developed based on the finite volume method to solve the conservative equations. These are explained in axisymmetric cylindrical coordinates and primitive formulation (2D  $\frac{1}{2}$ ).

This work has treated the transfer of heat and mass in a growth furnace divided in three zones; hot, cold and region of temperature profile in unsteady state with evaluating the coupled effects of inertial forces, buoyancy forces, phase change term on the dynamic field and the thermosolutal transfer. The study was conducted to quantify the effects of dimensionless groups governing the system.

The emphasis is put on the magnetic field influence through the Hartmann number on the both flow in melt and solute distribution. These effects of natural convection are expressed by thermal Rayleigh number and the ratio of the combined buoyancy forces. We show also the magnetohydrodynamic effect which promotes heat and mass exchanges in the mushy zone, except when it is low. The buoyancy force has, in that case, opposed effects.

Numerical simulation is used in order to analyze the influence of the thermo-solutal convection on the chemical segregation during the Bridgman solidification of the semi conductor metallic alloys. The results show a strong solutal damping effect on the thermal convection during the solidification. Following this solutal damping, the chemical segregation increases and the interface becomes morphologically unstable. The numerical calculations which describe the convection effect on the solute distribution show that the damping solutal effect can be avoided and the quality of crystals improved in two cases: a) when the growth occurs at low pulling rates, b) when the solidification occurs under static magnetic field. The numerical simulation shows that the crystals obtained at low pulling rates are more homogenous and their structural quality is improved compared to the crystals obtained at high speeds. A very good agreement of our numerical results with experimental results found previously.

**Keys Words:** *Directional solidification, Magnetic fields, Computer simulation, Heat transfer, Mass transfer, Bridgman technique*

*À ma famille  
À mama aziza  
À mon cher père et ma douce mère  
Ainsi qu'à mes adorables frères et belles sœurs et leurs enfants*

## REMERCIEMENTS

*Mes premiers remerciements vont à **Mouhamed Benzeghiba** qui a dirigé mon travail en m'accordant toute sa confiance. Sa gentillesse, sa rigueur scientifique ainsi que ses connaissances dans le domaine de la simulation numérique ont été d'une grande importance dans la réussite de cette thèse. Je tiens à lui exprimer mon entière gratitude.*

*Je le remercie particulièrement pour son apport consistant concernant la compréhension des phénomènes physiques qui sont souvent trop négligée par les "numériciens". Je souhaite vivement que les liens et la collaboration qui nous unissent soient encore plus étroits et fructueux dans le futur.*

*Je souhaite exprimer ma reconnaissance à **Thierry Duffar** pour l'aide efficace qu'il m'apporté dans les domaines de la métallurgie et de la solidification. Je tiens également à le remercier tout particulièrement pour son suivi assidu de loin de mon travail, malgré son emploi du temps très chargé.*

*Le présent travail a été effectué à l'unité de développement de la technologie du Silicium (UDTS) sous la direction de **M.Boumaour** et au laboratoire d'énergétique et mécanique des fluides de la faculté de physique, sous la direction de monsieur **A. Benzaoui** directeur de l'école préparatoire.*

*Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude pour leur soutien constant et leurs précieux conseils tout au long de ces années de recherche. J'ai eu a apprécié leurs qualités humaines autant que leurs compétences éprouvées à mener des projets d'envergures.*

*Enfin je m'excuse auprès de mes amis et de toute personne ayant contribué de loin ou de près à ce travail de ne pouvoirs tous les citer.*

---

## **INTRODUCTION GENERALE**

---

Cette étude est une contribution à l'analyse macroscopique des écoulements et des transferts de chaleur et de masse lors du changement de phase dans le processus de solidification verticale par la technique de Bridgman des alliages métalliques qui se caractérisent par la présence d'une zone dendritique assimilée à un milieu poreux.

Cet axe de recherche s'inscrit dans le cadre d'une thématique développée au sein de l'unité de développement de la technologie du silicium en vue d'analyser les transferts de chaleur et de soluté dans des processus de croissance. Dans le domaine de l'élaboration d'alliages métalliques, les principaux enjeux industriels résident dans la possibilité de maîtriser la structure métallurgique ainsi que les défauts qui surviennent lors du changement de phase.

Lors de la solidification, les mouvements hydrodynamiques dans la phase liquide ont une influence importante sur la structure du produit solidifié ainsi que sur la ségrégation (c'est-à-dire les inhomogénéités de composition au sein du matériau solide). Lorsqu'ils sont naturels, ces mouvements sont engendrés par la convection thermosolutale due aux gradients de température et de concentration, eux-mêmes liés aux diffusivités thermiques des phases, solutale des espèces chimiques et aux différences de conductibilités thermique du solide, du liquide et du creuset pour la convection radiale.

Afin d'isoler les phénomènes dus à la convection, des expériences de solidification ont été réalisées en microgravité et sur Terre. En microgravité, l'absence de convection a permis d'isoler son rôle en comparant les expériences avec celles réalisées sur Terre. Cependant les expériences en microgravité ont un coût non négligeable et surtout elles ne permettent qu'une comparaison a posteriori entre des expériences avec et sans convection. L'idéal consisterait à contrôler cette convection naturelle en lui substituant un mouvement connu et contrôlé. Ceci semble possible dans les métaux liquides, en utilisant un brassage extérieur pour créer des écoulements forcés contrôlés. On peut alors espérer imposer un mouvement organisé. Ce

contrôle de l'écoulement devra déboucher sur la maîtrise de la structure de solidification (cellulaire, dendritique), ainsi que sur une maîtrise des défauts.

Parmi les défauts les plus importants, on doit citer les ségrégations, on peut en distinguer trois types : les microségrégations (à l'échelle de la dendrite), les macroségrégations (à l'échelle du lingot) et les mésoségrégations (échelle intermédiaire). Ces deux derniers types de ségrégation sont causés par l'écoulement du liquide à l'intérieur de la zone pâteuse, zone mi-solide et mi-liquide associée à l'existence des dendrites. Ce mouvement du liquide y draine les éléments d'alliages et les rejette dans la zone liquide.

L'utilisation d'un champ électromagnétique pour contrôler ces écoulements dans le cas d'alliages métalliques, est devenue un moyen privilégié et a déjà fait l'objet de plusieurs expériences et d'applications industrielles. En effet, avec un champ électromagnétique, il est possible d'agir sur les écoulements sans aucun contact physique. Le brassage est assuré par la force de Laplace induite par le champ magnétique. La forme ainsi que l'intensité de l'écoulement dépendent uniquement de cette force. Plusieurs configurations de champ magnétique ont été utilisées en métallurgie, les champs permanents, les champs tournants et les champs glissants. Le champ permanent peut être créé à l'aide d'un aimant, il permet de freiner la gravité lors de la mise en forme du matériau. Le champ tournant ainsi que le champ glissant peuvent être produits par des moteurs polyphasés, leur conception est un peu plus compliquée que celle du champ permanent. Dans le cas d'un champ tournant, le champ magnétique est distribué le long d'un cercle. Cette répartition donne naissance à un mouvement toroïdal, qui, à son tour, donne naissance à un mouvement poloïdal secondaire par effet centrifuge. Dans le cas d'un champ magnétique glissant, le champ magnétique est distribué le long des génératrices de l'inducteur (linéaire). Une telle conception donne naissance à une force de pompage qui induit un mouvement purement poloïdal. L'intensité et la direction de ce mouvement peuvent être contrôlées, ce qui, avec son organisation plus simple, lui confère un avantage par rapport au champ tournant, où seule l'intensité du mouvement toroïdal est contrôlable.

La contribution de cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux effectués au sein de l'unité de développement de la technologie du Silicium (UDTS) sur l'analyse des effets convectifs lors de la solidification dirigée de type Bridgman.

Dans ce travail, nous avons réalisé la simulation numérique de la convection naturelle dans une enceinte cylindrique remplie de métal liquide (fluide à bas nombre de Prandtl) et soumise à un gradient de température latéral. L'intérêt de l'étude réside dans son implication dans la croissance des cristaux destinés à la fabrication des semi-conducteurs et le refroidissement des composants électroniques. En effet, l'apparition de la convection pendant la croissance cristalline peut conduire à des inhomogénéités qui conduisent à des striations et à des défauts qui affectent la qualité des cristaux obtenus.

Les oscillations de température, dues aux instabilités de l'écoulement convectif dans les métaux liquides, induisent également un refroidissement non uniforme au front de la solidification. La convection est alors étudiée dans le but de la réduire. Une modélisation du problème en 2D a été menée en utilisant un code qui se base sur la méthode des volumes finis.

Après avoir présenté le contexte de l'étude dans cette introduction générale, un rappel sur les fondements de la solidification en présence ou non d'une convection forcée est effectué dans le premier chapitre. Le deuxième chapitre sera consacré à la définition du problème posé et à la formation des équations de conservation qui régissent les phénomènes physiques au cours de croissance de type Bridgman. L'approche de résolution numérique des équations conservatives est abordée au quatrième chapitre. La méthode des volumes finis est utilisée pour résoudre les équations, exprimées en formulation vitesse – pression-température-concentration. Le couplage des variables physiques primitives est obtenu grâce à l'algorithme « SIMPLER ».

Sur ces bases, un code de calcul a été développé en langage Fortran au chapitre quatre. L'implémentation du programme est entreprise pour vérifier sa sensibilité au maillage et établir un calcul de précision. Par la suite, on entreprend la simulation de certains résultats traités auparavant par d'autres auteurs. Ils permettent de s'assurer de la validité du code dans différentes configurations thermiques, solutales et dynamiques assez proches des cas que nous avons étudié.

Dans l'avant dernier volet de cette thèse, nous exposons, en détail, les effets de différents paramètres gouvernant le système dans un espace cylindrique.

Nous étudions numériquement l'influence des paramètres physiques sur les transferts de chaleur et de soluté. L'accent est mis sur l'influence du champ magnétique sur les structures d'écoulement et les transferts couplés afin de déterminer l'efficacité du processus de la magnétohydrodynamique.

Enfin, nous terminons cette thèse par une conclusion générale qui résume les principaux obtenus et nous permet de dégager parmi les perspectives à moyen terme, les extensions immédiates à donner à ce travail pour le problème de solidification dans le sens de la démarche adoptée par notre laboratoire.

# NOMENCLATURE

## *Principales notations*

A	: rapport de forme de la cavité ( $H/R$ )
$A( p )$	: coefficient de convection-diffusion
a	: coefficient dans l'équation discrétisée
b	: terme constant dans l'équation discrétisée
B	: champ magnétique
C	: concentration du soluté dans le fluide
$C_p$	: chaleur spécifique à pression constante
D	: diffusion solutale
Da	: nombre de Darcy
$\overline{\overline{D}}$	: tenseur des déformations
$\overline{\overline{F}}_v$	: force de volume
F	: force de Laplace
$f_l$	: fraction liquide
$f_s$	: fraction solide
$\overline{g}$	: accélération de la pesanteur
Gr	: nombre de Grashof
$Gr_T$	: nombre de Grashof thermique ( $g \cdot \beta_T \cdot \Delta T \cdot R^3 / \nu^2$ )
$Gr_c$	: nombre de Grashof solutal ( $g \cdot \beta_c \cdot \Delta C \cdot R^3 / \nu^2$ )
H	: hauteur de la cavité
$H_a$	: nombre de Hartmann
h	: enthalpie
j	: le courant de Foucault
k	: conductivité thermique pour un milieu donné
$K_p$	: coefficient de partage d'équilibre thermique
Le	: nombre de Lewis ( $Sc/Pr$ ).
N	: rapport des forces de volume ( $\beta_c \cdot \Delta C / \beta_T \cdot \Delta T$ )
Nu	: nombre de Nusselt
P	: pression adimensionnelle
Pe	: nombre de Peclet
Pr	: nombre de Prandtl ( $\nu_F / \alpha_F$ )
r	: coordonnée radiale adimensionnelle
R	: coordonnée radiale
Ra	: nombre de Rayleigh ( $Gr \cdot Pr$ )
$Ra_T$	: nombre de Rayleigh thermique ( $Gr_T \cdot Pr$ )
$Ra_c$	: nombre de Rayleigh solutal ( $Gr_c \cdot Pr$ )
Sh	: nombre de Sherwood
$\overline{S}$	: terme source linéarisé
Sc	: nombre de Schmidt ( $\nu_F / D_F$ ) ou partie constante du terme source linéarisé
$S_p$	: coefficient de $\phi_p$ dans l'expression du terme source linéarisé
Ste	: nombre de Stefan
t	: temps

T	: température
$\Delta T$	: écart de température ( $T_c - T_f$ )
u	: composante de la vitesse dans la direction axiale
V	: volume
$V_I$	: vitesse d'interface
$\overrightarrow{V_g}$	: vitesse de tirage
$\vec{V}$	: vecteur vitesse
v	: composante de la vitesse dans la direction radiale
z	: coordonnée axiale

**Lettres grecques**

$\alpha$	: diffusivité thermique
$\alpha_{\phi_p}$	: coefficient de relaxation
$\beta_C$	: coefficient d'expansion solutale
$\beta_T$	: coefficient de dilatation thermique du fluide
$\Gamma$	: coefficient de diffusivité numérique
$\nabla$	: opérateur différentiel agissant sur les scalaires, vecteurs et tenseurs
$\Delta$	: opérateur de Laplace
$\varepsilon$	: dérivée des equation de <b>Carman-koseny</b>
$\zeta$	: porosité de la matrice poreuse ( $V_F / V_{totale}$ )
$\sigma$	: la conductivité électrique
$\phi$	: variable dépendante générale
$\mu$	: viscosité dynamique
$\nu$	: viscosité cinématique ( $\mu/\rho$ )
$\rho$	: masse volumique
$\tau$	: tortuosité
$\overline{\tau}$	: tenseur des contraintes visqueuses
$\lambda$	: coefficient inertiel microscopique adimensionné ( $\lambda \approx 0,35$ )
$\Psi$	: fonction de courant
$\gamma$	: Facteur de variation au cours du temps

**Préfixes**

$\delta$	: l'épaisseur de la couche limite
$\Delta$	: longueur ou hauteur des volumes de contrôle
$\eta$	: paramètre de convecto-diffusion

**Exposants**

'	: relatif aux corrections des variables dépendantes
*	: relatif aux variables adimensionnelles
°	: valeur calculée au pas de temps précédent

**Indices**

C	: concentration
c	: paroi chaude

## NOMENCLATURE

---

F	: fluide
f	: paroi froide
eff	: effectif
I	: interface
ind	: induit
L	: liquide
max	: maximum
min	: minimum
mix	: mixte
moy	: moyen
nb	: nœuds voisins
r	: indice de la direction radiale
S	: solide
z	: indice de la direction axiale
p, e, w, n, s	: relatifs aux points de calcul Est, Ouest, Nord et Sud

# TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE I : GENERALITES SUR LA SOLIDIFICATION VERTICALE DIRIGEE</b>	
<b>I. INTRODUCTION .....</b>	<b>5</b>
I.1. Méthode de czochralski .....	6
I.2. Méthode de fusion de zone (FZ).....	7
I.3. Méthode de Bridgman.....	9
<b>II. ASPECTS FONDAMENTAUX.....</b>	<b>13</b>
II.1. La structure d'interface et l'équilibre thermodynamique local.....	13
A) Interfaces rigoureuses et facettées.....	13
B) Microstructure de solidification.....	16
II.2. LA THEORIE DE SEGREGATION .....	17
II.2. 1. Conservation de soluté .....	17
II.2. 2. Ségrégation longitudinale.....	18
A) La règle de Scheil-Gulliver.....	18
B) Cas diffusif dans le liquide.....	20
C) Cas intermédiaire : convecto-diffusif.....	21
II.2. 3. Ségrégation radiale.....	23
A) Cas convectif.....	23
B) Cas diffusif.....	24
II.3. PLYPHASES MICROSTRUCTURE.....	26
A) L'eutectique.....	26
A) Péritectique.....	28
II.4. LA CONVECTION EN ZONE PÂTEUSE.....	30
<b>III. SOLIDIFICATION SOUS L'EFFET D'UN BRASSAGE EXTERNE.....</b>	<b>34</b>
III. 1.Brassage mécanique (vibrationnel).....	34
A) Vibration axiale.....	34
B) Vibration par rotation (accelerated crucible rotation technique).....	35
III.2. Brassage électromagnétique.....	35
A) champ magnétique permanent .....	36
B) champ magnétique tournant.....	37

IV. MODELES MATHEMATIQUES REGISSANTS LE PROCESSUS DE SOLIDIFICATION VERTICALE.....	38
IV.1. Modèle monophasique .....	38
a. La forme des équations de conservation .....	39
b. L'échelle d'étude .....	41
c. Deux cas limites .....	42
c.1. Le modèle fluide pâteux (modèle A).....	42
c.2. Dendrites colonnaires.....	43
c.2.1. Dendrites colonnaires avec microstructure dispersée (modèle B).....	45
c.3. Dendrites colonnaires avec microstructure distincte (modèle C).....	46
D. Couplage.....	48
IV.2. Modèle Bi phasique .....	49
V. OBJECTIF DE CE TRAVAIL .....	52

## CHAPITRE II : MODELISATION MATHEMATIQUE

I. INTRODUCTION .....	54
II. MODELE PHYSIQUE .....	55
III. MODELE MATHEMATIQUE .....	56
III.1.Hypothèses simplificatrice .....	56
III.2.Mise en équation du problème.....	57
III.3.Conditions aux limites.....	61
A) .Conditions aux limites.....	61
B) .Conditions thermiques.....	61
C) .Conditions solutales.....	62
d). Conditions initiales.....	62
III.4.Le calcul de la fraction de solidification.....	62
VI. VARIABLES REDUITES ET GROUPEMENTS ADIMENSIONNELS.....	63
VI.1.Les grandeurs de références.....	63
VI.2.Les paramètres caractéristiques du problème.....	65
VI.2.1. Les paramètres géométriques.....	65
VI.2.1. Les paramètres physiques.....	65
VI.3. Les conditions aux limites adimensionnelles.....	67
V. LES SEGREGATIONS CHIMIQUES.....	68
VII. VITESSE DE SOLIDIFICATION.....	70

## CHAPITRE III : PROCEDURE NUMERIQUE

I. INTRODUCTION .....	71
II. DESCRIPTION DU MAILLAGE .....	72
III. DISCRETISATION DE L'EQUATION GENERALE.....	73
III.1. La discrétisation du terme instationnaire .....	74
III.2. La discrétisation des termes convectifs .....	74
III.4. Rassemblement des termes discrétisés .....	75
IV. LINEARISATION DU TERME SOURCE .....	79
V. DISCRETISATION DE L'EQUATION DU CHAMP DYNAMIQUE.....	80
V.1. Equation du mouvement.....	81
V.2. Equation de correction de la pression.....	82
VII. SEQUENCE DES OPERATIONS DE L'ALGORITHME SIMPLER.....	84
VIII.DISCUSSION DE L'ALGORITHME SIMPLER.....	84
IX. CRITERE DE CONVERGENCE ET FACTEURS DE RELAXATION .....	85
X.CONCLUSION .....	87

## CHAPITRE IV : VALIDATION DU CODE DE CALCUL

I. INTRODUCTION .....	88
II. SENSIBILITE DU CODE AU MAILLAGE .....	89
III.CALCUL DE PRECISION.....	91
IV.CALCUL DU CODE DE CALCUL.....	93
IV.1. Ecoulement dans une boite chauffée (Thermal Driven cavity).....	93
IV.2.Ecoulement dans une cavité adiabatique à paroi entraînée .....	99
IV.3.Convection naturelle thermosolutale .....	102
A) .Validation avec des résultats expérimentaux.....	102
B) .Validation avec des résultats numériques.....	102
IV.4.La convection naturelle thermique en présence d'un milieu poreux.....	104
IV.5. La convection naturelle thermique en présence d'un champ magnétique.....	106
IV.6.Validation de la méthode d'enthalpie	
« changement de phase avec convection naturelle ».. .....	114
V. Conclusion.....	119

## CHAPITRE IV : RESULTATS ET DISCUSSION

I. INTRODUCTION .....	120
II.TRANSFERT DE CHALEUR DANS UN FOUR DE TYPE BRIDGMAN.....	126
III. LE DEPLACEMENT UNIFORME DU BAIN DANS LE FOUR .....	126
III.1. Effet du nombre de Rayleigh thermique.....	126
III.2.L'effet d'application d'un champ magnétique axial .....	134
III.3.L'effet du rapport de forme .....	140
III.4.L'effet du nombre de Stefan .....	144
III.5.L'effet de la vitesse de tirage.....	147
IV. CONCLUSION .....	152

<b>CONCLUSION GENERALE</b> .....	153
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES</b> .....	155
<b>ANNEXES</b> .....	164
Annexe I .....	164
Annexe II .....	171

# GENERALITES SUR LA SOLIDIFICATION VERTICALE DIRIGEE

## I. INTRODUCTION GLOBALE SUR LA CROISSANCE CRISTALLINE ET SES DIFFERENTES TECHNIQUES

La croissance cristalline est un processus de solidification, vertical ou horizontal, selon lequel se forme un cristal par tirage à partir d'un bain fondu ou par adjonction progressive d'atomes ou de molécules sur la surface d'un germe préexistant ou par le refroidissement lent d'un métal liquide contenu dans une ampoule ou dans un creuset lors de son mouvement dans le four. Les types de cristaux obtenus sont les suivant :

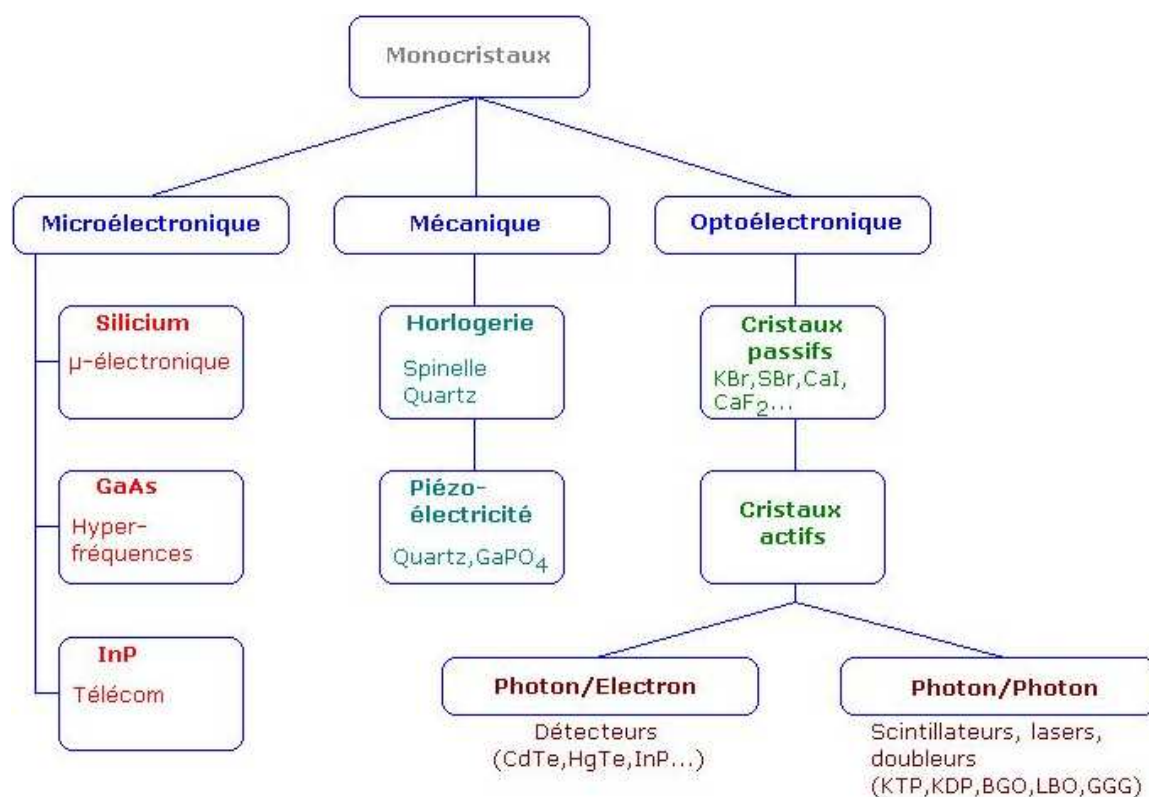


Figure I.1 : Segmentation des types de cristaux

Le besoin de produire des cristaux de haute qualité optique a engendré le développement de différentes méthodes de croissance. L'étude des processus thermodynamiques, dynamique de fluides, vitesse de tirage, interface, ségrégation, morphologie, stabilité et défauts cristallins ont donné lieu à un progrès important dans les connaissances de différentes techniques, on peut citer :

### **I.1. Méthode de tirage**

La technique la plus couramment utilisée aujourd'hui pour la production de nombreux monocristaux est le tirage Czochralski. Elle consiste à cristalliser le matériau à partir de sa phase liquide en trempant à la surface du bain fondu un germe monocristallin orienté du cristal à obtenir. Le bain se solidifie sur le germe légèrement plus froid. Le cristal formé est extrait en tirant lentement ce germe vers le haut. On peut contrôler le diamètre de croissance du cristal en faisant varier la température du bain ou la vitesse de tirage. Aujourd'hui on utilise une pesée du cristal (ou du creuset) pour contrôler le diamètre du cristal. La température du bain, du moins à l'interface, est fixée par l'équilibre solide-liquide. En réalité, on fait varier l'apport de puissance au bain, le cristal compensant la différence en générant plus ou moins de chaleur latente de solidification, donc en modifiant son diamètre. La pesée du cristal n'est pas utilisée pour le silicium car le solide est plus léger que le liquide.

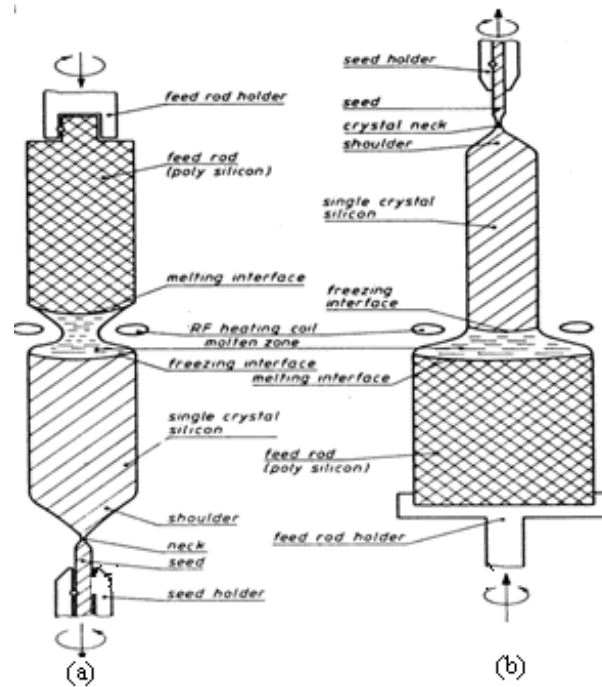


Figure I.2 : Comparaison entre la méthode de la zone flottante (a) et la méthode de Czochralski (b)

Un appareillage Czochralski est généralement composé de 2 parties: une partie supérieure supportant la tête de tirage et une partie inférieure où se trouve le creuset calorifugé, chauffé par induction haute fréquence. Pour certains cristaux (silicium,  $\text{LiNbO}_3$  par exemple) un chauffage résistif peut être utilisé. L'ensemble doit pouvoir travailler aussi bien à l'air ambiant que sous gaz inerte ou sous vide. La perfection du cristal est souvent liée à la précision mécanique du dispositif de tirage, à la sensibilité de la pesée et au dispositif thermique entourant le creuset. L'interface de croissance que l'on peut ajuster en jouant sur la vitesse de rotation du germe doit être la plus plate possible afin d'éviter les tensions qui ont pour effet d'augmenter fortement la densité de dislocations. Du fait des hautes températures de fusion, les creusets doivent être constitués d'un matériau neutre chimiquement vis-à-vis du matériau à élaborer et de l'atmosphère, ce qui impose des métaux nobles : platine ou iridium pour les oxydes. En particulier l'utilisation de l'iridium interdit de travailler en atmosphère riche en oxygène. Dans le cas de semi-conducteurs ou de matériaux non-oxydes, l'utilisation de creusets en quartz ou carbone peut être envisagée.

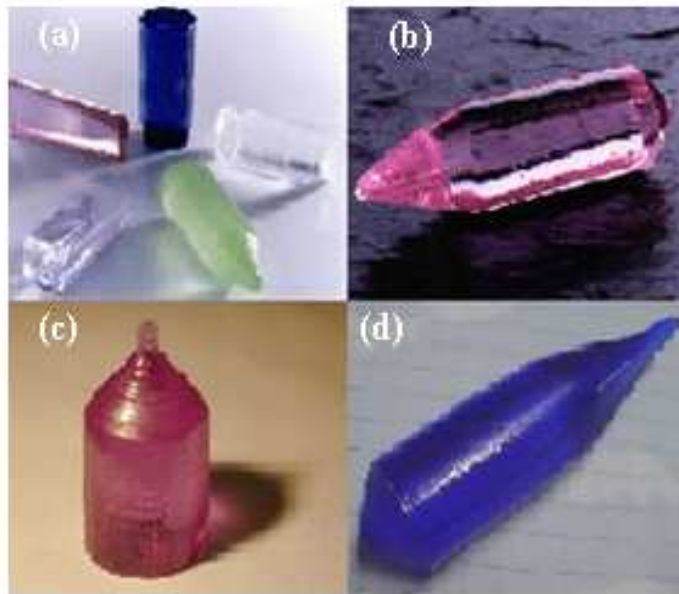


Figure I.3 : Exemples de monocristaux obtenus par tirage Czochralski [1].

(a)  $\text{Y}_2\text{SiO}_5$  non dopé et dopé Er, Yb, Tm et Cr: cristaux émetteurs lasers, (b)  $\text{CaWO}_4$  dopé Nd : cristal laser autour de 1.06 microns, (c) Nd :  $\text{GdCa}_4\text{B}_3\text{O}_{10}$  : cristal laser et doubleur de fréquences, (d)  $\text{LaMgAl}_{11}\text{O}_{19}$  dopé Co : absorbant saturable à 1.55 microns.

Les vitesses de croissance utilisées en technique Czochralski sont de l'ordre de quelque mm/heure pour les matériaux non dopés. En cas de dopage, notamment en vue d'un effet laser (néodyme dans YAG par exemple), il est nécessaire de diminuer fortement cette vitesse jusqu'à quelques dixièmes de mm par heure [1]. Cette réduction a pour effet d'éviter les défauts liés à des phénomènes locaux de surfusion (appelés: striations) et d'obtenir une concentration en dopant la plus homogène possible dans le cristal. Ce problème est particulièrement critique dans le cas de substitutions de cations ayant des rayons ioniques très différents.

## I.1. Méthode de fusion de zone (FZ)

La fusion de zone (verticale ou horizontale) est surtout considérée comme une méthode de purification des matériaux. Elle peut cependant être utilisée pour la croissance de monocristaux. Dans ce cas le matériau est préparé sous forme d'un barreau polycristallin, monté généralement verticalement sur un support, dont une partie va être fondue localement. La préparation du barreau polycristallin est un point commun crucial entre toutes ces techniques. Le bain fondu est suspendu comme une goutte entre les 2 parties du barreau. Cette zone fondue est ensuite déplacée lentement, traverse le barreau et par refroidissement un monocristal peut être généré à partir de la zone non-fondue du barreau ou sur un germe amené au contact du barreau si une de ses extrémités a été fondue (figure I.2a).

La fusion du matériau peut être obtenue par différentes techniques: induction haute fréquence, concentration d'un rayonnement lumineux ou effet Joule à l'aide d'une résistance extérieure ou partiellement immergée dans la zone liquide. L'utilisation d'une résistance (lame de platine percée de trous par exemple), amenée au contact du barreau permet une fusion de celui-ci. Si un germe est amené au contact de l'autre face de la lame puis déplacé vers le bas, la croissance peut démarrer et cette méthode (appelée résistor plan) peut permettre la croissance de cristaux de grandes dimensions. La croissance sous atmosphère contrôlée est également possible. Ce sont les modes de chauffage par concentration d'un rayonnement lumineux qui se sont le plus développées ces dernières années : lampes (méthode du four à image) ou laser CO<sub>2</sub>. Cette dernière méthode appelée : LHPG: "Laser Heated Pedestal Growth") consiste à provoquer la fusion par utilisation du rayonnement d'un laser CO<sub>2</sub> continu focalisé sur le barreau fritté [2]. Une possibilité intéressante de ces méthodes est le tirage de fibres monocristallines de petits diamètres (500  $\mu\text{m}$  à 1 mm) qui peuvent avoir un certain intérêt en recherche et dans certaines applications [2]. LiNbO<sub>3</sub> est un des matériaux optiques les plus étudiés par ces différentes méthodes de fusion de zone.

### I.3. La méthode de Bridgman

La méthode Bridgman-Stockbarger consiste à abaisser lentement un bain fondu dans un gradient de température faisant passer le bain de l'état liquide à l'état solide. A l'origine la méthode Bridgman consistait à réaliser une croissance sous tubes horizontaux (voir méthode fusion de zone). L'appellation Bridgman-Stockbarger a été donnée à la croissance en creusets verticaux qui peut être réalisée sous différentes configurations thermiques (Figure I.4).

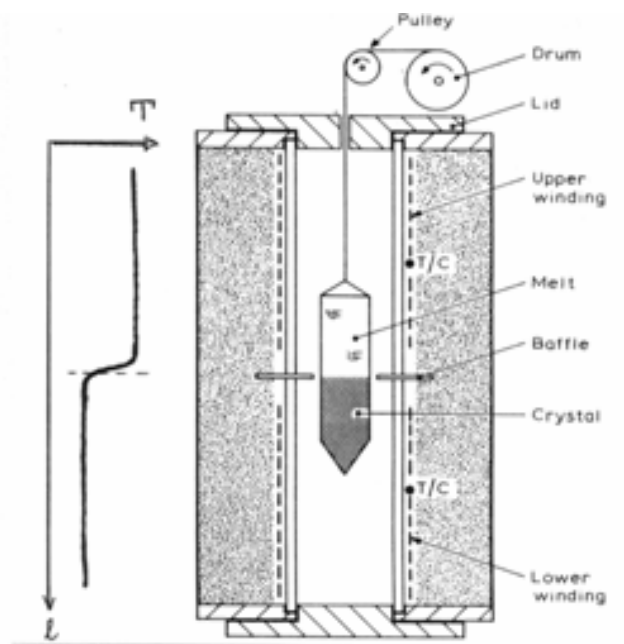


Figure I.4 : Principe d'une expérience de solidification dirigée de type Bridgman

Cette méthode a été développée essentiellement pour la croissance des semi-conducteurs, mais a également trouvé de nombreuses applications pour les cristaux d'halogénures alcalins et de fluorures.

Le matériau à cristalliser est placé dans un creuset que l'on place dans la zone chaude du four à une température supérieure à la température de fusion ( $T_f$ ). Le creuset est alors translaté lentement au moyen d'une tige support dans une zone froide où le cristal se solidifie. Afin d'assurer un bon gradient de température et assurer une interface solide-liquide la plus

homogène possible, un écran thermique peut être utilisé pour bien délimiter les deux zones. Pour ces matériaux l'utilisation d'un creuset en graphite est particulièrement adaptée et d'une réalisation aisée. Le creuset à base conique en pointe permet un bon contrôle du début de croissance en favorisant le démarrage d'un cristal unique. Un germe peut également être placé dans un appendice situé à la pointe du creuset. La croissance de matériaux du type oxyde se heurte au problème du creuset et en particulier au démoulage souvent difficile des cristaux. Le choix du mode de chauffage dépend des matériaux et des conditions de croissance nécessaires. Il existe aussi bien des fours résistifs (résistance en graphite par exemple) que des fours à chauffage inductif. Les vitesses de translation sont de l'ordre de quelques millimètres par heure. Cette méthode est particulièrement adaptée à une cristallisation industrielle : gros cristaux, cristaux en forme ou plusieurs cristaux simultanément (Figure I.5).

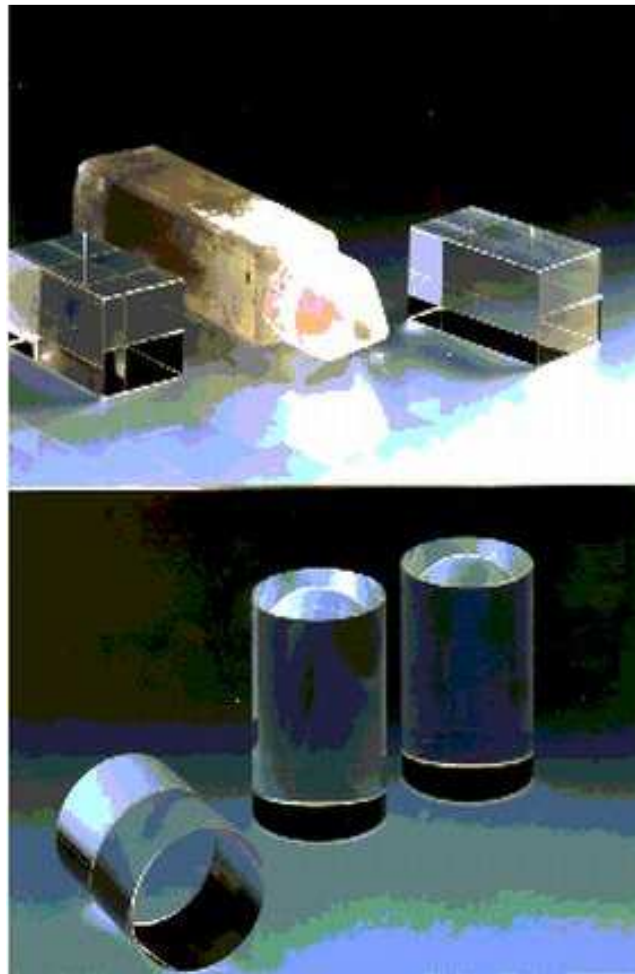


Figure I.5 : Monocristaux de BaF<sub>2</sub> obtenus par méthode Bridgman

Parmi les cristaux pour la photonique, outre les fluorures ( $\text{LiYF}_4$ ,  $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{BaF}_2$ ...), quelques monocristaux d'oxydes peuvent également être obtenus par méthode Bridgman ( $\text{YAlO}_3$ ,  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ,  $\text{Y}_2\text{O}_3$ ...). Suivant la nature du matériau et du creuset, il est possible d'obtenir par méthode Bridgman, des monocristaux préformés de formes simples: cylindres, parallélépipèdes... donnés par la forme du creuset. De nombreuses modifications ont été apportées à cette technique en cherchant notamment à conserver le creuset fixe. Ainsi s'est développée la méthode de l'échangeur thermique (HEM) qui associe la présence d'un germe, placé au fond du creuset, avec un échangeur de chaleur qui permet d'extraire à la partie inférieure du lingot, la chaleur latente de solidification (Figure I.6).

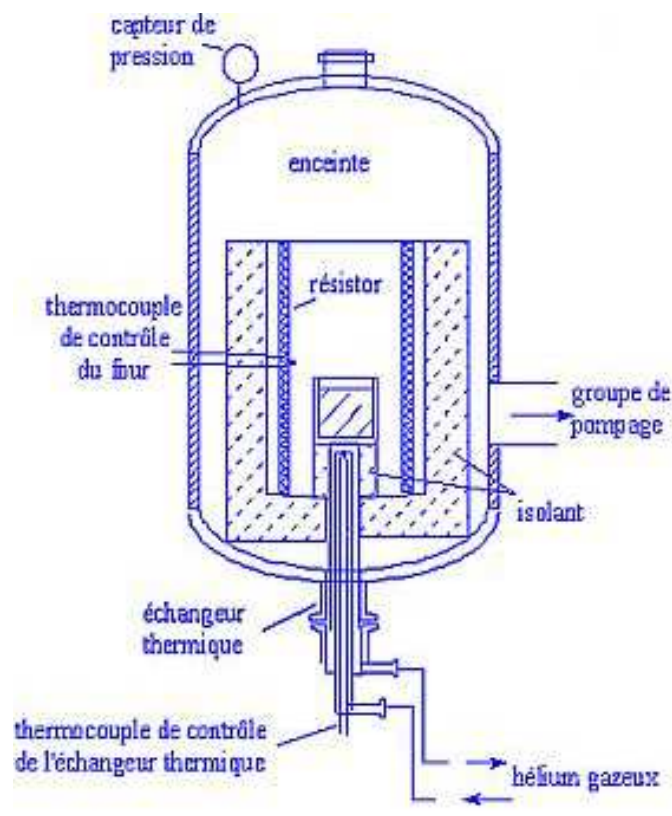


Figure I.6 : Principe de la méthode HEM

Les premiers travaux ont porté sur le saphir pur et dopé et ont abouti à la production de monocristaux de 70 mm de diamètre et de 10 mm d'épaisseur, en vue d'applications telles que les lasers ou l'électro-optique [4]. D'autres matrices monocristallines ont alors été envisagées à des fins commerciales, telles que Y3Al5O12 dopé au néodyme (YAG:Nd), MgF2 dopé au cobalt pour les matériaux lasers. Certains matériaux se sont développés industriellement et présentent une meilleure qualité cristalline lorsqu'ils sont produits par HEM (Al2O3, Bi4Ge3O12, ...), la raison se trouvant, avant tout, dans la forme (convexe) et dans la position (par rapport au liquide) particulières de l'interface durant la croissance, l'absence de mouvement évitant de la perturber [5].

## II ASPECTS FONDAMENTAUX

### II.1. La structure d'interface et l'équilibre thermodynamique local

#### a) Interfaces rigoureuses et facettées

Nous nous intéressons ici au processus de croissance vu comme l'attachement d'unités structurales sur une phase cristalline "macroscopique". A cette échelle, on reste généralement proche des conditions d'équilibre thermodynamique, et loin du domaine des surfusions élevées rencontrées dans les phénomènes de germination. Il nous faut cependant d'abord préciser un certain nombre d'idées sur les notions de structure d'interface et d'équilibre thermodynamique local. Ici encore, nous nous en tiendrons aux phénomènes de base, une présentation beaucoup plus complète et rigoureuse pouvant être trouvée dans l'article de revue de Bennema [6] ou dans le livre de Flemmings [7].

La surface de séparation entre la phase liquide et la phase solide (l'interface) peut être plus ou moins complexe : la géométrie la plus simple à concevoir est celle d'un plan parfaitement lisse à l'échelle atomique (on parle alors d'interface facettée, voir figure I.7-a) mais on peut également imaginer une configuration de plus ou moins grande rugosité (figure I.7-b). On peut enfin concevoir que, dans la pratique, une interface facettée au niveau macroscopique présente souvent des défauts de structure à l'échelle de l'unité structurale (terrasses, marches, décrochements, trous ou unités adsorbées, cf. figure I.7-c), et on verra que ces rugosités locales jouent en fait un grand rôle dans la cinétique du processus de solidification. Il faut également noter que des modèles théoriques ont été proposés pour prédire la rugosité des interfaces (voir par exemple le travail de base de Jackson [8], mais que leur présentation dépasserait le cadre de ce texte.

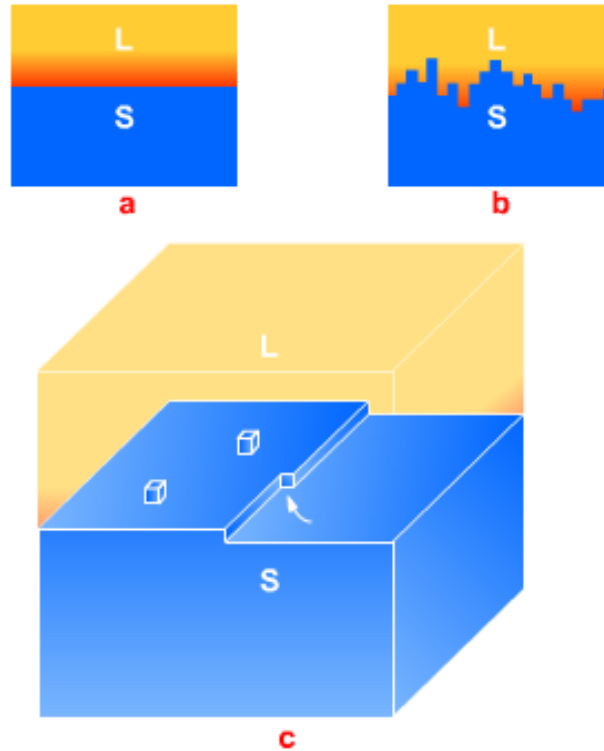


Figure I.7 : Surfaces de séparation facettées (a,c) et rugueuse (b) entre phases solide et liquide [7]. Par rapport au cas idéal (a), l'interface (c) présente deux unités adsorbées, une marche et un décrochement indiqué par une flèche.

Cela dit, la notion même de surface de séparation est une commodité mathématique dont la validité physique mérite d'être discutée. Les résultats de simulation par dynamique moléculaire montrent en effet que l'amplitude des mouvements des unités structurales ne subit pas nécessairement une discontinuité marquée au passage de la température de fusion. La transition liquide-solide se fait parfois sur une zone diffuse dont l'épaisseur est typiquement de quelques unités structurales (voir figure I.8).

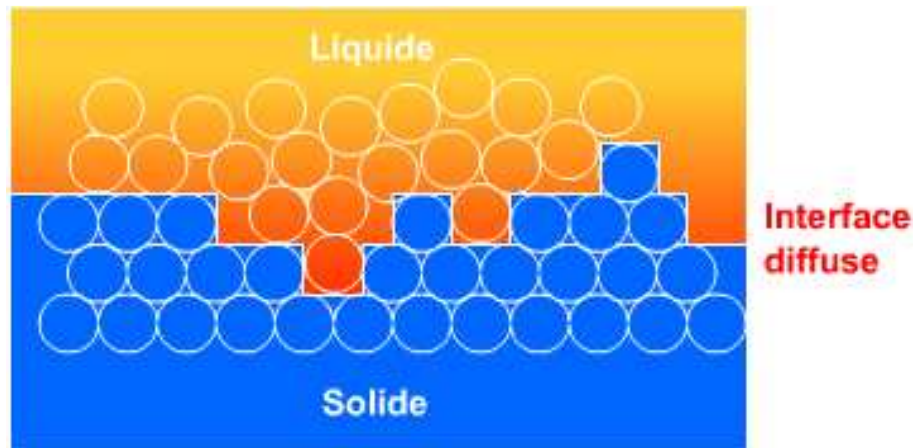


Figure I.8 : Représentation de la transition liquide-solide à travers une zone diffuse, dont l'épaisseur est typiquement de quelques unités structurales [7].

Les problèmes de configuration et de cinétique de croissance sur ces interfaces diffuses ont été abordés dans la littérature (voir par exemple le travail fondateur de [9], mais les développements théoriques dépassent le cadre de ce propos. On s'en tiendra donc à la représentation simplifiée de surface matérielle pour caractériser les fronts solide-liquide. Le processus de croissance cristalline se déroulant très fréquemment en présence de gradients de température et de concentration,

Le système ne peut pas être globalement à l'équilibre thermodynamique. On peut néanmoins introduire la notion d'équilibre thermodynamique local à l'interface de croissance, en étudiant sous quelles conditions une unité structurale incorporée dans le solide pourra trouver une « bonne » position dans le réseau cristallin. Quelle que soit la structure du front de croissance, on peut penser que le processus nécessitera une diffusion de « surface » de coefficient  $DS$  sur une échelle de longueur de l'ordre de la dimension de l'unité structurale, notée ici  $a$ . Le problème a été volontairement formulé de façon assez vague, mais on va voir que l'analyse des ordres de grandeur suffit pour tirer une conclusion sur la validité de l'hypothèse d'équilibre local. Un résultat général des études sur les Phénomènes de transport est qu'un processus de diffusion de coefficient  $D$  sur une échelle  $d$  se fait à une vitesse de l'ordre de  $D/d$ .

*b) Microstructure de solidification*

La microstructure d'un matériau solide est la trace, parfois complexe, laissée par les transformations de la matière subies au long de toute la chaîne d'élaboration et de traitements successifs. La raison première de l'existence des microstructures dans les matériaux est le manque relatif de mobilité des atomes à l'état solide.

La microstructure résulte d'une déstabilisation morphologique dont l'origine est thermique pour un métal pur et constitutionnel pour un alliage. La croissance d'un alliage dans des conditions d'instabilité d'interface de solidification peut conduire à des microstructures de type cellulaire ou de type dendritique comme illustré sur la figure I.9.

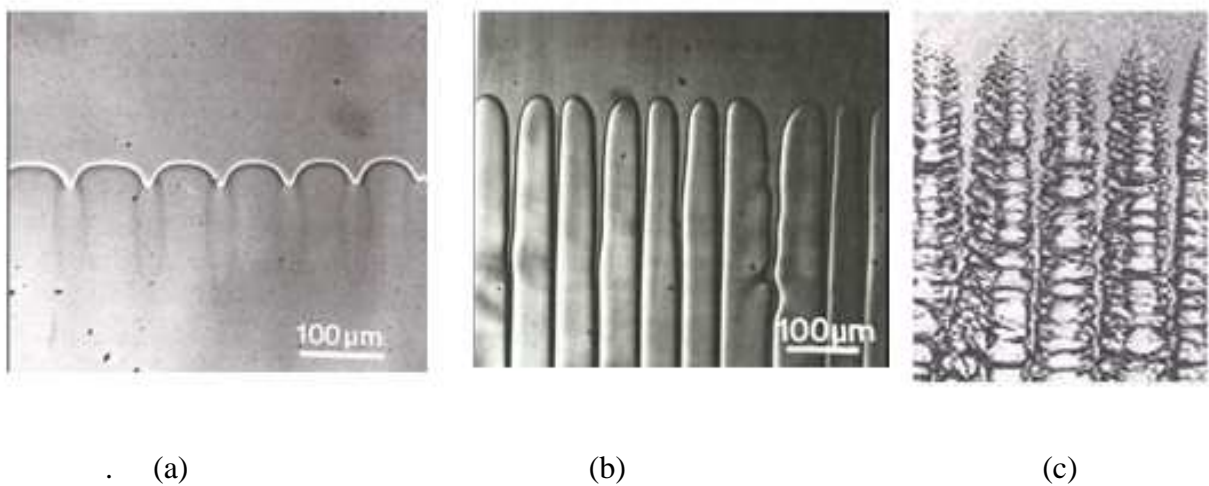


Figure I.9 : Différentes formes d'interface de solidification:

(a) Cellules d'amplitude faible, (b) cellules profondes, (c) dendrites colonnaires.

## II.2 LA THEORIE DE SEGREGATION

Le terme ségrégation réfère à la redistribution des constituants dans le bain pendant la solidification. Cependant, la ségrégation est un facteur majeur de contrôle de la qualité du cristal obtenu de la croissance à partir d'un bain fondu. Cette section revoit les notions physiques de base sur les ségrégations chimiques et les méthodes possibles de leurs réductions.

### II.2.1 Conservation de soluté

Les ségrégations chimiques sont contrôlées au cours de croissance par le diagramme de phase d'équilibre de l'alliage métallique. La condition d'équilibre à l'interface solide-liquide exige que la composition du liquide  $C_L$  et la composition du solide  $C_S$  à l'interface soit fixée par le diagramme de phase. Le rapport  $C_S / C_L$  est constant et égale au coefficient de partage d'équilibre  $k_p$  :

$$k_p = C_S / C_L \quad (\text{I.1})$$

L'uniformité de l'incorporation du soluté dans le solide et sa distribution dans le liquide est contrôlée par les équations de continuité et les équations de conservation de quantité de mouvement (Navier et Stokes), d'énergie et de concentration.

L'équation décrivant le rejet du soluté à l'interface est la suivante:

$$C_S = k_p C_0 (1 - f_s)^{k_p - 1} \quad (\text{I.2})$$

Où la concentration du solide, coefficient de ségrégation, concentration initiale du soluté et la fraction solidifiée sont donnés par  $C_S$ ,  $k$ ,  $C_0$ ,  $f_s$  respectivement. Cette équation est connue comme étant l'équation de Pfann [10] pour mélange complet.

## II.2.2 Ségrégation longitudinale

### a) La règle de Scheil-Gulliver

Une hypothèse simple permettant de calculer le profil de concentration le long d'un barreau solidifié directionnellement est de supposer que la composition du bain liquide est à chaque instant homogène. Cette hypothèse n'est pas stricto sensu compatible avec l'équation représentant la conservation du soluté au front de croissance.

$$-D_L \left( \frac{\partial C_L}{\partial z_L} \right) = V_I (1 - k_P) C_L \quad (\text{I.3})$$

Sauf à considérer une vitesse d'interface  $V_I$  nulle ou un coefficient de diffusion  $D_L$  infini. La présence de mouvements convectifs intenses dans le bain fondu, une situation assez fréquente dans la pratique, permet une homogénéisation quasi-parfaite de la composition. Quoi qu'il en soit le calcul de la concentration  $C_s(z) = k_p C_L(z)$  à la côte  $z$  d'un barreau de longueur  $L$  peut se faire en écrivant un bilan de conservation. En effet, la quantité de soluté incorporée dans le cristal doit être égale à la variation de la masse de soluté présente en phase liquide  $Q$ , cette dernière étant proportionnelle à  $(L - z)C_L(z)$ . On ne détaillera pas ici le calcul, le lecteur pouvant par exemple se reporter à la référence Garandet [11] pour une présentation plus complète. Une intégration de la relation  $dQ = -k_p C_L(z)$  à partir de la condition initiale  $C_L = C_0$  en  $z = 0$  permet d'accéder au profil de concentration :

$$C_s(z) = k_p C_L(z) = k_p C_0 (1 - f_s)^{(k_p - 1)} \quad (\text{I.4})$$

$f_s$  : fraction solidifiée, définie par  $f_s = z/L$

L'équation précédente est connue dans la littérature sous le nom d'équation de Scheil-Gulliver. Les profils correspondants sont représentés sur la figure I.10 pour différentes valeurs de  $k_p$ , [12]. On constate que les variations de concentration le long du barreau peuvent être très importantes pour les coefficients de partage significativement différents de l'unité. Cela posé, comme nous l'avons déjà signalé pour le problème des contraintes de croissance, les variations acceptables pour une application donnée doivent être quantifiées au cas par cas par les utilisateurs.

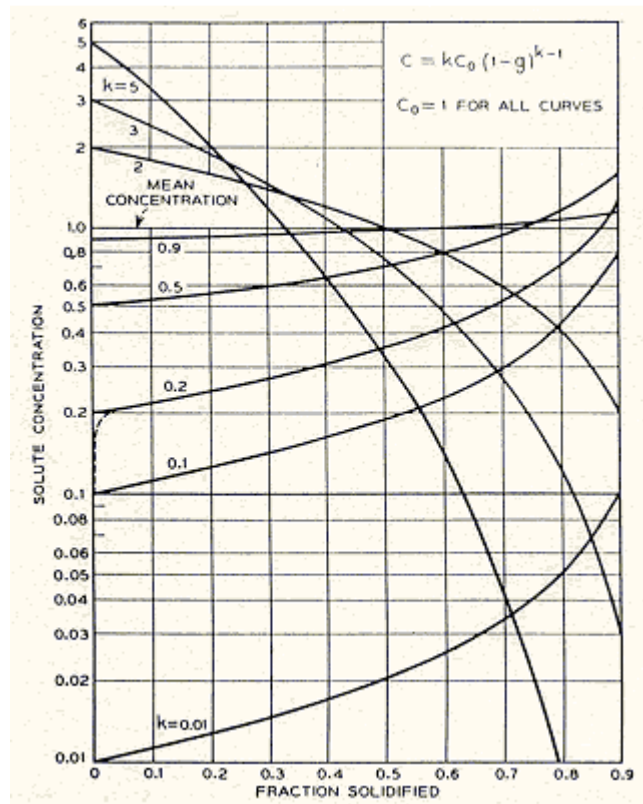


Figure I.10 : Représentation des profils de concentration le long du cristal dans l'hypothèse de mélange complet dans le bain (cf. loi de Scheil), pour diverses valeurs du coefficient de partage  $k_p$  [12].

Il importe par ailleurs de remarquer que la loi de Scheil-Gulliver ne peut rester valable jusqu'à la fin de la solidification ( $f_s = 1$ ) pour les valeurs de  $k_p < 1$ , puisque la concentration prédite devient infinie. Dans la pratique, plusieurs mécanismes peuvent être activés:

- A gradient de température et vitesse de croissance données, l'interface solide-liquide subit une instabilité morphologique quand la concentration dépasse le seuil de Mullins et Sekerka [13] avec formation de cellules ou de dendrites. Cette transition fait que le problème ne peut plus être considéré monodimensionnel.

- La solubilité du soluté en phase solide est généralement limitée. Une structure eutectique ou péritectique va donc se former quand la composition dépasse un certain seuil, et il devient ici

également nécessaire de tenir compte du transport de masse dans les directions normales à celle de la croissance.

- même dans les systèmes à miscibilité totale, le coefficient de partage ne peut rester constant quand la concentration devient trop élevée, et il n'est plus possible de réaliser simplement l'intégration de la relation de conservation.

### b) Cas diffusif dans le liquide

Une autre hypothèse permettant de quantifier le profil de concentration dans les cristaux élaborés est de supposer que le transport solutal est purement diffusif, ou en d'autres termes que la vitesse de convection, solution des équations de Navier-Stokes, est partout nulle ou négligeable.

Dans le repère mobile à la vitesse  $V_I$  du front de croissance, l'équation régissant la conservation de la masse dans la phase liquide peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_L}{\partial z_L^2} + V_I \frac{\partial C_L}{\partial z_L} \quad (\text{I.5})$$

$Z_L$  : distance au front de croissance

Il faut également spécifier une condition à l'autre extrémité du domaine liquide, supposé ici infini pour des raisons de commodité mathématique.

En prenant  $C_L \rightarrow C_0$  quand  $z_L \rightarrow \infty$ , on trouve facilement que le système admet une solution quasi stationnaire  $dC_L / dt = 0$  de la forme :

$$C_L(z_L) = C_0 \left\{ 1 + \left[ \frac{(1-k)}{k} \right] \exp\left(-\frac{V_I Z_L}{D_L}\right) \right\} \quad (\text{I.6})$$

La composition dans le liquide à l'interface  $z_L = 0$  étant égale à  $C_0 / k$ , cette solution montre qu'il est possible d'atteindre un régime optimal du point de vue de la ségrégation où la composition dans le solide formé est égale à la composition nominale de l'alliage. Il est intéressant par ailleurs de remarquer que les variations de concentration dans le liquide se font dans une couche limite d'épaisseur caractéristique  $\delta = D_L / V_I$  à l'avant du front de solidification. Ce résultat permet de préciser les hypothèses de départ : tout d'abord, l'infini de la condition aux limites doit être mesuré à l'échelle de la couche limite elle-même. Dans la

pratique, vu sa structure exponentielle, la solution sera correcte dès que la dimension du bain fondu dépassera quelques  $D_L/V_I$ . Plus important, il n'est en fait pas nécessaire que la vitesse de convection soit nulle partout dans le bain, une condition suffisante est que le transport convectif soit négligeable à l'échelle de la couche limite. Le front de croissance étant une frontière où la vitesse de convection doit s'annuler (hypothèse de non glissement sur les surfaces solides). La validité de cette condition dépend fortement de la vitesse de solidification  $V_I$  imposée par l'utilisateur.

*c) cas intermédiaire : convecto-diffusif*

Quel que soit le mode de transport dans le bain, il existe une couche limite solutale enrichie (pour  $k < 1$ ) ou appauvrie (pour  $k > 1$ ) à l'avant du front de solidification. Cette idée a été confirmée par un bon nombre de résultats expérimentaux ou de simulations numériques. L'effet de la convection est globalement de réduire l'épaisseur de cette couche limite par rapport à sa valeur  $D_L/V_I$  en régime diffusif. Du point de vue mathématique,  $\delta$  peut être définie à partir de la relation suivante:

$$\delta = - \frac{(C_L^I - C_L^\infty)}{\left( \frac{\partial C_L}{\partial x_L} \right)_I} \quad (I.7)$$

$C_L$  : concentration dans le bain fondu loin de l'interface, cet infini devant bien sûr être encore mesuré à l'échelle de la couche limite elle même.

En régime de croissance diffusif quasi permanent  $C_L^I = (C_L^\infty / k)$ , et on retrouve  $\delta = (D_L / V_I)$ .

En revanche une convection intense aura pour effet de brasser efficacement le bain de sorte que  $C_L^I$  sera proche de  $C_L^\infty$  avec pour conséquence une réduction de  $\delta$ .

Il est intéressant de définir un paramètre de convecto-diffusion  $\eta = \delta V_I / D_L$  en normalisant l'épaisseur de la couche limite  $\delta$  par sa valeur de référence en régime diffusif  $D_L / V_I$ . Donc la concentration à l'interface  $C_L^I$  peut être calculée comme suit:

$$C_L^I = \frac{C_L^\infty}{[1 - (1-k)\eta]} \quad (\text{I.8})$$

La dernière étape consiste à définir un coefficient de partage effectif  $k_{\text{peff}}$  comme étant le rapport de la composition incorporée dans le solide  $C_S^I$  à la composition au loin dans le bain  $C_L^\infty$ . Il vient :

$$k_{\text{eff}} = \frac{C_S^I}{C_L^\infty} = \frac{k C_L^I}{C_L^\infty} = \frac{k}{[1 - (1-k)\eta]} \quad (\text{I.9})$$

Le coefficient de partage effectif  $k_{\text{eff}}$  variant entre ( $k = 0$ ) pour les régimes de convection intense ( $\eta = 0$ ) et ( $k = 1$ ) pour le régime diffusif ( $\eta = 1$ ). Un des résultats du travail pionnier de Burton, Prim et Schlichter [14] a été de montrer que  $k_{\text{eff}}$  pouvait être substitué à  $k$  dans l'équation de Scheil-Gulliver pour prédire les profils de ségrégation axiale dans les cristaux élaborés :

$$C_S(z) = k_{\text{eff}} C_0 (1 - f_s)^{k_{\text{eff}}} (k_{\text{eff}} - 1) \quad (\text{I.10})$$

L'équation précédente n'est valable qu'après une phase transitoire nécessaire pour que la concentration  $C_S(z)$  passe de  $k C_0$  à  $k_{\text{eff}} C_0$ . Par ailleurs, la discussion faite au dessus sur la validité de l'équation de Scheil-Gulliver à la fin de solidification pour  $k < 1$  peut être reprise ici. Pour les variations de l'épaisseur de la couche limite le long du front de croissance sont associés aux ségrégations radiales. Plus de détails dans ce qui suit.

### II.2.3 Ségrégation radiale

#### a) cas convectif

On suppose que le liquide est homogénéisé à chaque instant par un fort mouvement convectif. A l'instant t le front de solidification est dans la position Z/L (L : longueur de l'échantillon) et la concentration en soluté est :

$$C\left(\frac{z}{L}\right) \tag{I.11}$$

Après un interval de temps dt la fraction solidifiée sera liquide

$$\left(\frac{z}{L}\right) + f \tag{I.12}$$

Ou f est la déflexion de l'interface. Donc la concentration en soluté est :

$$C\left(\left(\frac{z}{L}\right) + f\right) \tag{I.13}$$

Donc, la différence maximale de concentration dans le solide le long de l'interface est :

$$\Delta C = C\left(\frac{z}{L} + f\right) - C\left(\frac{z}{L}\right) \tag{I.14}$$

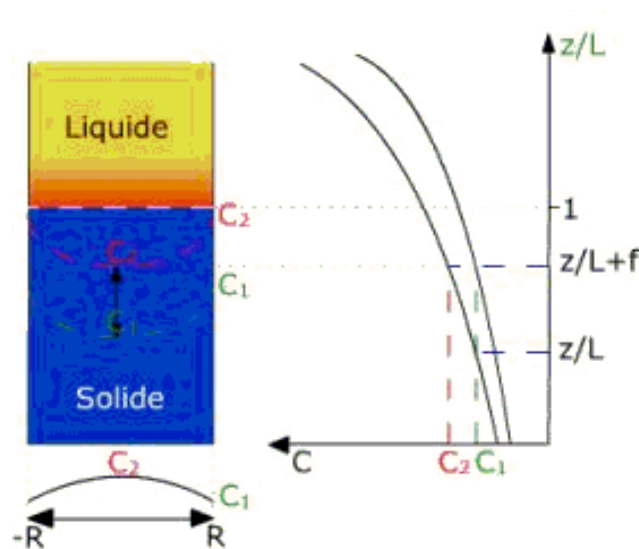


Figure I.11 : Ségrégation radiale et axiale dans un système à deux dimensions

En utilisant la formule de Scheil [15] :

$$\Delta C = k(k-1)C_0 \left(1 - \frac{z}{L}\right)^{k-2} f \quad (\text{I.15})$$

Finalement, la ségrégation radiale dépend de la courbure de l'interface.

*b) cas diffusif*

Dans le cas diffusif (la convection est considérée négligeable), le facteur principal qui joue sur la ségrégation radiale est la déflexion de l'interface solide-liquide. Le soluté est rejeté et diffusé normalement à l'interface et se concentre au centre de l'interface, figure I.12.

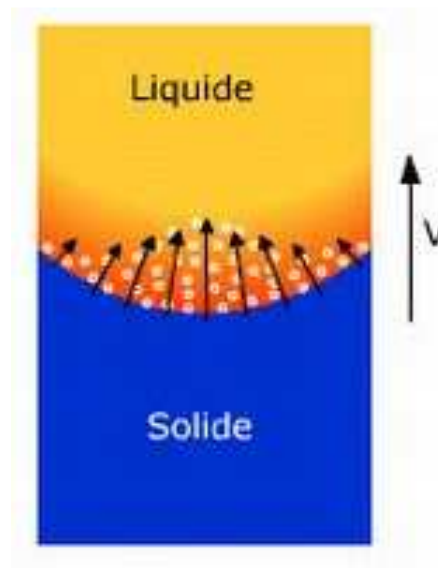


Figure I.12 : Ségrégation radiale dans le régime diffusif

Coriell et Sekerka [16] ont calculé analytiquement une relation entre la différence radiale de concentration et la courbure de l'interface dans le cas d'une courbure faible.

En régime stationnaire la concentration en soluté satisfait l'équation du transport de masse :

$$\nabla^2 C + \frac{V}{D} \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (\text{I.16})$$

Avec

V: vitesse de solidification

D: diffusivité chimique

Avec les conditions aux limites :

$$\nabla C_L^i (k - 1) = D \frac{\partial C}{\partial z} \quad (\text{I.17})$$

$$C_L (Z \rightarrow \infty) = C_0 \quad (\text{I.18})$$

$C_L^i$  étant la concentration en soluté dans le liquide à l'interface.

En utilisant le développement en série de Fourier, l'expression obtenue par Coriell et Sereka [16] pour la ségrégation radiale est:

$$\partial C = \frac{V}{D} (1 - k) f \quad (\text{I.19})$$

où

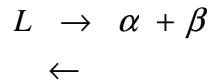
$$\delta C = \frac{C_{max} - C_{min}}{C_{moyen}} \quad (\text{I.20})$$

La formule (I.20) représente la forme adimensionnelle de la ségrégation radiale avec  $(C_{max} - C_{min})$  est la différence maximale de concentration dans le solide le long de l'interface et  $C_{moy}$  la valeur moyenne de la concentration dans le solide également le long de l'interface.

### II.3. POLYPHASES MICROSTRUCTURE

#### a) l'eutectique

Plusieurs diagrammes de phases présentent une réaction eutectique, c'est-à-dire qu'un liquide L se transforme au cours du refroidissement pour donner deux phases solides  $\alpha$  et  $\beta$  suivant :



Voici un diagramme typique où l'on trouve un point eutectique E (Figure I.13). Ce point est caractérisé par une composition et une température précises.

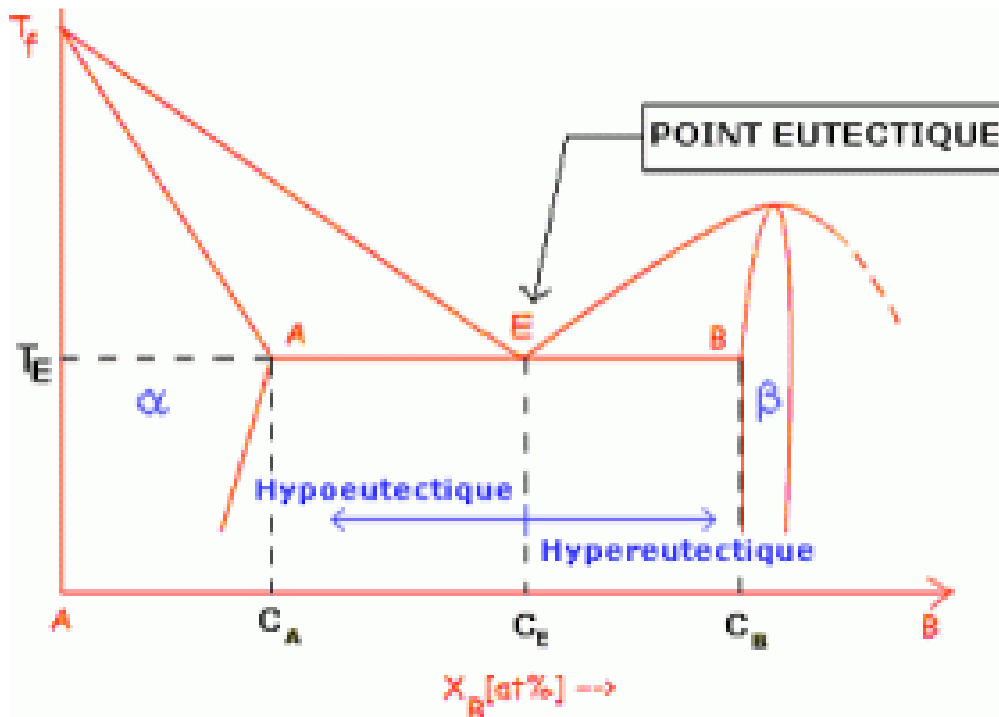


Figure I.13 : Diagramme de phase: point eutectique [17]

En partant d'un mélange à la composition eutectique et en refroidissant au dessous de la température eutectique on aboutit à la formation de deux solides  $\alpha$  et  $\beta$  dont les proportions des phases peuvent être calculées par la règle des segments inverses :

Proportion de solide  $\alpha$  :

$$f_{\alpha} = \frac{EB}{AB} = \frac{AB - AE}{AB} \quad (\text{I.21})$$

Proportion de solide  $\beta$  :

$$f_{\beta} = \frac{AE}{AB} = \frac{AB - EB}{AB} = 1 - f_{\alpha} \quad (\text{I.22})$$

La figure I.14 est caractéristique d'une structure eutectique  $\alpha$  en noir et  $\beta$  en blanc. les constituant eutectique : solide biphasé, agrégat des phases  $\alpha$  à la composition  $C_A$  et  $\beta$  à la composition  $C_B$ , de composition moyenne  $C_E$ .

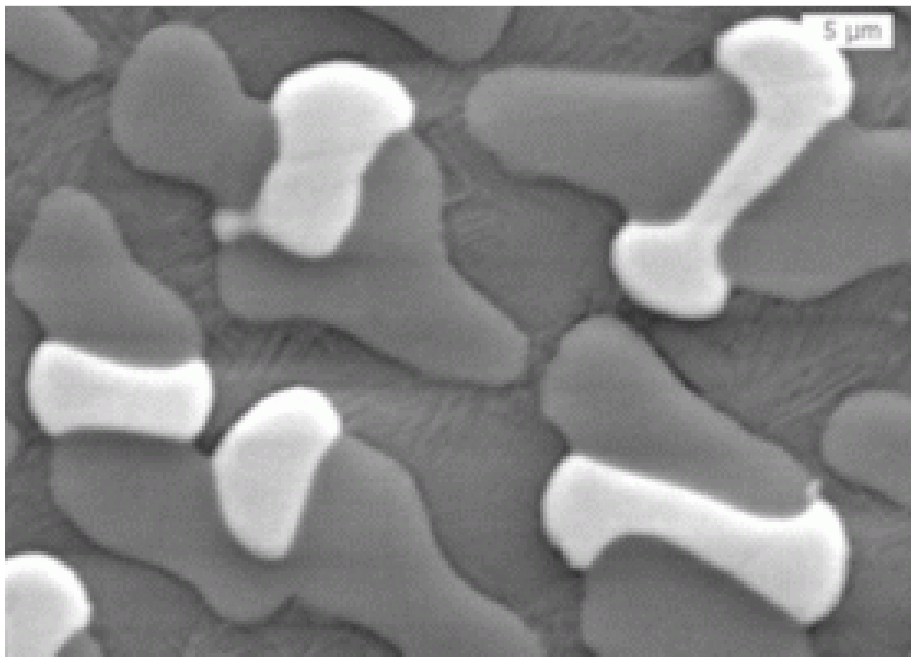
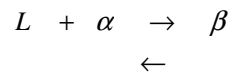


Figure I.14 : Structure eutectique [18]

## b) péritectique

Plusieurs diagrammes de phases présentent une réaction péritectique, c'est-à-dire qu'une phase solide  $\alpha$  réagit avec une phase liquide L au cours du refroidissement pour donner une seconde phase solide  $\beta$ .



En partant d'un mélange hypo péritectique (la fraction en B est inférieure à celle du point péritectique) et en refroidissant au dessous du palier péritectique, on aboutit à une solution solide de  $\alpha$  et de  $\beta$  dont les proportions des phases peuvent être calculées par la règle des segments inverses. Au cours du refroidissement, une petite couche des grains de  $\alpha$  réagit avec le liquide pour donner la phase solide  $\beta$  autour des grains  $\alpha$ . Dans le cas d'un mélange hyper péritectique (la fraction en B est supérieure à celle du point péritectique) et après refroidissement au dessous du palier péritectique, il ne reste aucun grain de  $\alpha$  et on obtient uniquement une phase  $\beta$  en équilibre avec le liquide (voir figure I.15).

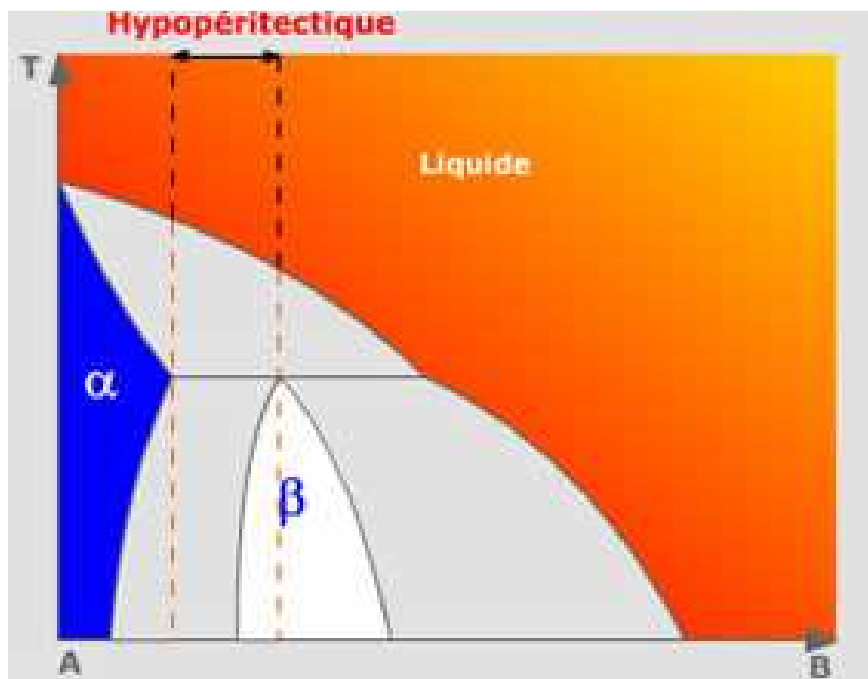


Figure I.15 : Diagramme de phase: point péritectique

Suite à une croissance péritectique on aboutit normalement à une microstructure de type granulat plus liant : les granulats sont des dendrites de la phase  $\alpha$  entourées de rubans de  $\beta$  et le liant des dendrites de phase  $\alpha$ . Suivant les conditions de la transformation péritectique, la phase  $\alpha$  initiale peut être soit conservée, soit partiellement dissoute. En condition de refroidissement contrainte, on peut observer des structures en bande parallèles (Figure I.17).

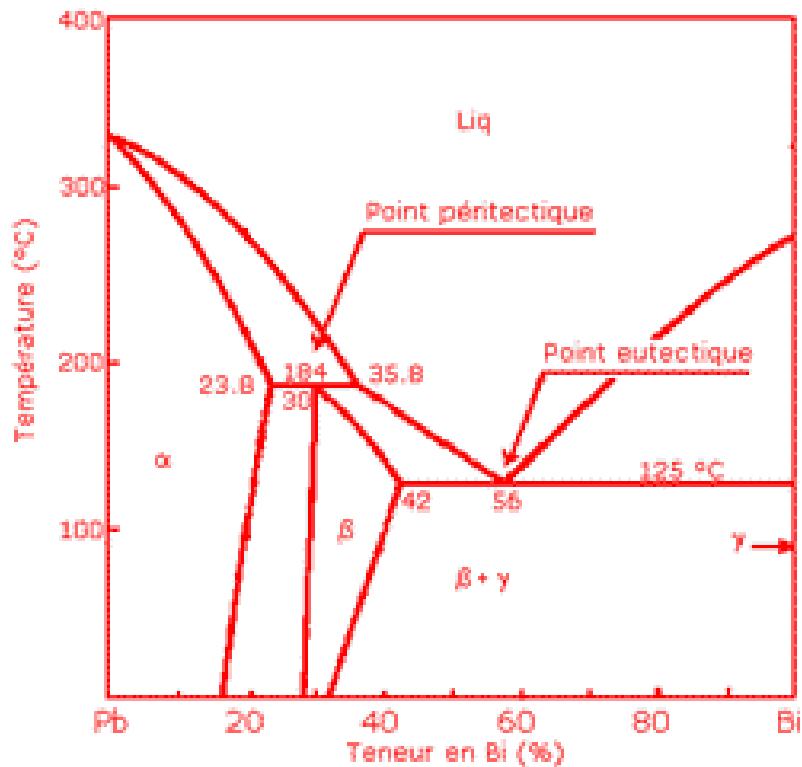


Figure I.16 : Diagramme de phase de plomb – bismuth (Pb-Bi) [19]



Figure I.17 : Structure lamellaire de l'alliage Ti-Al 53,4 at% [20]

## II.4. LA CONVECTION EN ZONE PÂTEUSE

Avant d'expliquer le phénomène de convection en zone pâteuse, il semble judicieux de définir correctement à quoi correspond la zone pâteuse.

La zone pâteuse ou « mushy zone » apparaît au cours de la solidification et doit son existence à l'instabilité de l'interface liquide/solide. Elle correspond à un milieu biphasé pour lequel les valeurs macroscopiques de la température et de l'enthalpie ne permettent plus de distinguer la phase solide de la phase liquide: les deux phases sont intimement liées. Cette zone est schématisée sur la figure I.18 et on voit que dans le cas d'une croissance colonnaire (b), cette zone est constituée d'un tissu dendritique solide autour duquel se trouve le liquide interdendritique. Remarquons que les zones pâteuses en (a) et (b) n'ont pas la même configuration géométrique.

Cependant, des mouvements convectifs apparaissent dans la zone pâteuse. Il a été prouvé expérimentalement que ceux-ci modifiaient de façon considérable la morphologie de la zone pâteuse et les ségrégations qui se forment. Il existe donc un fort couplage entre la morphologie et l'écoulement. En effet, la convection dans la zone pâteuse modifie le transport de la chaleur et du soluté par lequel la solidification est contrôlée; elle affecte ainsi le changement de phase et par suite la formation de défauts. L'influence de la convection en zone pâteuse sur la formation des ségrégations ne peut être négligée. Il est par conséquent important de déterminer l'origine de ces mouvements convectifs afin de pouvoir les modéliser et les contrôler.

Les mouvements du liquide interdendritique dans la zone pâteuse sont dûs essentiellement à la convection naturelle dont l'origine est à la fois thermique et solutale :

- Effet thermique : lors du refroidissement, il y a présence de gradients de température importants qui induisent des différences de densité dans le liquide : le liquide plus chaud donc plus léger est soumis à la poussée d'Archimède et on assiste à la mise en place de cellules de convection.
- Effet solutal : il existe également des gradients de concentration, ou gradients solutaux, dus au rejet de soluté dans le liquide ce qui engendre une augmentation ou une diminution de la densité de celui-ci.

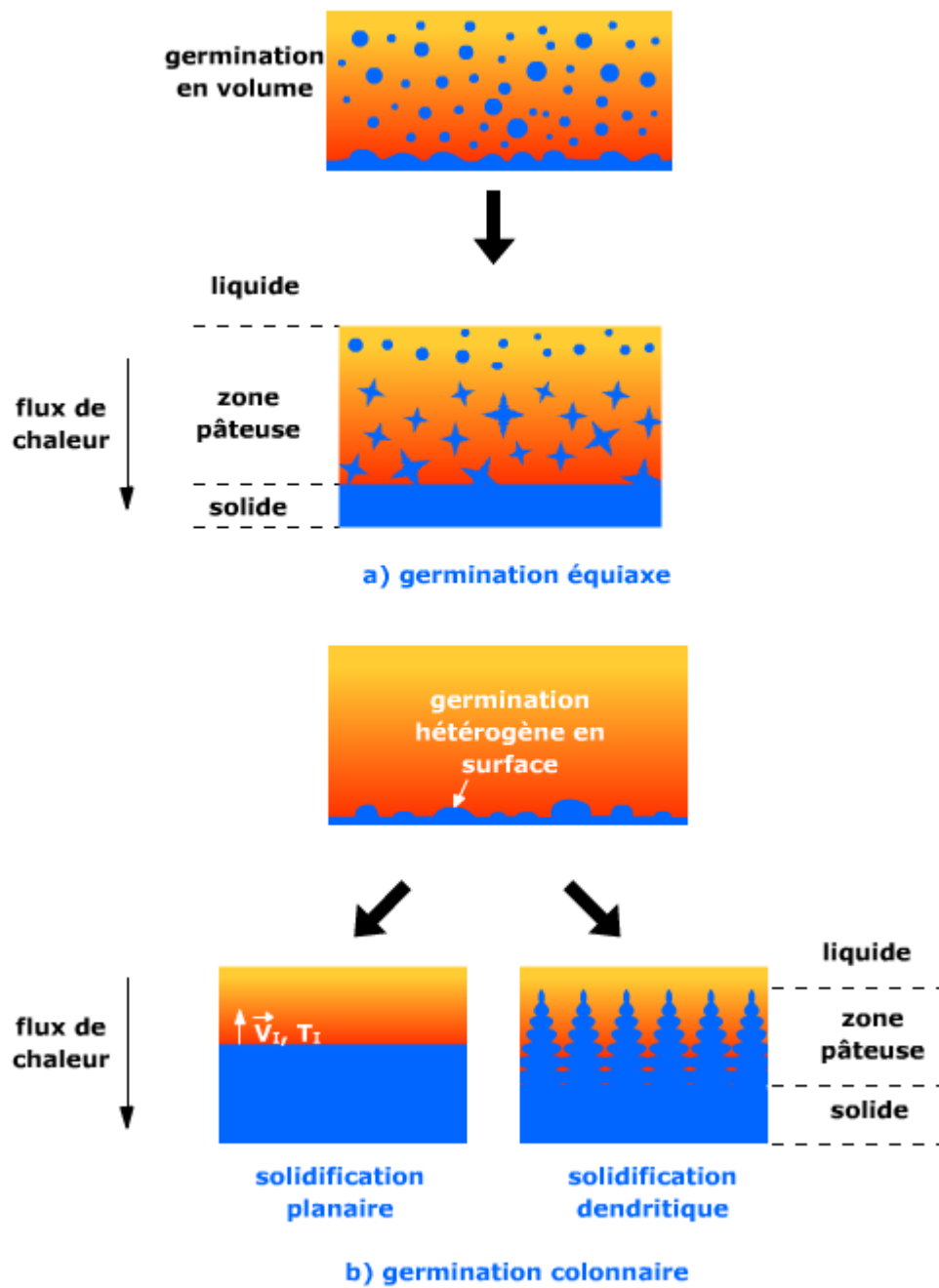


Figure I.18 : Schéma de la zone pâteuse  
 a/ cas d'une croissance dendritique équiaxe  
 b/ cas d'une croissance dendritique colonnaire

La variation de densité résultante correspond, dans l'approximation de Boussinesq, à la relation :

$$\rho = \rho_0 \left( 1 + \beta_T \Delta T + \beta_C \Delta C_l \right) \quad (\text{I.23})$$

$\beta_T$  représente le coefficient d'expansion thermique,  $\beta_C$  le coefficient d'expansion solutal et  $C_l$  la concentration en soluté dans le liquide interdendritique. Donc, les gradients solutaux sont couplés aux gradients de température. L'hypothèse d'un liquide interdendritique à l'équilibre thermodynamique (c'est-à-dire parfaitement mélangé, sans surfusion constitutionnelle) donne par l'intermédiaire du diagramme des phases  $\Delta T = m_l \Delta C_l$ . De ce fait:

$$\rho = \rho_0 \left[ 1 + \left( \beta_T + \beta_C / m_l \right) \Delta T \right] \quad (\text{I.24})$$

Comme  $\beta_C / m_l$  est de l'ordre de  $10^{-2}$  à  $10^{-3}$  et  $\beta_T$  de l'ordre de  $10^{-4}$  pour les alliages métalliques, on peut dans la plupart des cas négliger la convection thermique dans la zone pâteuse. La force volumique de pesanteur s'exerçant sur un élément de volume de liquide de masse volumique  $\rho$  s'écrit :

$$F_P = \rho g = \rho_0 \left( 1 + \beta_C / m_L \Delta T \right) g \quad (\text{I.25})$$

Le bilan avec la force d'Archimède donne :

$$F_P + F_A = \rho g - \rho_0 g = \beta_C / m_L \Delta T g \quad (\text{I.26})$$

Les effets convectifs vont beaucoup dépendre de l'orientation des gradients solutaux par rapport au vecteur gravité.

### III. SOLIDIFICATION SOUS L'EFFET D'UN BRASSAGE EXTERNE

On peut espérer contrôler, dans certaine mesure, la qualité du produit par la maîtrise des écoulements présents dans la phase liquide. Plusieurs moyens extérieurs (brassage mécanique, électromagnétique ..... ) ont été utilisés. Ils produisent des écoulements forcés dans le bain liquide et dans la zone pâteuse qui ont un effet important sur les propriétés de cette zone modifiant les conditions de solidification. Un certain nombre d'études théoriques sur l'effet de la convection forcée ou naturelle sur la solidification dendritique ont montré que la couche solutale en avant de la pointe de la dendrite, est fortement perturbée. Les résultats montrent que, plus la convection n'est importante, plus la taille de la couche solutale diminue [21]. En effet, la convection tend à homogénéiser aussi bien la température que la concentration à la pointe de la dendrite, donc à redistribuer le rejet de soluté en changeant les phénomènes d'accumulation. La vitesse de la pointe de la dendrite s'accroît donc avec la vitesse du fluide [22-23]. Mise à part leur influence sur la direction de croissance des dendrites, ces homogénéisations solutales et thermiques autour des dendrites ont l'avantage, dans certain cas, de limiter la macro ségrégation, d'éviter la formation de porosité et d'affiner la structure [24-26]. Dans ce qui suit, nous allons brièvement commenter les différentes méthodes utilisées dans la littérature pour brasser le bain liquide ainsi que leurs effets sur la solidification dirigée.

#### III.1. Brassage mécanique (vibrationnel)

L'avantage de ce type de brassage est le fait qu'il peut s'appliquer à tous les matériaux métalliques ou autre (alliage transparent, poudre...). Deux types de vibrations mécaniques peuvent être distinguées : axiales et rotatives.

##### *a) Vibration axiale*

Des expériences de solidification ont été menées par Nguyen Thi et al [27] sur l'alliages binaires Al-Ni à 1.5% et 3.5% pds en Ni pour des valeurs de gradients de température variant entre 20 et 50 K.cm<sup>-1</sup> et des vitesses de tirage comprises entre 0.3 et 12 μm.s<sup>-1</sup>. Le mouvement est créé dans le bain liquide en faisant vibrer le creuset. Les paramètres de référence pour analyser l'effet des vibrations sont la fréquence de vibration et l'amplitude.

Les premiers résultats ont montré qu'il existe un effet sur la croissance dendritique mais aucun effet notable n'a été observé en régime de croissance cellulaire ce qui confirme

l'importance de la zone pâteuse. A partir d'un niveau de vibration suffisant, Nguyen Thi et al [27] ont constaté le passage d'une structure colonnaire dendritique vers une structure fragmenté.

*b) Vibration par rotation (accelerated crucible rotation technique)*

On impose un mouvement de rotation au creuset, ce qui peut induire trois types d'écoulements dans le bain liquide (Couette, Ekman et spirale) [28-30]. Le creuset peut atteindre des vitesses de rotation de 100 à 400 tours par minute. Cette rotation peut être effectuée soit en rotation simple, soit en alternant le sens de rotation et imposant un signal (trapèze, sinusoïde, triangle.....). Des études [31-32] ont montré que l'écoulement induit par cette méthode ainsi que son effet sur la microstructure dépend du niveau de convection.

Lors de la solidification d'alliages transparents (SCN éthanol), Mao et al [33] ont mis en évidence trois domaines différents en fonction des caractéristiques du brassage paramétrées par le nombre de Reynolds (rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses).

$Re < 40$ , l'espacement primaire diminue (cellules et dendrites).

$Re > 40$ , passage du front dendritique ou cellulaire vers un front plan.

$Re \approx 500$ , régime instable (très turbulent) avec une augmentation de l'espacement primaire (dendrites) due à la fragmentation.

### III.2. Brassage électromagnétique

Le mécanisme du brassage électromagnétique est basé sur la création d'une force de Laplace dans les matériaux conducteurs en provoquant l'apparition d'une circulation forcée dans la partie liquide. En effet, si l'on considère un échantillon métallique entouré d'une bobine d'induction, la circulation d'un courant électrique  $j$  dans les spires d'induction crée un champ magnétique qui pénètre dans l'échantillon et engendre un courant induit (courant de Foucault)  $j_{ind}$  dont le sens est opposé à  $j$ . l'interaction entre le courant induit et le champ magnétique  $B$  qui est la somme des champs induits par  $j$  et  $j_{ind}$  crée la force de Laplace [34] :

$$F = j_{ind} \times B \quad (I.27)$$

Dans le cas particulier des systèmes à courant alternatif, le courant induit et le champ magnétique ne sont présents que dans une portion du domaine métallique d'épaisseur :

$$\xi = 50 \sqrt{\rho / f} \quad (\text{I.28})$$

Où  $\rho$  désigne la résistivité électrique du matériau en  $\mu\Omega\text{cm}$  et  $f$  la fréquence du courant. Le mouvement du liquide est alors créé par l'inhomogénéité de la force de Laplace le long de l'échantillon. Cette force varie selon le dispositif qui lui donne naissance (champ tournant, champ pulsant, champ glissant...).

*a) champ magnétique permanent*

Considérant tout d'abord le cas de l'action d'un champ magnétique permanent sur un liquide conducteur. Ce champ magnétique permanent peut être créé soit par une bobine alimentée par un courant continu soit par un aimant. Il peut être utilisé pour réduire la convection naturelle qui peut apparaître lors de la solidification d'alliage.

Laskar [35] ont montré l'existence à l'intérieur de la zone pâteuse d'un courant thermoélectrique  $j_{TE}$ , associé au champ magnétique permanent  $B$ , qui donne naissance à une force de Laplace d'origine thermoélectrique (apparition simultanée d'un courant électrique et d'un flux de chaleur en présence d'un gradient de température et d'un gradient de potentiel électrique) :

$$F_{TE} = j_{TE} \times B \quad (\text{I.29})$$

Cette force engendre un mouvement à l'intérieur de la zone pâteuse, qui reste localisé.

Les travaux de Lehmann et al [36] montrent que l'application d'un champ magnétique uniforme permet d'éviter la ségrégation en deux alliages Cu-Ag et Al – Cu en contrebalançant la convection naturelle à l'intérieur de la zone pâteuse. Un autre exemple d'effet sur la macro ségrégation est étudié par Tewari et al [37] dans le cas de l'alliage Pb-Sn 18% pds pour lequel la formation de « *Freckles* » peut être supprimée en limitant la convection naturelle.

Ces études montrent l'importance de l'orientation du champ par rapport à la direction de la croissance pour que l'effet de freinage soit effectif. De plus, cette technique est tributaire du

pouvoir thermoélectrique des composés de l'alliage et que les études citées ci-dessus ont été faites avec des alliages possédant une assez grande différence de pouvoir thermoélectrique.

*b) champ magnétique tournant*

Le brassage par champ tournant (*Rotating Magnetic Field RMF*) est le plus utilisé dans la métallurgie. Cette technique est basée sur le principe d'un moteur asynchrone. Le moteur est alimenté par un courant alternatif polyphasé. Le cas d'un moteur triphasé est le plus répandu car on utilise en général les trois phases du réseau avec une fréquence de fonctionnement du moteur de 50 Hz. Chaque phase est décalée de  $2\pi/3$  dans l'espace et dans le temps.

L'application d'un champ tournant dans le liquide impose un mouvement de rotation toroïdal. Cette rotation induit à son tour des forces de pression centripètes sur les parois du creuset qui impose un mouvement secondaire poloïdal (contenu dans des plans méridiens s'il demeure stable). Le sens (descendant près des parois et ascendant au centre de l'échantillon) est toujours celui indiqué sur la figure I.19.

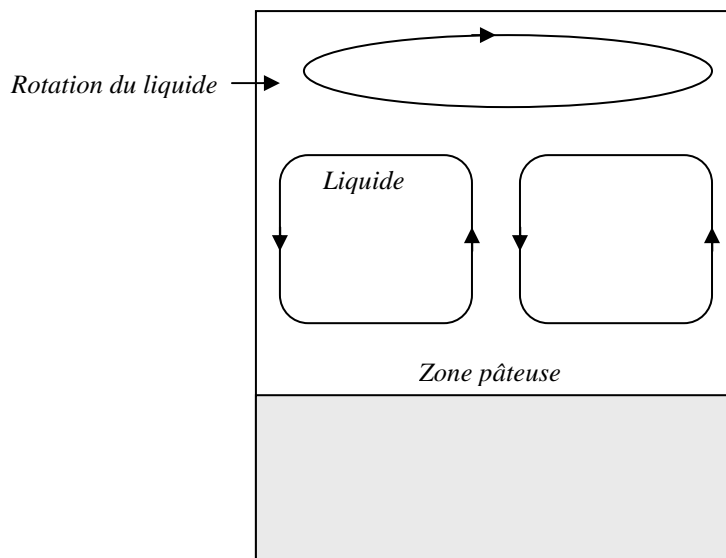


Figure I.19 : écoulement induit par un champ magnétique tournant

Dans la zone pâteuse, l'écoulement poloïdal va de la paroi latérale vers le centre du l'échantillon où il remonte dans le bain liquide en donnant naissance à l'intérieur de la zone pâteuse à des boucles de recirculation [38].

Des expériences de solidification dirigée de Weiß et al [39] et Willers et al [40], ont démontré l'efficacité du brassage avec un champ magnétique tournant. Les particules fluides pouvant atteindre des vitesses de  $0.5 \text{ m.s}^{-1}$  pour un champ de 25mT dans l'alliage Al-Si. Les boucles de recirculation déforment l'interface entre la zone pâteuse et le bain liquide créant une zone de dépression au centre qui donne naissance à une macro ségrégation radiale (présence d'un canal ségrégé de taille non négligeable dans le cas des alliages solutalement stables comme l'alliage Al-Ni).

Notre étude constitue une contribution à la la modélisation macroscopique des processus de solidification des mélanges à plusieurs constituants. Nous nous intéressons particulièrement à la zone solide-liquide (zone pâteuse ou dendritique) que l'on décrit par un milieu poreux à hétérogénéité évolutive. Dans ce but, nous présentons dans ce qui suit les notions de base sur les milieux poreux ainsi que les modèles d'écoulement et de transfert.

## **IV. MODELES MATHEMATIQUES REGISSANTS LE PROCESSUS DE SOLIDIFICATION VERTICALE**

### **IV.1. Modèle monophasique**

Pour développer un modèle monophasique d'un système d'équations bi phasique, il faut placer un certain nombre d'hypothèses et le rapport auxiliaire entre les deux phases doit être appelé. Les variables dans des modèles monophasiques adoptent habituellement une moyenne de propriétés. La spécification du rapport auxiliaire (lien intermédiaire entre les deux régions solide et liquide) et l'identification des variables dépendront du processus changement de phase en question.

Les hypothèses utilisées dans tous les modèles présentés ici conformément aux études antérieures de Beckermann et Viskanta [41] sont les suivantes: 1) L'écoulement est laminaire et newtonien. 2) Les propriétés physiques des deux phases sont homogènes et isotropes. 3) L'effet de petites perturbations dans les deux domaines (la dispersion des flux, le phénomène de surfusion) est négligé. 4) L'interface de solidification est en équilibre thermodynamique

( $T_{solide} = T_{liquide}$  et  $C_s = k_p C_l$ ). Ces hypothèses seront prolongées et des hypothèses additionnelles supplémentaires comme divers modèles sont développées.

a. La forme des équations de conservation

La forme générique des équations régissant le transfert de chaleur et de masse pour les modèles monophasiques est donnée dans la table I.1. Ces équations sont développées en termes d'enthalpie  $h$  définies comme :

$$h = \int_0^T c_s dT \tag{I.29}$$

Et la vitesse du système est :

$$\rho u = \rho_s g_s u_s + \rho_l g_l u_l \tag{I.30}$$

On note avec la définition d'enthalpie :

$$H_s = h, \quad H_l = h + \delta H \tag{I.31}$$

Où

$$\delta H = \int_0^T (c_l - c_s) dT + L \tag{I.32}$$

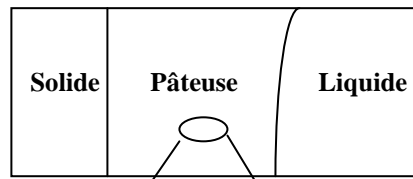
Et

$$\nabla T = \nabla h / c_s \tag{I.33}$$

Masse	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla(\rho u) = 0$
Quantité de mouvement	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla(\rho u u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla(\mu^+ \nabla u) + F_x$ $\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla(\rho u v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla(\mu^+ \nabla v) + F_y - \rho g$
Enthalpie	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla(\rho u h) = \nabla \left( \frac{k^+}{C_s} \nabla h \right) + S_h$
Soluté	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C^+) + \nabla(\rho u C^+) = \nabla(D^+ \nabla C^+) + S_C$

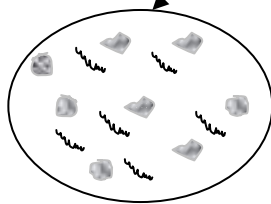
Table I.1 : Le modèle général

**Problème**

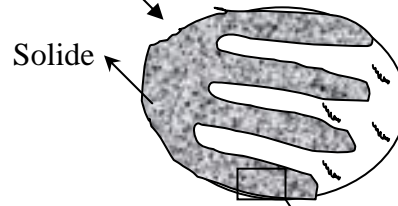


Le domaine du problème

**L'échelle macroscopique**

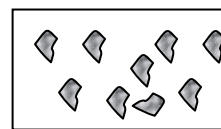


(a) Schéma du fluide pâteux ( $u_s = u_l$ )

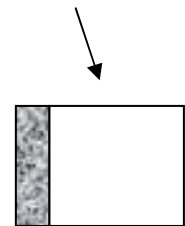


(b) Schéma de structure dendritique colonnaire ( $u_s = 0$ )

**L'échelle microscopique**

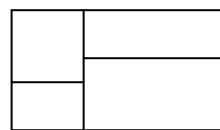


(c) Représentation de microstructure dispersée  $\bar{C} = f_s C_s + f_l C_l$

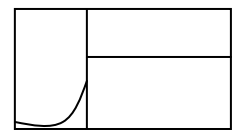


(d) Représentation de microstructure distincte

La nature de la distribution solutale



d(i) Diffusion infinie en liquide et solide (Lever)  $\bar{C} = f_s C_s + f_l C_l$



d(ii) Pas de diffusion en solide (Scheil)  $\bar{C} = \int C_s + f_l C_l$

Figure I.20: Le domaine du problème monophasique

La définition des paramètres génériques et des termes de sources  $S_h$ ,  $S_c$ ,  $F_x$  et  $F_y$  dans la table I.1 dépendront du modèle en question et de l'ensembles des hypothèses prises en considération. Ces différentes hypothèses et la forme possible de ces paramètres, variables et sources, sont examinées par la suite.

### B. L'échelle d'étude

Il est important d'identifier les échelles des différents phénomènes qui se présente en modélisation numérique des systèmes de solidification. Le développement des équations de transport ayant lieu à l'échelle macroscopique avec un nombre de volumes de contrôles afin de résoudre les régions des deux phases. Dans des applications typiques, ces volumes de contrôles sont de l'ordre de  $10^{-2}$  cm. Cependant, dans plusieurs systèmes, la morphologie de l'interface de solidification est très fine, elle est de l'ordre de  $10 - 100 \mu\text{m}$ . Si tous les phénomènes de solidification sont pris en considération, l'effet d'interface de solidification ne peut pas être négligé. Chaque analyse macroscopique a besoin de capturer l'influence des phénomènes qui se présentent à l'échelle microscopique [42-43].

### C. Deux cas limites

En dérivant les modèles monophasiques, à l'échelle macroscopique, deux cas limites peuvent être identifiés :

*Cas 1* : Dans lequel le solide est totalement dispersé dans la phase liquide et les vitesses du solide et le liquide sont égaux (Figure I.20(a)).

*Cas 2* : Dans lequel la matrice solide est distincte à celle du liquide où ( $u_s=0$ ) (Figure I.20 (b)). D'après cela, on distingue les modèles suivants :

#### C.1. Le modèle fluide pâteux (modèle A)

Le modèle du fluide pâteux est adéquat aux matériaux amorphes (cires et verres). Dans ce modèle, on assume que le solide est entièrement dispersé dans le liquide et qu'ils se déplacent avec la même vitesse. La nature du fluide pâteux est illustrée dans la Figure I.15 (a).

$$u = u_s = u_l \quad (\text{I.34})$$

Employant l'hypothèse de vitesses, l'équation (I.34), l'enthalpie  $h$  et le champ de vitesse  $u$ , les équations des deux phases peuvent être combinés pour éliminer les termes de transfert d'interface. Les paramètres du modèle et les termes de source appropriés qui résultent de cette étape sont récapitulés dans la table I.2 (a).

Dans ce cas, il faut retenir que :

- Il est commode d'assumer le coefficient de diffusion efficace du modèle monophasique développé comme étant le coefficient moyen des coefficients diffusifs des deux phases, solide et liquide.

$$\mu_{eff} = \mu_s F_s + \mu_l F_l \quad (I.35)$$

Avec  $F_s$  et  $F_l$  sont les fractions solide et liquide respectivement.

- Dans la région du fluide pâteux, toutes les parties du solide sont en équilibre avec le fluide environnant. Dans ce cas, l'interface de solidification est distribuée dans toute la région pâteuse.

- La concentration du soluté dans les phases liquide et solide est exprimée par

$$C_s = k_p C_l \quad (I.36)$$

- L'équation du soluté peut être écrite en termes d'un mélange de concentration définie par :

$$C_{mix} = f_l C_l + f_s C_s \quad (I.37)$$

La condition centrale dans un modèle contenant une zone pâteuse est que la vitesse du système s'approche de zéro pendant que la fraction du liquide s'approche de zéro et qu'il n'y a aucune vitesse dans la région solide.

### C.2. Dendrites colonnaires

Ce modèle s'accorde avec la zone dendritique colonnaire des alliages métallurgiques. Une illustration descriptive de la nature de la zone dendritique colonnaires est montrée dans la Figure I.15 (b). Dans ce modèle, la phase solide est assumée distincte de celle du liquide et se déplace avec une vitesse prescrite (nulle dans un bâti statique et non nulle dans la coulée continue). Notant que pour le système de bâti statique ( $u_s = 0$ ), la vitesse du système est donnée par  $\rho u = \rho_l g_l u_l$ . En revanche dans la coulée continue, on retrouve le (modèle A).

L'hypothèse de la structure dendritique est faite à l'échelle macroscopique. A l'échelle microscopique, la manière dont la microstructure est représentée a un effet important sur le modèle qui résulte (voir la figure I.20 (b)). Deux versions de modèles dendrites colonnaires seront considérées :

- Dans la première version, la microstructure sera modélisée comme solide dispersé dans la matrice liquide (figure I.20 (c)) (Modèle B).

- Dans la deuxième version, la microstructure sera modélisée comme la matrice solide, distincte de celle du liquide (figure I.20 (d)) (Modèle C).

Les paramètres génériques et les termes de sources des deux modèles sont donnés dans la table I.2.

Paramètre	(a)	(b)	(c)
Vitesse du système	$u = u_l = u_s$	$u = f_l u_l$	$u = f_l u_l$
Concentration	$C^+ = C_s$	$C^+ = C_s$	$C^+ = C_l$
Viscosité	$\mu^+ = \mu_{eff} = \mu_s g_s + \mu_l g_l$	$\mu^+ = \mu_l \rho / \rho_l$	$\mu^+ = \mu_l \rho / \rho_l$
Diffusivité solutale	$D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / k$	$D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / k$	$D^+ = \rho_l g_l D_l$
Diffusivité thermique	$k^+ = g_s k_s + g_l k_l$	$k^+ = g_s k_s + g_l k_l$	$k^+ = g_s k_s + g_l k_l$
Quantité de mouvement	$F_x = 0$ $F_y = 0$	$F_x = -\left\{k_0(1-g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\right\}u$ $F_y = -\left\{k_0(1-g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\right\}v$	$F_x = -\left\{k_0(1-g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\right\}u$ $F_y = -\left\{k_0(1-g_l)^2 / g_l^3 (\rho / \rho_l)\right\}v$
Enthalpie	$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_l \delta H) - \nabla(\rho f_l u \delta H)$	$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_l \delta H) - \nabla(\rho u \delta H)$	$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_l \delta H) - \nabla(\rho u \delta H)$
Soluté	$S_c = -\frac{\partial}{\partial t}[(1/k-1)\rho f_l C_s] - \nabla[(1/k-1)\rho f_l u C_s]$	$S_c = -\frac{\partial}{\partial t}[(1/k-1)\rho f_l C_s] - \nabla[(1/k-1)\rho u C_s]$	$S_c = \frac{\partial}{\partial t}(\rho(1-f_l)C_l) - \rho k C_l \frac{\partial(\rho f_s)}{\partial t}$
Accouplement de la Température - Soluté	$T = \frac{T_L - (1-f_l)(1-k)T_m}{[1 - (1-f_l)(1-k)]}$ $T_L = T_m - (T_m - T_c)C_{mix} / C_c$	$T = \frac{T_L - (1-f_l)(1-k)T_m}{[1 - (1-f_l)(1-k)]}$ $T_L = T_m - (T_m - T_c)C_{mix} / C_c$	$T_L = T_m - (T_m - T_c)C_l / C_c$

Table I.2 : (a) Modèle A, modèle du fluide pâteux ;(b) Modèle B, dendrites colonnaires avec microstructure dispersée; (c) Modèle C, dendrites colonnaires avec microstructure dispersée

## C.2.1. Dendrites colonnaires avec microstructure dispersée (modèle B)

En dérivant les équations de quantité de mouvement du modèle étudié, il est nécessaire de combiner directement les équations des deux phases. Cependant, si une telle approche est employée, le soin doit être pris pour éviter n'importe quelle contradiction dans la définition de la pression qui est considérée la même dans chaque phase. Dans ce modèle, ce problème potentiel est évité par l'adoption de l'approche proposée par Bennon et Inceper [44].

afin de décrire la vitesse du solide,  $u_s$ , Une force externe  $F(F_x, F_y)$  est incluse pour assurer que les équations de mouvement de la phase solide soient bien définies de sorte qu'ils puissent être combinés avec les équations de la phase liquide. Une expression appropriée de F peut être trouvée en faisant appel à la nature de l'écoulement dans la région pâteuse. Dans le cas d'une structure dendritique colonnaire, cette force est régie par la loi de Darcy [45]. Les formes de  $F_x$  et  $F_y$ , données dans la table I.2 (b), sont dérivées en appliquant l'équation de Carman - Kozeny pour l'écoulement dans les milieux poreux [46].

En employant la définition donnée de F et en appliquant les hypothèses additionnelles suivantes :

- i. Un solide exempt d'effort interne.
- ii. Petits efforts visqueux résultant des gradients de densité locaux.
- iii. Densité constante dans chaque phase.

Le modèle monophasique résultant est donnée dans la table I.2 (b). Ces équations de mouvement sont identiques à ceux proposées par Bennon et Inceper [47] avec les conditions additionnelles d'une vitesse de solide nulle et d'une densité constante. Dans ce cas, les termes source ( $F_x$  et  $F_y$ ) deviennent nuls dans les régions liquides.

Dans les modèles dendritiques colonnaires monophasiques, l'équation du soluté est dérivée sous l'hypothèse de l'équilibre macroscopique du soluté sur un volume de contrôle arbitraire fixe dans la zone pâteuse. A partir de là, l'équation suivante peut être dérivée [48] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C_{mix}) + \nabla(\rho u C_l) = \nabla(\rho_s g_s D_s \nabla C_s + \rho_l g_l D_l \nabla C_l) \quad (I.38)$$

Où  $C_{mix}$  est une valeur représentative obtenue dans l'espace faisant la moyenne sur un volume défini à l'échelle microscopique (voir Fig.I.2 (b)). Ce volume microscopique est représenté par :

$$V = V_s (\text{volume de la fraction du solide}) + V_l (\text{volume de la fraction du liquide})$$

La forme générale de  $C_{mix}$  peut être écrite comme :

$$C_{mix} = \frac{\int \rho_l C_l dV_l + \int \rho_s C_s dV_s}{\rho V} \quad (\text{I.39})$$

La nature de la microstructure assumée et les mécanismes de redistribution du soluté dans un volume microscopique détermineront la forme exacte de  $C_{mix}$ . Dans le cas d'une microstructure dispersée (Fig.I.15 (c)), on assume que la matrice solide est dispersée dans tout le liquide et  $C_{mix} = f_l C_l + f_s C_s$  avec  $C_s = k C_l$  dans toute la région pâteuse. D'après la conservation du soluté, l'équation (I.38) peut être écrite sous la forme monophasique avec  $C^+$ ,  $D_{eff}$  et  $Sc$  comme défini dans la table I.2 (b).

### C.3. Dendrites colonnaires avec microstructure distincte (Modèle C)

À l'échelle macroscopique, ce modèle est identique au modèle B (table I.2 (b)), la région pâteuse se compose d'une rangée de dendrites colonnaires comme représenté dans la Figure I.15 (b). Cependant, la microstructure est représentée comme une région solide et liquide distincte (Figure I.15 (d)). Ceci peut être vu comme extrémité opposée à une microstructure dispersée (Figure I.15(c)).

Les définitions appropriées à ce modèle sont données dans la table I.2 (c) où les équations de transport de masse, de mouvement et d'enthalpie sont identiques au modèle précédent (modèle B (Table 2(b))). Les différences surgissent dans l'équation de transport du soluté où la façon avec laquelle  $C_{mix}$  (équation (I.39)) est calculée. La forme de  $C_{mix}$  dans le modèle courant dépendra des mécanismes de transport du soluté local assumés à l'échelle microscopique.

Dans le contexte métallurgique, il y a deux situations alternatives qui peuvent être considérées :

1) La diffusion du soluté à l'échelle microscopique, est supposé infini dans le solide et le liquide (la règle de lever s'applique) ayant pour résultat des profils uniformes de concentration (Figure I.20 (d) (i)). Ceci signifie que toutes les parties du solide sont en équilibre avec toutes les parties du liquide et les conditions sont essentiellement identiques à ceux trouvées dans une microstructure dispersée Modèle B (Table 2(b)).

2) La diffusion dans le liquide est infinie et la diffusion dans le solide est nul. C'est l'hypothèse sur laquelle l'équation de Scheil est basée. L'équation de Scheil est valide dans beaucoup de situations métallurgiques de solidification. Dans ce cas-ci la concentration du soluté dans le liquide sera uniforme, en revanche la concentration du soluté dans le solide aura un profil (Figure.20 (d)(iii)). L'approche de **Scheil** est explorée ci-dessous.

On note que  $V_s = g_s V$ , l'équation (I.39) prend la forme

$$\rho C_{mix} = \rho f_l C_l + \int_0^{g_s} C_s d\alpha \quad (\text{I.40})$$

Où  $\alpha$  est une variable pour effectuer l'intégration.

Sous l'hypothèse de non surfusion locale et puisqu'il n'y a aucun transport du soluté dans le solide, la concentration à un point quelconque du solide est égale à la concentration lorsque le solide est formé à la première fois. L'intégrale dans le second terme à droite de l'équation (I.40) est donc indépendant du temps. En outre, lorsque  $\alpha = g_s(t)$ , la position du front de solidification est liée à la relation  $C_s = C_s^* = k C_l$ . L'emploi de ces observations et l'application de la règle de Leibniz mènent à la relation suivante:

$$\frac{\partial(\rho C_{mix})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_l) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_l (f_l - 1)) + k C_l \frac{\partial}{\partial t}(\rho f_s) \quad (\text{I.41})$$

La substitution de cette expression dans l'équation de conservation du soluté (équation (I.38)) avec l'hypothèse de la diffusion nulle dans le solide mène à des termes appropriés pour  $D^+$  et  $S_c$  données dans la table 2(c).

#### *D) Couplage*

Avant que les divers modèles développés ci-dessus puissent être numériquement résolus, un rapport auxiliaire doit être défini pour coupler le champ d'enthalpie (la température) et le champ solutal. Les relations de couplage de la température et le soluté pour chacun des modèles sont données dans la table 2(a)-(c). La forme de ces modèles dépend de la nature des hypothèses utilisées.

Dans le cas d'un fluide pâteux (modèle A), une microstructure dispersée (modèle B) et une microstructure distincte avec l'équilibre thermodynamique local (équivalent au modèle B), le couplage est réalisé par le diagramme de changement de phase d'équilibre pour les équations des systèmes binaires (Figure I.16). La supposition des lignes droites de liquidus et de solidus dans le diagramme de phase, les relations données dans la table 2(a) et (b) peuvent être obtenus par une géométrie simple.

Dans le cas d'une microstructure distincte (modèle C), l'équilibre n'existe pas au niveau des volumes microscopiques et le traitement du non équilibre de couplage est donc exigé. Donc on suppose que lors du changement de phase, la température d'un volume microscopique est à la température du liquide,  $T_L$ , correspondante à la concentration du liquide,  $C_L$ , la température à un point quelconque dans la région pâteuse peut être liée à la concentration du liquide par l'intermédiaire de la ligne de liquidus du diagramme de changement de phase (Figure I.16). C'est la base pour les relations de couplage données dans la table 2(c).

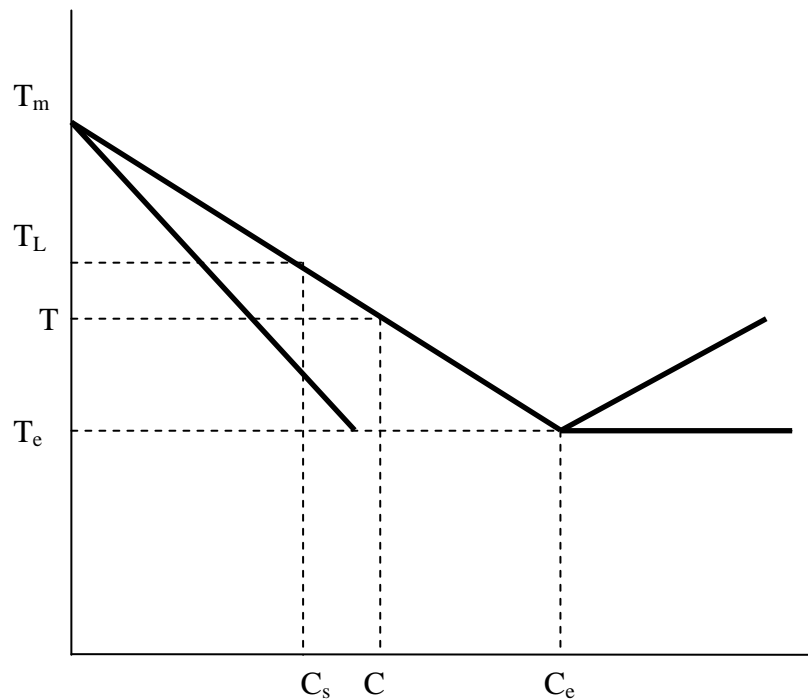


Figure I.21 : Le digramme de changement de phase

#### IV.2. Modèle biphasique

Les bilans volumiques de température  $T_{S,L}$  et de concentration  $C_{S,L}$  s'obtiennent en écrivant les équations de conservation de l'énergie et de la masse de soluté dans les deux phases (solide et liquide). Pour un alliage binaire dilué, des expressions simplifiées peuvent être écrites dans le cadre du « *modèle minimale* », qui consiste à négliger la diffusion de soluté dans le solide et à considérer la diffusion thermique infiniment rapide par rapport la diffusion solutale dans les deux phases. Cette dernière hypothèse est vérifiée pour la majorité des matériaux dans la mesure où le coefficient de diffusion solutale ( $D_L \sim 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ ) est très inférieur au coefficient de diffusion thermique qui varie entre  $10^{-1}$  (pour les métaux) et  $10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$  (pour les alliages organiques).

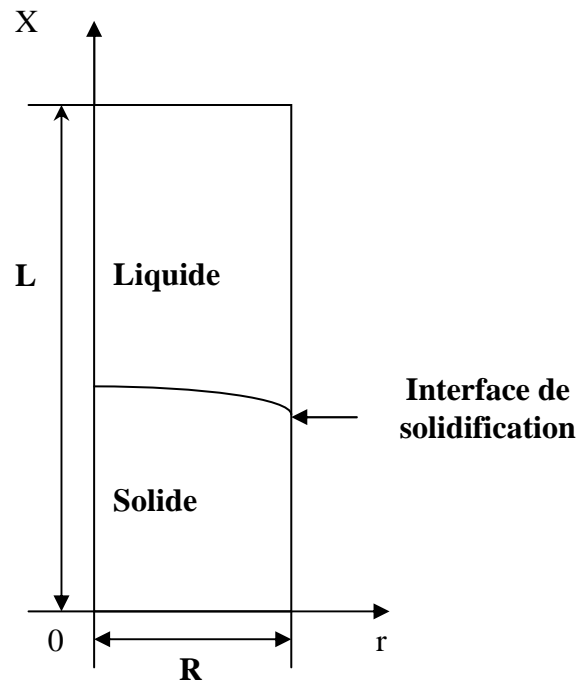


Figure I.22 : Le domaine du problème biphasique

### *La forme générique*

Les équations de quantité de mouvement, de masse et d'énergie qui régissent les phénomènes de solidification verticale pour un modèle biphasique sont développées, séparément, pour chaque phase (dans notre cas, la phase solide et liquide). Ces équations sont couplées par les bilans interfaciaux (continuité de la température, conservation de la chaleur et la conservation du soluté).

➤ *Phase liquide*

- Equation de conservation de la masse :

$$\rho \nabla \vec{u} = 0 \quad (\text{I.42})$$

- Equation de Navier - Stokes

$$\rho_0 \left[ \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \right] = -\nabla P + \mu \nabla^2 \vec{u} - \rho_0 \bar{g} \left[ \beta_T (T_L - T_0) - \beta_C (C_L - C_0) \right] \quad (\text{I.43})$$

- Equation de conservation de la chaleur :

$$\rho C_{pL} \left[ \frac{\partial T_L}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) T_L \right] = k_L \nabla^2 T_L \quad (\text{I.44})$$

- Equation de conservation du soluté :

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \nabla) C_L = D_L \nabla^2 C_L \quad (\text{I.45})$$

➤ *Phase solide*

- Champ de vitesse :

$$\vec{u} = 0 \quad (\text{I.46})$$

- Equation de conduction de la chaleur :

$$\rho C_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} = k_S \nabla^2 T_S \quad (\text{I.47})$$

- Equation de diffusion du soluté :

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = D_s \nabla^2 C_s \quad (\text{I.48})$$

a) *Traitement des interfaces*

Dans les équations qui suivent, l'indice  $\phi$  signifie que la valeur de la grandeur considérée est prise au niveau de l'interface de solidification. On néglige les effets associés à la contraction (ou la dilatation) volumique qui accompagnent le changement de phase.

$$\underline{\text{Continuité de la température}} \quad [T_S]_{\phi} = [T_L]_{\phi} = T_{\phi} \quad (\text{I.49})$$

$$\underline{\text{Conservation de la chaleur}} \quad [k_S \nabla T_S - k_L \nabla T_L]_{\phi} \cdot n = LV \cdot n \quad (\text{I.50})$$

$$\underline{\text{Conservation du soluté}} \quad D_L [\nabla C]_{\phi} \cdot n = [C_S - C_L]_{\phi} V \cdot n \quad (\text{I.51})$$

Dans ces équations  $k_s$  et  $k_L$  désignent les conductibilités thermiques dans le solide et le liquide.  $V$  la vitesse de croissance.  $n$  la normale en un point de l'interface.  $L$  la chaleur latente de fusion de l'alliage par unité de volume et  $D_L$  le coefficient de diffusion solutale.

## V. OBJECTIF DE CE TRAVAIL

A partir de la revue bibliographique relative aux différents types de croissance, aux modèles de zones pâteuses et aux différents modèles mathématiques représentant les problèmes de changement de phase, nous présentons dans ce qui suit le travail entrepris constituant notre contribution à l'étude de ces phénomènes dans leurs différents aspects.

Ce travail se propose d'étudier numériquement la convection thermosolutale au cours de changement de phase des alliages concentrés semi-conducteurs sous l'effet magnétique. Le cadre général de cette étude est l'influence de l'écoulement dans le bain et l'effet du champ magnétique sur les transferts de chaleur et de masse lors de phénomène de solidification verticale de type Bridgman.

Nous nous intéressons strictement ici à l'étude macroscopique sans prendre en compte le problème de la microstructure de la zone pâteuse qui est assimilée dans notre cas à un milieu poreux pendant la croissance.

Nous envisageons d'abord de définir les limites du problème étudié dans une cavité axisymétrique cylindrique de type Bridgman en configuration fluide pur au début de la

solidification ce qui devait conduire à une configuration solide pur à la fin du processus avec le développement de la zone pâteuse en fonction du temps.

En fin, l'insertion de l'effet magnétique et la discussion des résultats obtenus.

---

---

## **MODELISATION MATHEMATIQUE**

---

---

### **I. INTRODUCTION**

Dans les conditions usuelles d'élaboration, la phase liquide est presque toujours animée de mouvement macroscopiques dus à la convection forcée ou naturelle et on ne peut pas se limiter au cas diffusif. La convection naturelle peut avoir plusieurs origines : (i) la différence de masses volumiques entre les deux phases qui induit, en général, un retrait lors du changement de phase, (ii) les gradients de température ou de concentration dans le bain fondu.

Les phénomènes de convection thermosolutale et de changement de phase au cours de la solidification verticale en instationnaire sont régis par les équations de quantité de mouvement, d'énergie et de conservation de soluté. Au cours de la croissance cristalline, l'effet magnétohydrodynamique sur le processus physique décrit l'interaction entre les champs ; magnétique et de vitesse.

Ce chapitre est consacré à la mise en équation du problème physique considéré dans un espace cylindrique. On commencera par l'écriture des équations sous leurs formes générales, puis on passera en revue les différents traitements de ces équations et des conditions aux limites pour arriver à la forme adimensionnelle qui a été retenue dans ce travail. Enfin, nous définirons les ségrégations chimiques radiales et la vitesse de croissance quantifiant respectivement le transport de soluté et la réduction de la convection dans le bain.

## II. MODELE PHYSIQUE

Nous considérons une cavité cylindrique disposée verticalement et fermée, de hauteur  $H$  et de rayon  $R$  contenant un alliage métallique concentré. Le solvant est considéré comme étant un fluide incompressible de viscosité cinématique  $\nu$  et de diffusivité thermique  $\alpha$ . Le soluté est défini par le coefficient de partage  $k_p$  et la diffusivité solutale  $D$ .

Les parois horizontales de cette cavité sont supposées adiabatiques et imperméables à tout transfert de masse (parois passives) tandis que la paroi verticale est imposée à un profil de température.

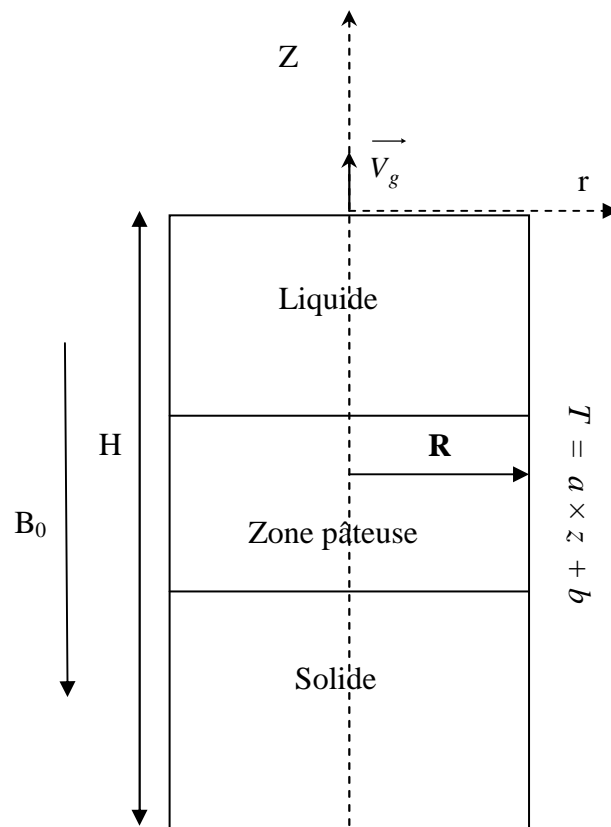


Figure II.1 : Représentation du modèle physique

### III- FORMULATION MATHÉMATIQUE

#### III.1-Hypothèses simplificatrices

Un ensemble d'hypothèses est retenu dans cette étude, afin de simplifier la modélisation numérique et de s'approcher à la réalité du problème. Ces hypothèses sont issues des propriétés physiques de l'écoulement dans le bain fondu. Ces simplifications dépendent en grande partie du mode de changement de phase traité. Les principales hypothèses prises en compte sont les suivantes :

1. On considère que le bain fondu est un fluide Newtonien.
2. On suppose que les propriétés physiques du fluide, autres que la densité ne varie pas de façon significative avec la température et la concentration. Elles sont prises constantes et évaluées à une température et à une concentration moyenne de référence.
3. Vu la géométrie du problème, l'écoulement est bidimensionnel et axisymétrique, c'est à dire que toutes les variables sont indépendantes de l'angle azimutal  $\theta$  ( $\partial/\partial\theta = 0$ ).
4. L'écoulement de convection naturelle est provoqué simultanément par les forces de poussée thermique et solutale tout en demeurant laminaire.
5. La zone pâteuse est considérée comme étant un milieu poreux indéformable, homogène, isotrope, saturé par une seule phase fluide. Les interfaces fluide-poreux sont perméables au fluide et diathermes.
6. les pores n'ont pas une forme bien précise.
7. La vitesse de tirage est suffisamment faible pour que le système soit constamment en équilibre thermodynamique. Les phénomènes atomiques sont supposés avoir des temps caractéristiques très inférieurs à ceux de déplacement du creuset. La surfusion cinétique est alors négligeable.
8. La diffusion du soluté dans le solide est négligée Sheil [15].
9. Le profil de température imposé est linéaire. Il varie de  $T_h$  à  $T_c$
10. Le champ magnétique imposé durant la solidification est permanent et axial.

Cette hypothèse de Boussinesq généralisée est valable pour les faibles gradients thermiques et solutaux, avec un écart de température maximal qui reste inférieur à 30 [°C]. Nous supposons, en outre, que l'effet du gradient de pression sur la masse volumique est négligeable.

L'expression de la densité en fonction de la température et la concentration est linéaire, dans le cas où le fluide ne présenterait pas un maximum de densité [49]. Dans ces conditions, la masse volumique s'écrit :

$$\rho(T, C) = \rho_0 [1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_C (C - C_0)] \quad (\text{II. 1})$$

Où,  $T_0$  et  $C_0$  sont respectivement la température et la concentration moyennes de références et  $\beta_T$ ,  $\beta_C$  sont respectivement les coefficients de dilatation thermique et d'expansion massique de la densité à pression constante.

### III.2. Mise en équation du problème

Les variables primitives : vitesse, pression, température et concentration sont modélées en coordonnées cylindriques comme suit :

- *Equation de continuité*

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(ru)}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.2})$$

- *Equation de mouvement dans la direction radiale*

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{u}{r^2} \right) - \frac{\varepsilon u}{I} \quad (\text{II.3})$$

Le terme (I) présente l'écoulement dans la zone pâteuse. Dans les problèmes de changement de phase des alliages métalliques, la zone pâteuse est assimilée à un milieu poreux de porosité  $\zeta$  d'après V.R.Voller et C.Prakash [46] et J.C. Heinrich et al [50]. Selon la loi de Darcy,  $\varepsilon$  est dérivée des équations de Carman-koseny [51].

$$\varepsilon = -C(1-\zeta)^2 / (\zeta^3 + q) \quad (\text{II.4})$$

avec

$$\zeta = 1 - F_S \quad (\text{II.5})$$

où

$F_S$  : est la fraction solide.

La constante C dépend de la morphologie de la zone pâteuse. Selon V.R.Voller et C.Prakash [46]. Elle est égale à  $1.6 \times 10^3$ . Dans la même référence, la constante q est introduit pour éviter la division par zéro. Elle est égale à 0.001.

- **Equation de mouvement dans la direction axiale**

$$\rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right) + \rho g - \underbrace{\frac{\delta B_0^2 R^2}{\mu}}_I v - \varepsilon v \quad (\text{II.6})$$

Où I présente l'effet de la force électromagnétique. Avec  $B_0$  est l'induction magnétique en [Tesla] et  $\delta$  est la conductivité électrique en [Am/V].

- **Equation d'énergie**

$$\rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right) - \underbrace{\left[ \frac{\partial \rho \Delta H}{\partial t} \right]}_{II} \quad (\text{II.7})$$

Où (II) exprime la quantité de chaleur libérée lors du changement de phase avec :

$$\Delta h = f_l \Delta H \quad (\text{II.8})$$

où

$\Delta H$  : la chaleur latente de solidification.

$f_l$  : Fraction liquid

- *L'équation de conservation du soluté*

Selon la modélisation mathématique des problèmes de solidification pour les modèles mono domaines d'après Timchenko et al [52], le transport de soluté est gouverné par l'équation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial r} + v \frac{\partial C}{\partial z} = D \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] \quad (\text{II.9})$$

où:

$$C = f_s C_s + f_l C_l \quad (\text{II.10})$$

où:

$$f_s = 1 - f_l \quad (\text{II.11})$$

$f_s$  est la fraction solide.

$C_l$  : La concentration du soluté dans la partie liquide

$C_s$  : La concentration du soluté dans la partie solide

Comme la diffusion dans le solide est négligée (selon l'hypothèse de Scheil), donc  $C_s$  ne dépend pas du temps et  $(\partial C_s / \partial t = 0)$ . En outre, à l'interface de solidification, le partage du soluté est exprimé par  $(C_s = k_p C_l)$  avec  $k_p$  comme coefficient de ségrégation. Donc, l'équation (II.9) peut être partiellement dérivée sous la forme suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\left[ (1 - f_s) \frac{\partial C_l}{\partial t} \right]}_I + \underbrace{\left( \frac{\partial f_s}{\partial t} (k_p - 1) C_l \right)}_{II} \quad (\text{II.12})$$

Le premier terme (I) peut être exprimé comme étant la variation du soluté dans la partie liquide. Le second (II) définit le rejet de soluté dans la zone pâteuse dont la vitesse de déplacement  $\vec{V} = \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} \right) \Delta z$ , voir Timchenko et al [52], avec  $\Delta z$  est la taille du volume de contrôle dans la direction de solidification.

En substituant la variation de la concentration totale exprimée par l'équation (II.12) dans l'équation (II.9), on obtient :

$$(1 - f_s) \frac{\partial C_l}{\partial t} + u \frac{\partial C_l}{\partial r} + v \frac{\partial C_l}{\partial z} = D \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_l}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial C_l}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial f_s}{\partial t} (k_p - 1) C_l \quad (\text{II.13})$$

L'équation décrivant la distribution du soluté au cours d'un mélange complet extrême peut être obtenue en effectuant un bilan de masse à l'interface de solidification. Le soluté rejeté à l'interface peut être donné par :

$$C_s = k_p C_0 (1 - f_s)^{k_p - 1} \quad (\text{II.14})$$

Où la concentration du soluté dans le solide, coefficient de ségrégation, la concentration initiale du soluté et la fraction solide sont respectivement exprimés par  $C_s$ ,  $k_p$ ,  $C_0$ ,  $f_s$ . L'équation (II.14) est connue comme étant l'équation de Scheil-Gulliver pour un mélange complet.

### III.2. Conditions aux limites

Les conditions aux limites seront de plusieurs types:

#### a) Conditions dynamiques

- sur les deux couronnes horizontales (supérieure et inférieure) la condition d'adhérence impose des vitesses nulles, on obtient alors:

$$u = v = 0 \quad (\text{II.15})$$

- À l'axe du cylindre qui est considéré comme un axe de symétrie

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{\partial v}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.16})$$

#### b) Conditions thermiques

- Sur les deux couronnes horizontales (supérieure et inférieure) la condition d'adhérence impose des vitesses nulles, on obtient alors :

$$z = 0 \text{ ou } H \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.17})$$

- A l'axe du cylindre qui est considéré comme un axe de symétrie :

$$r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.18})$$

- La surface latérale est exposée à un profil de température linéaire :

$$r = R \quad T(z) = - \frac{(T_h - T_c)}{L_g} \times z + T_h \quad (\text{II.21})$$

Avec  $L_g$  est la longueur de la zone du profil de température.

**c) Conditions solutales**

- Pas de fuite de matière le long des parois verticales du creuset (flux radial nul) :

$$\frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad (\text{II.20})$$

- Sur la surface supérieure du liquide, on suppose qu'il n'y a aucune évaporation (matériau non volatil) et le flux de matière est nul :

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.21})$$

**d) Conditions initiales**

À l'état initial, le fluide est au repos à la zone chaude et à une concentration uniforme  $C_0$ . Les équations qui traduisent cette condition sont les suivantes :

$$\text{À } t = 0, \quad u = v = 0, \quad C = C_0, \quad T = T_h \quad (\text{II.24})$$

**III.3. Le calcul de la fraction de solidification**

Lors de la solidification métallurgique d'un alliage métallique, la fonction  $f_s(T)$  dépend de la nature de la distribution du soluté et au diagramme d'équilibre de changement de phase. Dans le présent travail, une formule linéaire simple pour la fraction de solidification locale  $f_s(T)$  est donnée par:

$$f_s(T) = \begin{cases} 0 & T \geq T_L \\ \frac{T_L - T}{T_L - T_s} & T_L > T \geq T_s \\ 1 & T < T_s \end{cases} \quad (\text{II.23})$$

où  $T_L$  est la température du liquidus à laquelle la formation du solide débute et  $T_s$  est la température du solidus à laquelle la solidification complète est atteinte.

## VI. VARIABLES REDUITES ET GROUPEMENTS ADIMENSIONNELS

### VI.1. Les grandeurs de référence

Pour adimensionner le système d'équations régissant le changement de phase au cours du temps, nous adoptons la largeur de la cavité comme longueur de référence. Cette grandeur de référence définit le rayon hydraulique de l'espace cylindrique qui affecte directement les forces motrices donnant naissance à l'écoulement convectif [53]. Ainsi, les références utilisées dans l'adimensionnement sont comme suit :

- $R$ : rayon de la cavité
- $\nu / R$  : Vitesse de référence définie en fonction de la viscosité cinématique  $\nu$ .
- $\Delta T = T_h - T_c$  : Ecart de température de référence entre les zones chaude et froide.
- $C_0$  : Concentration de référence

En fonction des choix précédents, la grandeur de référence associée à la pression est :

- $\rho \nu^2 / R^2$  : Pression de référence.

On en déduit la forme adimensionnelle des variables de notre problème :

$$t^* = \nu t / R^2 \quad r^* = r / R \quad z^* = z / R \quad u^* = R u / \nu$$

$$V^* = R V / \nu \quad p^* = R^2 p / \rho \nu^2 \quad T^* = (T - T_c) / (T_h - T_c) \quad C^* = C / C_0$$

En termes de paramètres adimensionnels, le système d'équations global à résoudre est le suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{1}{r^*} \frac{\partial(r^* u^*)}{\partial r^*} + \frac{\partial v^*}{\partial z^*} = 0 \\
 \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial u^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} = -\frac{\partial p^*}{\partial r^*} + \left( \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^* \frac{\partial u^*}{\partial r^*} \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left( \frac{\partial u^*}{\partial z^*} \right) - \frac{u^*}{r^{*2}} \right) - \epsilon u^* \\
 \left( \frac{\partial v^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial v^*}{\partial z^*} \right) = -\frac{\partial p^*}{\partial z^*} + \left( \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^* \frac{\partial v^*}{\partial r^*} \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left( \frac{\partial v^*}{\partial z^*} \right) \right) - \epsilon v^* + \\
 GR_1(-T^* - 1) + N(C^* - 1) - GR_2 v^* \\
 \left( \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial T^*}{\partial r^*} + v^* \frac{\partial T^*}{\partial z^*} \right) = GR_3 \left( \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^* \frac{\partial T^*}{\partial r^*} \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left( \frac{\partial T^*}{\partial z^*} \right) \right) + GR_4 \left[ \frac{\partial f_s}{\partial t^*} \right] \\
 \left( (1 - f_s) \frac{\partial C_l^*}{\partial t^*} + u \frac{\partial C_l^*}{\partial r^*} + v \frac{\partial C_l^*}{\partial z^*} \right) = GR_5 \left[ \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^* \frac{\partial C_l^*}{\partial r^*} \right) + \frac{\partial}{\partial z^*} \left( \frac{\partial C_l^*}{\partial z^*} \right) \right] + (k_p - 1) C_l^* \frac{\partial(f_s)}{\partial t^*}
 \end{array} \right. \tag{II.26}$$

Les différents groupements adimensionnels sont définis par :

$$GR_1 = (g \beta_T \Delta T R^3) / (\nu \alpha), \quad GR_2 = B_0^2 R^2 \delta / \rho \nu, \quad GR_3 = \mu C_p / \lambda, \quad GR_4 = \Delta H / C_p \Delta T, \\
 GR_5 = D / \nu$$

Les expressions de  $GR_1$ ,  $GR_2$ ,  $GR_3$ ,  $GR_4$  et  $GR_5$  pour un fluide newtonien sont récapitulées dans le tableau suivant :

Groupement	Symbole
$GR_1$	$Ra_T$
$GR_2$	$Ha^2$
$GR_3$	$1/Pr$
$GR_4$	$1/Ste$
$GR_5$	$1/Sc$

Table II.1: Groupements adimensionnels

## VI.2. Les paramètres caractéristiques du problème

Les paramètres caractéristiques intervenant dans les équations adimensionnelles ci – dessus, dont les valeurs conditionnent le transfert de chaleur et de masse dans la cavité sont :

### VI.2.1. Les paramètres géométriques

Le rapport de forme qui caractérise l’allongement de cavité :  $A = H / R$

### VI.2.2. Les paramètres physiques

Les paramètres adimensionnels usuels figurant dans le tableau II.1 sont les suivant :

Le nombre de Prandtl :  $Pr = \nu / \alpha$  ( $\alpha$  : diffusivité thermique)

Le nombre de Rayleigh thermique :  $Ra_T = (g \beta_T \Delta T R^3) / (\nu \alpha)$

Le nombre de Schmidt :  $Sc = \nu / D$  ( $D$  : la diffusivité massique)

Le nombre de Rayleigh solutal :  $Ra_c = (g \beta_s C_0 R^3) / (\nu \alpha)$

Nous appelons convection naturelle tout transfert convectif généré uniquement par un gradient thermique et solutal seulement. Par rapport au cas de la convection thermique, deux nouveaux paramètres apparaissent dans le système d’équation (II.24) adimensionnées en plus des nombres de Prandtl ( $Pr$ ) et de Rayleigh thermique ( $Ra_T$ ) : le nombre de Schmidt ( $Sc$ ) et le nombre de Rayleigh solutal ( $Ra_c$ ) qui introduit la force de volume d’origine solutale dans l’équation de Navier-Stokes en milieu fluide. Nous caractérisons l’importance relative des transferts de masse et de chaleur par deux rapports :

- Le rapport des forces de poussées thermique et solutale :

$$N = \frac{Ra_c}{Ra_T} = \frac{\beta_c C_0}{\beta_T \Delta T} \quad (\text{II.25})$$

- Le nombre de Lewis qui est le rapport des diffusivités thermique et solutale :

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\alpha}{D} \quad (\text{II.26})$$

On appelle Matériau à Changement de Phase - ou MCP - tout matériau capable de changer d'état physique dans une plage de température restreinte  $\Delta T$ . Tout matériau, solide ou liquide (ou gazeux) possède une capacité à stocker ou céder de l'énergie sous forme de chaleur. On distingue 2 types de transfert de chaleur (ou transfert thermique):

- Le transfert thermique par Chaleur Sensible (CS) : dans ce cas, le matériau en question peut céder ou stoker de l'énergie en variant sa propre température, sans pour autant changer d'état. La grandeur utilisée pour quantifier la CS échangée par un matériau est la chaleur massique, notée  $C_p$  et exprimée en  $J/(kg.K)$ .
- Le transfert thermique par Chaleur Latente (CL) : dans ce cas, le matériau peut stocker ou céder de l'énergie par simple changement d'état, tout en conservant une température constante caractéristique du changement d'état. La grandeur utilisée pour quantifier la CL échangée par un matériau est la Chaleur Latente de Changement de Phase notée  $\Delta H$  lors de la transition Liquide/Solide. Celle-ci est exprimée en  $J/kg$ .

Le paramètre adimensionnel qui caractérise le changement de phase est défini comme suit :

Le nombre de Stefan :

$$Ste = C_p \Delta T / \Delta H \quad (\text{II.26})$$

Notre modèle développé, couple les équations de l'hydrodynamique à celle de la solidification dirigée. Ce modèle macroscopique ne s'intéresse qu'à l'effet de la convection dans le bain liquide ainsi qu'à la forme et l'emplacement de la zone pâteuse en fonction du temps durant la solidification.

Samanta et Zabaras [54] montrent qu'ils parviennent à contrebalancer les écoulements dus à la gravité en appliquant un champ magnétique permanent.

Le paramètre adimensionnel qui caractérise l'effet magnétique est défini comme suit:

$$Ha = B_0 R \sqrt{\frac{\delta}{\rho \nu}} \quad (\text{II.27})$$

Le nombre de Prandtl caractérise le fluide étudié. En général tous les alliages métalliques ont des nombres de Prandtl inférieurs à 1 [55]. Pour une géométrie et un fluide donné, le nombre de Rayleigh représente l'écart de température des zones chaude et froide.

### VI.3. Les conditions aux limites adimensionnelles

En tenant compte des hypothèses énoncées au début du chapitre et de l'adimensionnement des grandeurs physiques, les conditions aux limites sont exprimées par :

- Sur les parois horizontales :

$$z^* = 0 \text{ ou } A \quad u^* = V^* = 0 \quad \frac{\partial T^*}{\partial z^*} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial C^*}{\partial z^*} = 0 \quad (\text{II.28})$$

- Sur la paroi latérale:

$$r^* = R \quad u^* = V^* = 0, \quad \frac{\partial C^*}{\partial z^*} = 0 \quad \text{et} \quad T^*(z^*)_{r^*=1} = -\left(\frac{V_g^*}{L_g^*}\right) \times t^* + 1 \quad (\text{II.29})$$

Avec  $V_g^*$  et  $L_g^*$  sont respectivement la vitesse de tirage et la longueur de la zone du profil de température adimensionnés.

- Sur l'axe de symétrie :

$$\left. \frac{\partial u^*}{\partial r^*} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial v^*}{\partial r^*} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial T^*}{\partial r^*} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial C^*}{\partial r^*} \right|_{r=0} = 0 \quad (\text{II.30})$$

## V. LES SEGREGATIONS CHIMIQUES

A l'interface solide-liquide, il ya un partage du soluté entre le solide et le liquide décrit par le coefficient de partage ou de ségrégation :

$$k_p = C_s / C_L \quad (\text{II.31})$$

Avec  $C_s$  et  $C_L$  les concentrations en soluté du solide et du liquide à l'interface.

Le diagramme de phase pour l'alliage Sn-Pb est présenté sur la figure II.2. Le coefficient de ségrégation étant inférieur à 1 ( $k_p = 0.065$ ), une fraction  $C_s = k_p C_L$  du soluté sera incorporée dans le solide et le reste demeure dans le liquide. Pendant la solidification, le soluté qui s'accumule en avant de l'interface est transporté dans le bain liquide par diffusion et par convection. La concentration du soluté à l'interface augmente continuellement au cours de la solidification, entraînant une variation axiale de composition dans l'échantillon (ségrégation axial). L'écoulement du fluide en avant de l'interface a donc une influence sur la répartition solutale dans le liquide. Le transport du soluté des parois du creuset vers le centre de l'échantillon génère des variations radiales de composition (ségrégations radiales). Ces ségrégations sont un problème pour les cristaux dont les propriétés dépendent de la composition.

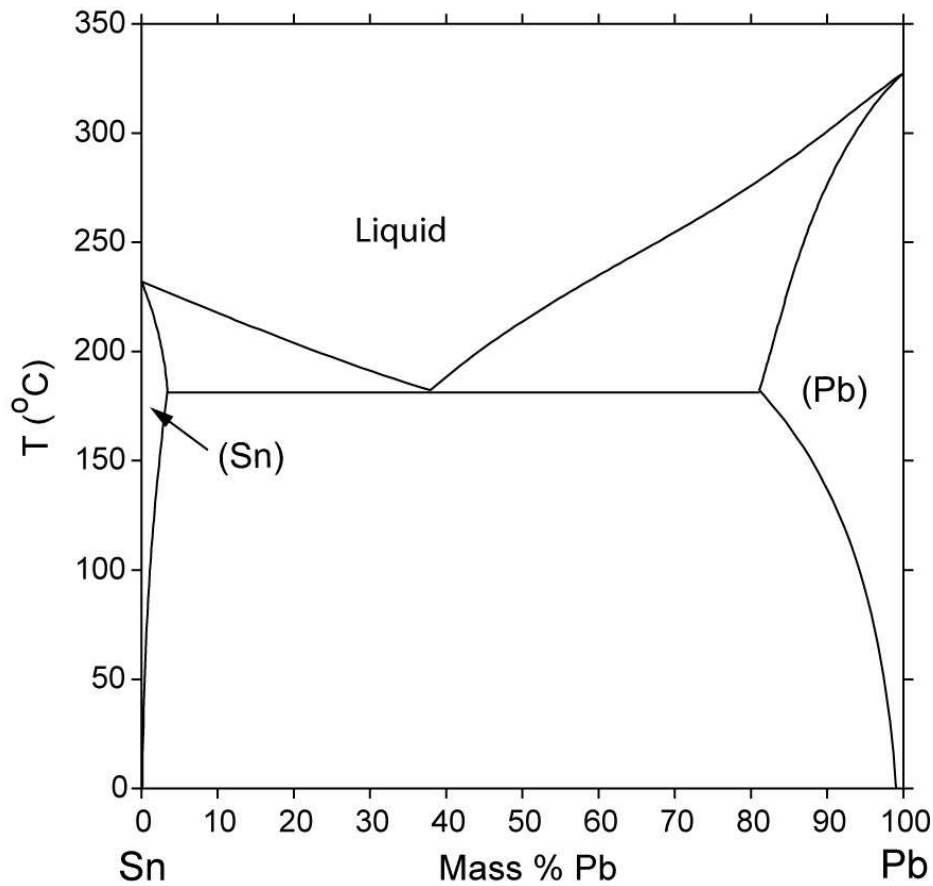


Figure II.2 : Diagramme de phase de l'alliage Pb-Sn , **H. Fecht /1989/**

D'après Brown et Kim [56] et Stelian et al [57-58] les ségrégations chimiques dans la direction radiales peuvent être données par ce qui suit :

$$\delta C = (C_{\max} - C_{\min}) / C_{av} \quad (\text{II.32})$$

où  $C_{\max}$ ,  $C_{\min}$  et  $C_{av}$  sont respectivement les concentrations maximale, minimale et moyenne à l'interface de solidification.

En régime convectif développé, les mouvements hydrodynamiques tendent à réduire les ségrégations radiales à cause de l'homogénéisation du bain. L'expression proposée par Kaddeche et al [59] pour la variation radiale de concentration montre une variation en  $Gr^{-1/9}$  des ségrégations radiales :

$$\delta C = 1.1(1 - k_p) Pe Gr^{-1/9} Sc^{-2/9} \quad (\text{II.33})$$

Ou  $Pe$  est le nombre de Peclet solutal  $Pe = RV_g / D$ . On observe que l'élévation de l'intensité convective décrite par le nombre de Grashof tend à réduire les ségrégations radiales.

## VII. VITESSE DE SOLIDIFICATION

Le calcul de la vitesse de la zone pâteuse a été fait via la relation définie par Timchenko et al [52] donnée par:

$$\vec{v} = \left( \partial f_s / \partial t \right) \Delta z$$

L'analyse de cette vitesse en fonction de la vitesse de tirage va être effectuée dans ce qui suit.

---

---

## PROCEDURE NUMERIQUE

---

---

### I. INTRODUCTION

En analyse numérique, la **méthode des volumes finis** est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles, au même titre que la méthode des différences finies et la méthode des éléments finis. Mais, contrairement à la méthode de différences finies qui utilise des approximations de dérivées, les méthodes de volumes finis utilisent des approximations d'intégrales.

Toutefois, la méthode des éléments finis utilise une formulation variationnelle de l'équation à résoudre, tandis que la méthode de volumes finis est fondée directement sur la forme primitive de l'équation.

On résout l'équation aux dérivées partielles de manière approchée sur un maillage. Ce maillage est constitué de **volumes finis**. Les volumes sont des petites unités (volumes en 3D, des surfaces en 2D, des segments en 1D) dont la réunion forme le domaine d'étude. Les volumes finis peuvent être construits autour de points d'un maillage initial, mais pas nécessairement.

La méthode de volumes finis a été mise au point initialement pour des lois de conservation, mais des développements récents permettent à présent de l'utiliser pour des équations elliptiques et paraboliques. Ces équations aux dérivées partielles contiennent des termes de divergence. Les intégrales de volume d'un terme de divergence sont transformées en intégrales de surface en utilisant le théorème de flux divergent. Ces termes de flux sont ensuite évalués aux interfaces entre les volumes finis. On utilise une fonction de flux numérique pour faire une approximation des flux aux interfaces. Comme le flux entrant dans un volume donné est égal au flux sortant du volume adjacent, cette méthode est conservative. Ce qui est particulièrement important lorsqu'on résout des lois de conservation.

Un autre avantage de la méthode des volumes finis est qu'elle est facilement utilisable avec des maillages non structurés. En effet, la formulation de la méthode de volumes finis ne tient aucun compte de la complexité du maillage, pour ce qui est de la discrétisation des lois de conservation. En revanche les caractéristiques géométriques du maillage peuvent jouer un rôle déterminant pour ce qui est des flux diffusifs.

## II. DESCRIPTION DU MAILLAGE

S.Patankar [60] a exposé la méthode des volumes finis telle qu'on peut répartir le domaine d'étude en un nombre fini de volumes contigus entourant chacun un nœud, figure III.1 .Ainsi les termes de transport apparaissant dans les équations de conservation de mouvement, de masse et d'énergie peuvent être intégrés sur chaque volume de contrôle fini par le biais de schéma d'interpolation.

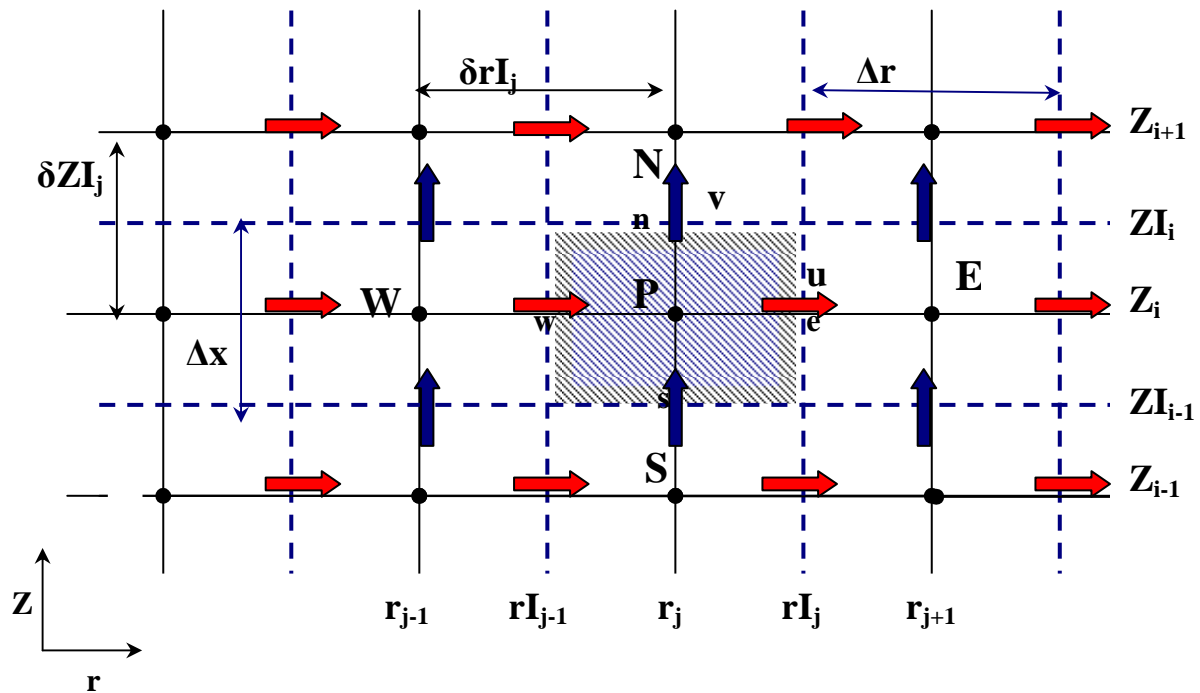




Figure III.1 : Discrétisation du domaine de calcul en deux dimensions

-  La vitesse radiale  $v$
-  La vitesse axiale  $u$

Le domaine d'étude est discrétisé à l'aide d'une grille bidimensionnelle (uniforme ou non) orientée positivement vers la droite suivant (or) et vers le haut suivant (oz). Pour écrire le schéma de discrétisation en un point P, nous désignerons par E et W les noeuds situés en Est et en Ouest (Figure III.1) et N et S les noeuds situés au Nord ou au Sud. Le " volume " de contrôle centré en P a pour dimension  $r_p \Delta r \Delta z$ . Les points situés aux limites de ce volume sont n, s, w et e respectivement.

### III. DISCRETISATION DE L'EQUATION GENERALE

Les équations de conservation de quantité de mouvement dans les deux directions (axiale et radiale), de température et de soluté pour les deux modèles physiques étudiés peuvent être écrite sous la forme suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\gamma\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho ru\phi) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{r\partial r}\left(r\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + S \quad (III.1)$$

Où:

$\phi$  : est la variable caractéristique du système (vitesse, température .....) généralisée par unité de volume.

$\Gamma$  : est le coefficient de diffusion généralisé (propre aux matériaux et phénomènes traités), il exprime la propriété de transport comme la viscosité ou la conductivité conjointement avec le gradient de la variable appropriée  $\phi$ .

S : est le terme de source spécifique à chaque variable  $\phi$ .

Equation	$\phi$	$\Gamma$	S
Continuité	1	0	0
Quantité de mouvement suivant x	$\vec{V}$	$\mu$	$-\vec{\nabla}P + \vec{F}_V$
Equation d'énergie	T	k	$S_T$
Equation de soluté	C	D	$S_c$

Table III. 1 : Tableau récapitulatif des équations de conservations.

Où :

$\vec{F}_V$  : Représente les forces de volumes.

$\vec{V}$  : Le champ de vitesse.

$\mu$  : Viscosité dynamique.

$k$  : Conductivité thermique.

$D$  : Diffusivité solutale.

### III.1. La discrétisation du terme in stationnaire

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w \frac{\partial}{\partial t} (\gamma \rho \phi) r dr dz dt = ((\rho \phi)^{t+\Delta t} - (\rho \phi)^t) \gamma r_p \Delta r \Delta z = \gamma \rho r_p \Delta r \Delta z (\phi^{t+\Delta t} - \phi^t) \quad (\text{III.2})$$

### III.2. La discrétisation des termes convectifs

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w \frac{\partial}{\partial z} (\rho v \phi) r dr dz dt = \left[ v_n \rho_n \frac{\phi_N + \phi_P}{2} - v_s \rho_s \frac{\phi_S + \phi_P}{2} \right] r_p \Delta r \Delta t \quad (\text{III.3})$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w \frac{\partial}{\partial r} (\rho u \phi) dx r dr dt = \left[ u_e r_e \rho_e \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - u_w r_w \rho_w \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \right] \Delta z \Delta t \quad (\text{III.4})$$

### III.3. La discrétisation des termes diffusifs

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dz r dr dt = \left[ \Gamma_n \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_n - \Gamma_s \left( \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_s \right] r_p \Delta r \Delta t =$$

$$\left[ \Gamma_n \left( \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta z_n} \right) - \Gamma_s \left( \frac{\phi_P - \phi_S}{\delta z_s} \right) \right] r_p \Delta r \Delta t \quad (\text{III.4})$$

$$\begin{aligned}
\int_t^{t+\Delta t} \int_s^e \int_w^e \frac{\partial}{r \partial r} \left( r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) r dr dz dt &= \left[ r_e \Gamma_e \left( \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_e - r_w \Gamma_w \left( \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_w \right] \Delta z \Delta t \\
&= \left[ r_e \Gamma_e \left( \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta r_e} \right) - r_w \Gamma_w \left( \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta r_w} \right) \right] \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{III.5}$$

#### III.4. Rassemblement des termes discrétisés

$$\begin{aligned}
&\left[ \left[ \frac{\rho_n v_n r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\delta z_n} \right] + \left[ \frac{-\rho_s v_s r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\delta z_s} \right] + \left[ \frac{\rho_e r_e u_e \Delta z}{2} + \frac{r_e \Gamma_e \Delta z}{\delta r_e} \right] \right. \\
&+ \left. \left[ \frac{-\rho_w r_w u_w \Delta z}{2} + \frac{r_w \Gamma_w \Delta z}{\delta r_w} \right] + \frac{\rho r_p \Delta z \Delta r}{\Delta t} \right] \times \phi_p \\
&= \left[ \frac{-\rho_n v_n r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\delta z_n} \right] \phi_N + \left[ \frac{\rho_s v_s r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\delta z_s} \right] \phi_S \\
&\left[ \frac{-\rho_e r_e u_e \Delta z}{2} + \frac{r_e \Gamma_e \Delta z}{\delta r_e} \right] \phi_E + \left[ \frac{-\rho_w r_w u_w \Delta z}{2} + \frac{r_w \Gamma_w \Delta z}{\delta r_w} \right] \phi_W + b
\end{aligned} \tag{III.6}$$

Pour exprimé l'équation discrétisée sous la forme :

$$a_p \phi_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \tag{III.7}$$

On intègre l'équation de continuité sur le volume de contrôle :

$$\int_s^e \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} (\rho v) dz r dr + \int_s^e \int_w^e \frac{\partial}{r \partial r} (\rho r u) dz r dr = 0 \tag{III.8}$$

$$\left[ (\rho v)_n - (\rho v)_s \right] r_p \Delta r + \left[ (\rho r u)_e - (\rho r u)_w \right] \Delta z = 0 \tag{III.9}$$

Soustrayons l'équation (III.6) de l'équation (III.9) on obtient :

$$\begin{aligned}
& \left[ \left[ \frac{-\rho_n v_n r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\delta z_n} \right] + \left[ \frac{\rho_s v_s r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\delta z_s} \right] + \left[ \frac{-\rho_e r_p u_e \Delta z}{2} + \frac{r_p \Gamma_e \Delta z}{\delta r_e} \right] \right. \\
& \left. + \left[ \frac{\rho_w r_w u_w \Delta z}{2} + \frac{r_w \Gamma_w \Delta z}{\delta r_w} \right] + \frac{\gamma \rho^t r_p \Delta r \Delta z}{\Delta t} \right] \times \phi_p \\
& = \left[ \frac{-\rho_n v_n r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\delta z_n} \right] \phi_N + \left[ \frac{\rho_s v_s r_p \Delta r}{2} + \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\delta z_s} \right] \phi_S + \\
& \left[ \frac{-\rho_e r_e u_e \Delta z}{2} + \frac{r_e \Gamma_e \Delta z}{\delta r_e} \right] \phi_E + \left[ \frac{\rho_w r_w u_w \Delta z}{2} + \frac{r_w \Gamma_w \Delta z}{\delta r_w} \right] \phi_W + b \quad \text{(III.10)}
\end{aligned}$$

D'après cette équation, on définit les termes convectifs et diffusifs :

$$\begin{aligned}
F_n &= \rho_n v_n r_p \Delta r & D_n &= \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\delta z_n} \\
F_s &= \rho_s v_s r_p \Delta r & D_s &= \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\delta z_s} \\
F_e &= \rho_e r_e u_e \Delta z & D_e &= \frac{r_e \Gamma_e \Delta z}{\delta r_e} \\
F_w &= \rho_w r_w u_w \Delta z & D_w &= \frac{r_w \Gamma_w \Delta z}{\delta r_w}
\end{aligned}$$

La discrétisation de l'équation de convection – diffusion en espace à l'aide du schéma power law peut s'écrire sous la forme suivante :

$$a_p \phi_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad \text{(III.11)}$$

Avec :

$$a_N = \left[ -F_n, D_n - \frac{F_n}{2}, 0 \right] \quad a_S = \left[ F_s, D_s + \frac{F_s}{2}, 0 \right]$$

$$a_F = \left[ -F_f, D_f - \frac{F_f}{2}, 0 \right] \quad a_B = \left[ F_b, D_b + \frac{F_b}{2}, 0 \right]$$

$$a_p = a_N + a_S + a_F + a_B + (F_n - F_s) + (F_f - F_b) \quad (\text{III.12})$$

Cette formulation est valable pour n'importe quel point entre deux interfaces et non pas seulement au milieu d'un volume de contrôle.

On définit les nombres de Peclet :

$$P_n = \frac{F_n}{D_n} \quad P_s = \frac{F_s}{D_s}$$

$$P_f = \frac{F_f}{D_f} \quad P_b = \frac{F_b}{D_b}$$

L'expression de  $a_n$  peut s'exprimer avec le schéma Power Law comme qui suit :

$$\text{Pour } P_n < -10 \quad \frac{a_N}{D_n} = -P_n$$

$$\text{Pour } -10 \leq P_n < 0 \quad \frac{a_N}{D_n} = (1 + 0.1P_n)^5 - P_n$$

$$\text{Pour } 0 \leq P_n < 10 \quad \frac{a_N}{D_n} = (1 - 0.1P_n)^5$$

$$\text{Pour } P_n > 10 \quad \frac{a_N}{D_n} = 0$$

L'écriture générale en utilisant le schéma Power Law est la suivante:

$$a_N = D_n \left[ 0, \left( 1 - \frac{0.1|F_n|}{D_n} \right)^5 \right] + [0, -F_n]$$

⇔

$$a_N = D_n \left[ 0, (1 - 0.1|P_n|)^5 \right] + [0, -F_n]$$

$$A(|P_n|) = \left[ 0, (1 - 0.1|P_n|)^5 \right]$$

L'équation discrétisée finale sera :

$$a_p \phi_P = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + b \quad (\text{III.13})$$

Avec :

$$a_N = D_n A(|P|) + [0, -F_n]$$

$$a_S = D_s A(|P|) + [0, F_s]$$

$$a_F = D_f A(|P|) + [0, -F_f]$$

$$a_B = D_b A(|P|) + [0, F_b]$$

$$b = s_c r_p \Delta r \Delta z + a_p^0 \phi_p^t \quad a_p = a_N + a_S + a_E + a_W - s_p r_p \Delta r \Delta z + a_p^0$$

$$a_p^0 = \frac{\rho_p^t r_p \Delta r \Delta z}{\Delta t}$$

#### IV. LINEARISATION DU TERME SOURCE

Quand le terme de source dépend de la variable  $\phi_p$ , nous exprimons cette dépendance par une forme linéaire donnée par la relation suivante :

$$s = s_c + s_p \phi_p \quad (\text{III.14})$$

L'incorporation de la dépendance linéaire est meilleure que de traiter S comme étant une constante. Quand S est une fonction non linéaire de  $\phi_p$ , nous devons la linéariser en fonction des valeurs de  $S_c$  et  $S_p$  dont eux même peuvent dépendre de  $\phi_p$ . Pendant chaque cycle d'itération, le  $S_c$  et  $S_p$  seraient calculés à partir des nouvelles valeurs de  $\phi_p$ . La linéarisation du terme de source doit être une bonne représentation de S en fonction de  $\phi_p$ . De plus, la règle de base des volumes finis impose  $S_p$  négatif. Il y a plusieurs méthodes pour écrire l'expression de S en fonction de  $S_c$  et  $S_p \phi_p$  mais la plus recommandée est la suivante :

$$s = s^* + \left( \frac{ds}{d\phi} \right)^* (\phi_p - \phi_p^*) \quad (\text{III.15})$$

Le symbole (\*) est utilisé pour indiquer les valeurs des variables à l'itération précédente.

On revient sur notre problème et on détermine la linéarisation des termes de source pour nos équations qui régissent les deux modèles proposés à étudier.

Equation	$\varphi$	$S_c$	$S_p$
Continuité	1	0	0
Equation du mouvement suivant (or)	u	$-\frac{(P_E - P_W)}{\delta R_i}$	$-\varepsilon$
Equation du mouvement suivant (oz)	v	$-GR_1 \left( (T^* - 1) - N(C^* - 1) \right) - \frac{(P_N - P_S)}{\delta z_j}$	$-Ha^2 - \varepsilon$
Equation d'énergie	T	$GR_4 \left[ \frac{f_s - f_s^*}{\Delta t} \right]$	0
Equation de concentration	C	0	$(k_p - 1) \left[ \frac{f_s - f_s^*}{\Delta t} \right]$

Table III.2: Expression des termes sources linéairisés ( $S_c$  et  $S_p$ )  
pour les différentes équations

Le système d'équations algébriques (III.13), après discrétisation des équations de conservation est non linéaire. Pour le résoudre, on fait appel à des méthodes itératives où les coefficients des équations sont considérés comme connus à chaque itération. Parmi ces méthodes itératives, on distingue la méthode de résolution ligne par ligne. Cette méthode économique, procède par propagation de l'information prise aux limites du domaine, sur tout l'étendu du champ de calcul. Celle ci combine entre l'algorithme TDMA et un processus itératif de Gauss-Seidel. (Voir annexe II).

## V. DISCRETISATION DE L'EQUATION DU CHAMP DYNAMIQUE

L'analyse des équations gouvernantes pour les composantes de vitesse u et v, révèle que ces dernières ne peuvent pas être obtenues directement par la résolution des équations du mouvement. En effet, ces équations contiennent des gradients de pression qui sont des termes sources indépendant de toutes les variables. Cependant, la pression est explicitée à travers l'équation de continuité.

V.1. Equations du mouvement

Les équations de mouvement expriment la conservation de quantité de mouvement dans les deux directions du domaine d'étude. Leur discrétisation est similaire à celle de l'équation générale de transport sauf que les composantes de vitesse sont évaluées sur les faces du volume de contrôle. Celles-ci sont exprimées comme des moyennes arithmétiques des vitesses aux nœuds adjacents, figure III.2.

a) Les vitesses associées à la composante axiale v sont données par :

$$v_n = \frac{v_N + v_P}{2}$$

$$v_s = \frac{v_S + v_P}{2}$$

$$u_n = \frac{u_{ne} + u_{nw}}{2}$$

$$u_s = \frac{u_{se} + u_{sw}}{2}$$

b) Les vitesses associées à la composante radiale u sont données par :

$$v_e = \frac{v_{en} + v_{es}}{2}$$

$$v_w = \frac{v_{wn} + v_{ws}}{2}$$

$$u_e = \frac{u_E + u_P}{2}$$

$$u_w = \frac{u_P + u_W}{2}$$

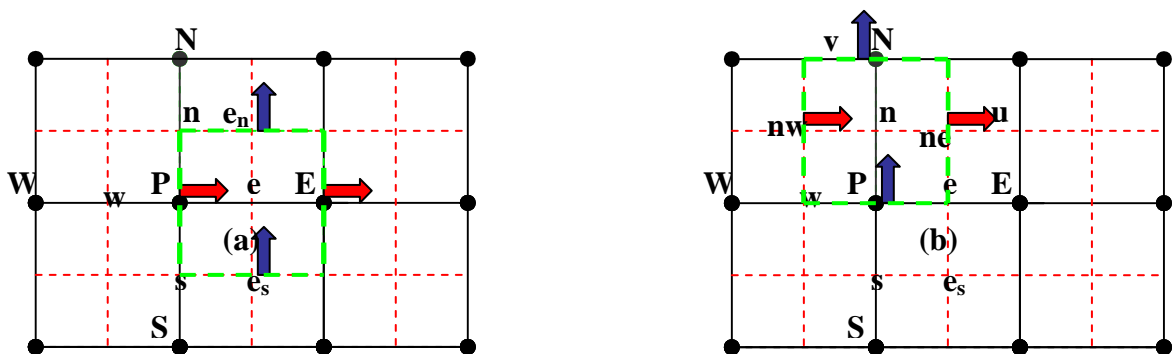


Figure III.2 : Composantes de vitesse sur les volumes décalés :

- a) direction radiale associe à u
- b) direction axiale associe à v

## V.2. Equation de correction de la pression

La détermination du champ de pression nécessite l'introduction d'une équation susceptible d'évaluer la pression en chaque point du maillage principal de la pression. La combinaison des équations discrétisées de quantité de mouvement et de continuité permet d'établir cette équation. Les équations discrétisées associées aux composantes de vitesse calculées sur le maillage décalé s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 a_n u_n &= \sum a_v u_v + b + (P_N - P_P) A_n \\
 a_s u_s &= \sum a_v u_v + b + (P_P - P_S) A_s \\
 a_e u_e &= \sum a_v u_v + b + (P_E - P_P) A_e \\
 a_w u_w &= \sum a_v u_v + b + (P_P - P_W) A_w
 \end{aligned} \tag{III.16}$$

Le champ estimé de la vitesse s'exprime comme suit:

$$\begin{aligned}
 a_n u_n^* &= \sum a_v u_v^* + b + (P_N^* - P_P^*) A_n \\
 a_s u_s^* &= \sum a_v u_v^* + b + (P_P^* - P_S^*) A_s \\
 a_e u_e^* &= \sum a_v u_v^* + b + (P_E^* - P_P^*) A_e \\
 a_w u_w^* &= \sum a_v u_v^* + b + (P_P^* - P_W^*) A_w
 \end{aligned} \tag{III.17}$$

Cela nous permet d'écrire les valeurs exactes de la vitesse et de la pression :

$$P = P^* + P' \quad : P' \text{ est la correction de la pression}$$

$$u = u^* + u' \quad : u' \text{ est la correction de la vitesse suivant (or)}$$

$v = v^* + v'$  :  $v'$  est la correction de la vitesse suivant (oz)

En soustrayant les équations (III.16) de (III.17), on obtient :

$$u'_n = \sum a_v u'_v + (P'_P - P'_N) d_n \quad (III.18)$$

$$u'_s = \sum a_v u'_v + (P'_S - P'_P) d_s$$

$$v'_e = \sum a_v v'_v + (P'_P - P'_E) d_e$$

$$v'_w = \sum a_v v'_v + (P'_W - P'_P) d_w$$

La détermination de la pression  $P'$  permet de calculer les champs corrigés de la vitesse et de la pression. Elle est obtenue par l'équation discrétisée suivante :

$$a_p P'_P = a_N P'_N + a_S P'_S + a_E P'_E + a_W P'_W + b \quad (III.19)$$

Avec :

$$a_N = d_n r_p \Delta r$$

$$a_E = d_e r_e \Delta z$$

$$a_S = d_s r_p \Delta r$$

$$a_w = d_b r_w \Delta z$$

$$b = \left[ \left( ru \right)_e^* - \left( ru \right)_w^* \right] \Delta z + \left( v_n - v_s \right)^* r_p \Delta r$$

Le terme  $b$  dans l'équation de correction de la pression, n'est autre que l'équation de continuité discrétisée à un signe moins près. Ce terme représente la source massique produite par le champ de vitesse. Les corrections successives de la pression doivent s'annuler lorsque le terme  $b$  tend vers zéro. En d'autres termes,  $b$  est un indicateur de la convergence.

## VII. SEQUENCE DES OPERATIONS DE L'ALGORITHME SIMPLER

Après avoir exposé la méthode de discrétisation des différentes équations, nous présentons les grandes lignes de l'algorithme SIMPLER pour la résolution des champs couplés dynamique (vitesse-pression), thermique et solutale pour le régime de convection mixte, qui peuvent se résumer comme suit :

1. Donner un champ initial de la vitesse comme première estimation.
2. Calculer les coefficients des équations discrétisées pour déterminer les pseudos vitesses.
3. Calculer les coefficients de l'équation discrétisée de correction de pression
4. Calculer le champ de vitesse en utilisant la pression estimée.
5. Déterminer les corrections de pression.
6. Corriger le champ de vitesse.

Tant que le critère de convergence du point de vue dynamique, thermique et solutale n'est pas satisfait, on retourne à l'étape 4 jusqu'à convergence pour un même pas de temps. Par ailleurs, un critère temporel de convergence est testé en dernier lieu pour arrêter le programme si le régime permanent est atteint sinon on reprend le calcul à partir de l'étape 2.

## VIII. DISCUSSION DE L'ALGORITHME SIMPLER

Les équations de pression  $P$  et de correction de pression  $P'$  sont de forme similaire à la différence que les termes  $\sum a_{nb} u'_{nb}$  et  $\sum a_{nb} v'_{nb}$  sont négligés pour l'équation en  $P'$ . Cette omission dans la procédure de calcul itérative n'influe guère sur la solution finale. En effet quand les termes sources deviennent nuls, les pressions de correction  $P'$  le deviennent aussi. De ce fait, la solution obtenue satisfait les équations du mouvement, ainsi que l'équation de continuité.

Dans l'algorithme SIMPLE, un choix initial adéquat du champ de pression joue un rôle important, ce qui n'est pas nécessaire pour SIMPLER, car il est plus facile d'estimer un champ de vitesse raisonnable dans la majorité des problèmes. D'autre part, le champ de pression est plus précis et ne subit aucune correction. Par conséquent,

la procédure de calcul SIMPLER, permet de réduire le temps de calcul au détriment d'un nombre d'opérations plus important dans une même étape. Par ailleurs, L'utilisation de la sous-relaxation est facultative particulièrement dans l'équation de pression, vu la précision du champ de pression obtenu par SIMPLER.

### IX. CRITERE DE CONVERGENCE ET FACTEURS DE RELAXATION

On dit qu'un processus itératif a atteint la convergence lorsque les itérations ne produisent aucun changement significatif dans les valeurs des variables dépendantes  $\phi$ . Pratiquement, on exprime cette convergence par un test d'arrêt du processus itératif qui dépend de la nature du problème et des objectifs de calcul.

Le critère de convergence le plus répandu dans la littérature porte sur les résidus de quantité de mouvement, de la masse, de l'énergie et du soluté. Ces résidus sont définis par :

$$R_{\phi_p} = \sum a_{nb} \cdot \phi_{nb} + b - a_p \cdot \phi_p \quad (\text{III.20})$$

Evidemment, quand l'équation discrétisée est satisfaite,  $R_{\phi}$  va tendre vers zéro. Mathématiquement, on traduit ça par l'inégalité suivante :

$$\sum_{\Omega} |R_{\phi_p}| < \varepsilon \quad (\text{III. 21})$$

Avec :  $\Omega$  Domaine de calcul et  $\varepsilon$  Valeur infiniment petite caractérisant l'erreur sur la solution obtenue.

C. J. Ho et F. J. Tu [61] ont utilisé un critère de convergence basé sur l'erreur absolue de l'ordre de  $10^{-7}$ .

$$\text{Max} |\phi_p - \phi_p^*| < \varepsilon \quad (\text{III. 22})$$

Avec :  $\phi_p$  La valeur actuelle de la variable dépendante.

$\phi_p^*$  La valeur à l'itération précédente de la variable dépendante.

Par contre, D. Angirasa et al [62], P. Nithiarasu et al [63] ont garanti la convergence de leurs méthodes de résolution grâce à un critère basé sur l'erreur relative et exprimé par :

$$\text{Max} \left| \frac{\phi_p - \phi_p^*}{\phi_p^*} \right| < \varepsilon \quad (\text{III. 23})$$

Un dernier critère de convergence est employé notamment par R. Bennacer [64], C. Bennard [65] ainsi que D. Gobin et al [66]. Ce test utilise le rapport du terme de correction de pression à la pression calculée qui doit être inférieur sur tout le domaine à une valeur prédéterminée (généralement prise égale à  $10^{-4}$ ).

Nous avons retenu plusieurs critères de convergence basés sur l'erreur relative maximale de chaque variable couplée à un résidu minimum de l'équation de continuité (généralement inférieur à  $10^{-6}$ ) pour chaque pas de temps. Pour la limite du régime permanent, nous avons basé notre critère sur l'erreur relative entre deux pas de temps successifs pour toutes les variables.

Enfin, la technique de relaxation est aussi utilisée pour contrôler la convergence du processus itératif. Une divergence peut avoir lieu lors de la résolution des systèmes d'équations algébriques à caractères non-linéaires et couplées. Pour éviter cette divergence, le processus de convergence est ralenti d'une itération à une autre au moyen de la sous-relaxation. Elle consiste à introduire un facteur de sous relaxation compris entre 0 et 1, dans l'équation (III.13), ce qui donne :

$$\phi_p = \phi_p^* + \alpha_\phi \left[ \frac{\sum a_{nb} \cdot \phi_{nb} + b}{a_p} - \phi_p^* \right] \quad (\text{III. 24})$$

$\phi_p^*$  : est la valeur de la variable obtenue à une itération précédente (\*);

$\phi_p$  : est la valeur calculée de la variable  $\phi$ .

La technique de relaxation tend à diminuer les résidus d'une première approximation puisque ces résidus sont nuls pour la solution exacte. En général, il n'y a pas de garantie qui assure toujours la convergence pour tout caractère non linéaire et couplé des équations. En absence de cette garantie, on peut néanmoins avoir de l'espoir, du fait que, pour un grand nombre de problèmes complexes, on a pu atteindre la convergence.

Il est à noter que cette technique de relaxation ne peut être exploitée que dans le processus itératif pour un même pas de temps. Toute relaxation dans l'évolution temporelle est proscrite dans notre approche.

## X. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la méthode de discrétisation qui permet l'écriture du système d'équations algébriques. Afin d'optimiser le temps de calcul, nous avons choisi l'algorithme ligne par ligne en couplage avec la méthode de correction par blocs. L'algorithme SIMPLER est choisi pour le traitement du couplage pression – vitesse. Le prochain chapitre est consacré au développement des codes de calcul et à leur validation.

---

---

## **VALIDATION DU CODE DE CALCUL**

---

---

### **I.INTRODUCTION**

Après avoir consacré une bonne partie de ce travail à la maîtrise de la méthode des volumes finis et à l'élaboration d'un code de calcul. Il convient de valider le programme écrit à partir de la discrétisation explicitée au chapitre précédent.

Avant de simuler des problèmes complexes et combinés, dont on ne connaît pas de propriétés particulières, telles que la symétrie d'un champ ou la valeur d'une variable du problème en un point donné. La performance du code numérique est testée pour les deux milieux possibles fluide et/ou poreux afin de vérifier le degré de précision atteint par la méthode numérique en rapport avec les phénomènes physiques réels et fixer les limites d'utilisation du code de calcul.

Nous informons que notre code de calcul est fait pour des problèmes en coordonnées cartésiennes comme il est fait pour des problèmes en coordonnées cylindriques. Donc, cela nous a permis de tester notre code pour les différents problèmes traités, convection thermique et solutale et le changement de phase dans les deux milieux ; liquide et poreux, en coordonnées cartésiennes.

Afin de contrôler la bonne discrétisation des termes moteurs dynamiques et de changement de phase ainsi que ceux de l'équation de conservation de soluté, des comparaisons systématiques pour les modèles de convection et de changement de phase permettent de s'assurer de la bonne prise en compte des différents termes discrétisés constituant les équations de conservation.

Le code de calcul SIMPLER a été largement utilisé pour la résolution des problèmes de solidification dirigée dans plusieurs cas d'étude. Afin de pouvoir l'étendre à notre problème physique qui est partagé en trois zones : liquide, pâteuse (simulé comme étant un milieu poreux et solide, il est nécessaire d'avoir une bonne maîtrise de la méthode des volumes finis.

Pour évaluer le degré de précision de nos résultats, nous avons choisi plusieurs types de validation puisées dans la littérature, à savoir une validation en convection naturelle et une autre en changement de phase dans des milieux fluides et poreux.

## II. SENSIBILITE DU CODE AU MAILLAGE

Afin de vérifier l'effet du maillage sur les résultats, nous avons simulé les deux cas de croissance ; la solidification verticale sous et sans l'effet magnétohydrodynamique. L'évolution de la fraction solidifiée a été analysée pour trois types de maillage régulier:  $10 \times 30$ ,  $15 \times 75$  et pour  $30 \times 90$  (voir figure IV.1 et IV.2 ).

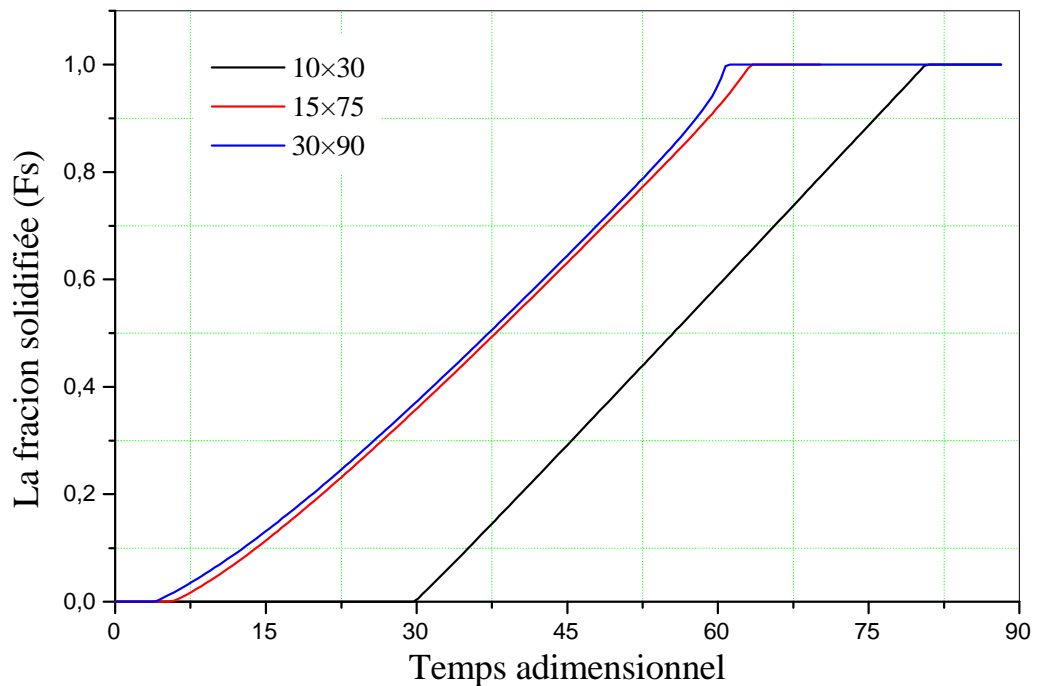


Figure IV.1: L'effet du maillage sur l'évolution de la fraction solidifiée sans l'effet magnétique

$$Ra = 8 \times 10^5, Ste = 1.05, pr = 0.11, N = -0.85, A = 3, Ha = 0$$

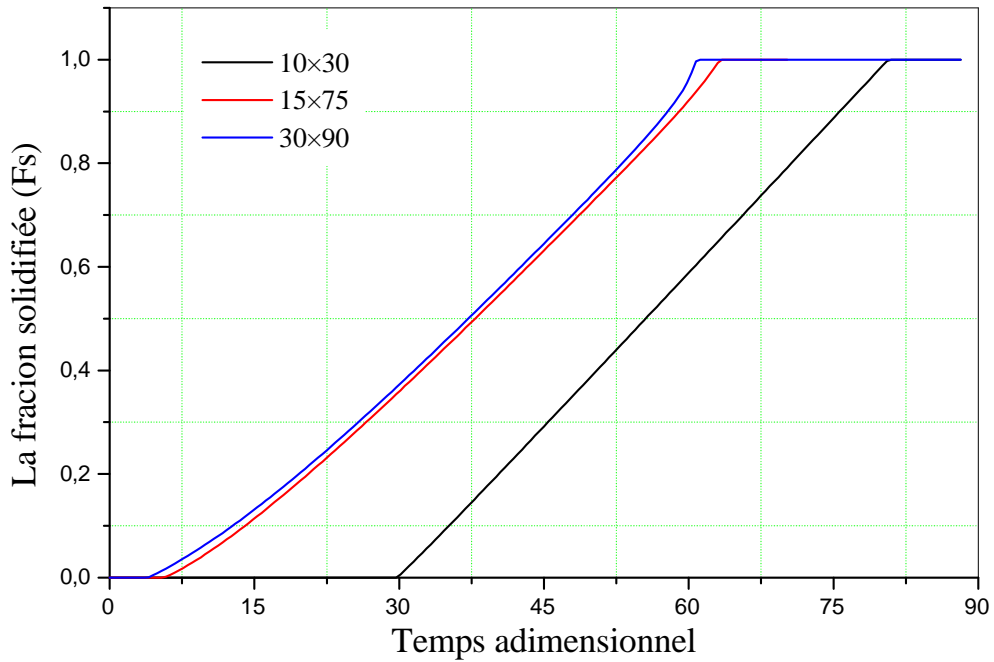


Figure IV.2: L'effet du maillage sur l'évolution de la fraction solidifiée sous l'effet magnétique

$$Ra = 8 \times 10^5, \quad Ste = 1.05, \quad pr = 0.11, \quad N = -0.85, \quad A = 3, \quad Ha = 50$$

D'après les résultats illustrés sur les deux figures IV.1 et IV.2, on constate que l'effet magnétohydrodynamique n'influe pas sur l'évolution de la fraction solidifiée. On remarque que la courbe associée au maillage de  $10 \times 30$  est largement éloignée de celles de  $15 \times 75$  et  $30 \times 90$  avec une variation amplifiée au maximum à 76%. Pour un maillage au-delà de  $15 \times 75$ , cet écart est de l'ordre de 2%.

Dans la suite, on adoptera pour des raisons de compromis précision/coût de calcul un maillage régulier à  $30 \times 90$ . Celui-ci évolue suivant une loi exponentielle tel qu'il est représenté sur la figure IV.3.

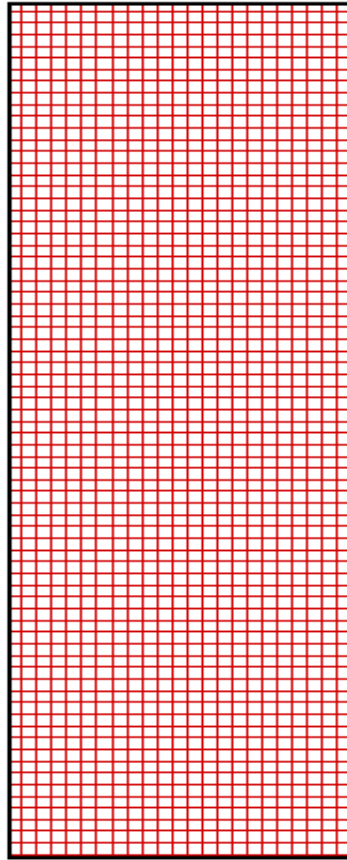


Figure IV.3: Maillage régulier de  $30 \times 90$  pour une cavité cylindrique  $A = 3$

### III. CALCUL DE PRECISION

Le test d'arrêt du processus itératif est basé sur l'observation des résidus des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la concentration. Ces résidus peuvent être définis localement pour chaque variable.

$$R_{\Phi} = \sum_{ab} a_{nb} \phi_{ab} + b - a_p \phi_p$$

Un deuxième critère de convergence de la résolution itérative beaucoup plus rigoureux est employé pour garantir une solution physique adéquate. Pour cela, nous

avons opté pour un critère de convergence fondé sur l'évaluation de l'erreur relative de chacun des paramètres dépendant ( $u, v, w, p, T$  et  $C$ ). Il est défini comme suit :

$$\max \left| \frac{\phi_i - \phi_i^*}{\phi_i^*} \right| \leq \varepsilon_1$$

$\varepsilon$  étant infiniment petits fixés en fonction de la précision de convergence voulue. Nous avons obtenu des résultats avec différentes précisions de convergences. Nous avons constaté sur les profils de vitesse par exemple, figure IV.4, que les solutions n'évoluent pratiquement plus dès  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Nous avons donc gardé cette valeur pour la suite de nos calculs. Le nombre maximal d'itération atteint lors de ces simulations est de  $21 \times 10^5$ .

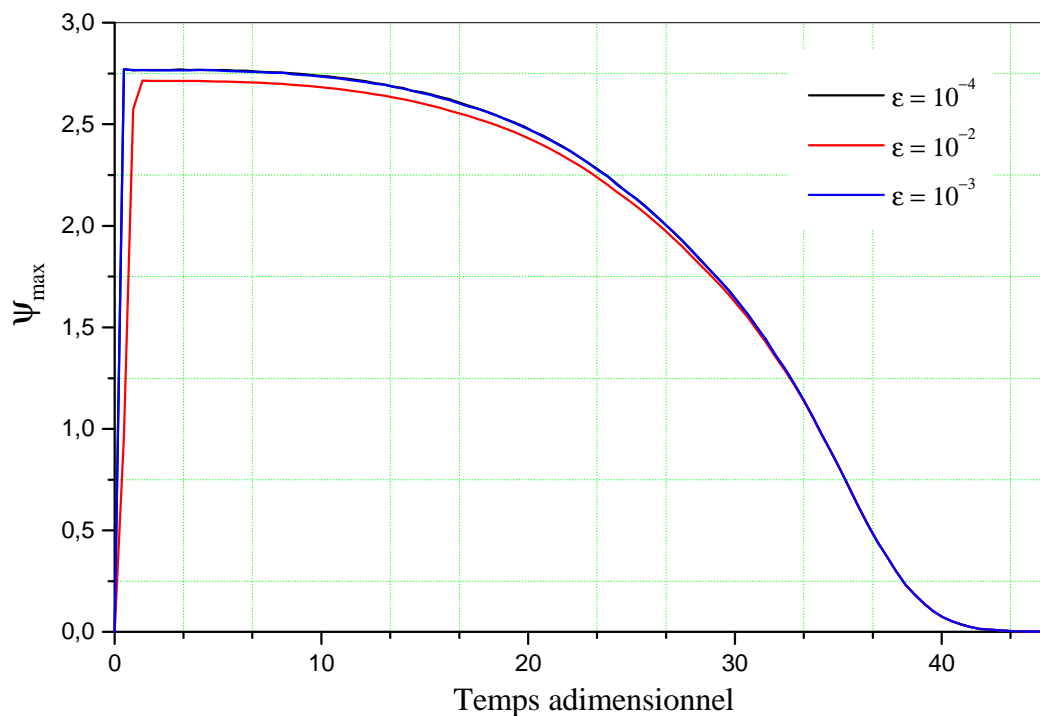


Figure IV.4: L'évolution de la fonction de courant pour différents résidus

$$Ra = 8 \times 10^3, Ste = 1.05, pr = 0.11, N = -0.85, A = 3, Ha = 0$$

## IV. VALIDATION DU CODE DE CALCUL

Nous avons testé la validité de notre programme pour la convection naturelle et forcée en régime permanent et pour le changement de phase en régime transitoire pour les deux configurations, fluide et poreuse.

### IV.1 Ecoulement dans une boîte chauffée (Thermal Driven Cavity)

De Vahl Davis [67] a organisé un symposium pour les codes de calcul de benchmark des écoulements convectifs naturels dans des cavités carrées. Le fluide est initialement au repos. Il se met en mouvement car la différence de température entraîne une différence de masse volumique qui provoque l'apparition de force d'Archimède. Ce problème est classique pour valider les calculs de convection thermique.

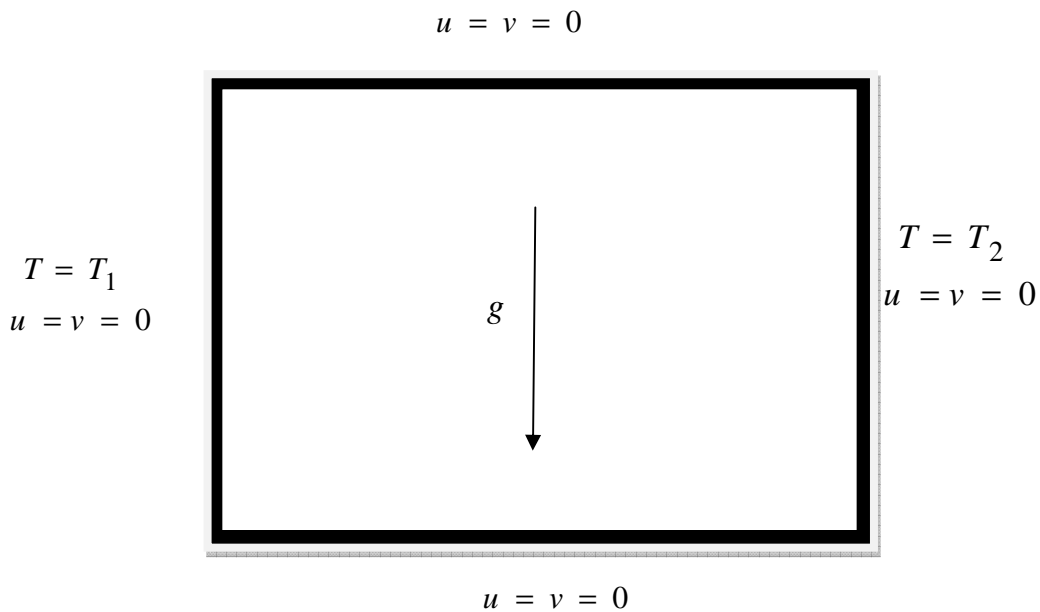


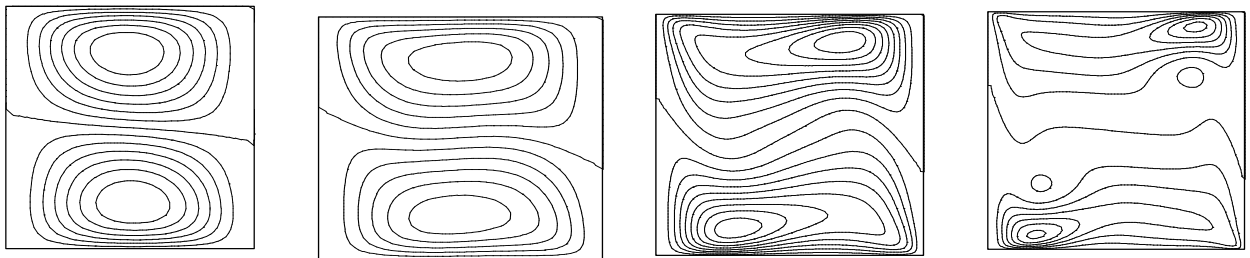
Figure IV.5: Cavité différentiellement chauffée

Une des parois verticales a été maintenue à une température plus élevée que l'autre. Les parois horizontales supérieures et inférieures ont été isolées. La cavité est remplie d'air. Les grandeurs classiques du problème sont le nombre de Prandtl  $Pr$  et le nombre

de  $Ra$  . La validation de ce problème : vitesses, température et taux de transfert thermique ont été obtenus à des nombres de Rayleigh de :  $10^3$  ,  $10^4$  ,  $10^5$  et  $10^6$  .

Toutes les comparaisons entre nos résultats et ceux de De Vahl Davis sont illustrées sur les différentes figures suivantes :

A)



B)

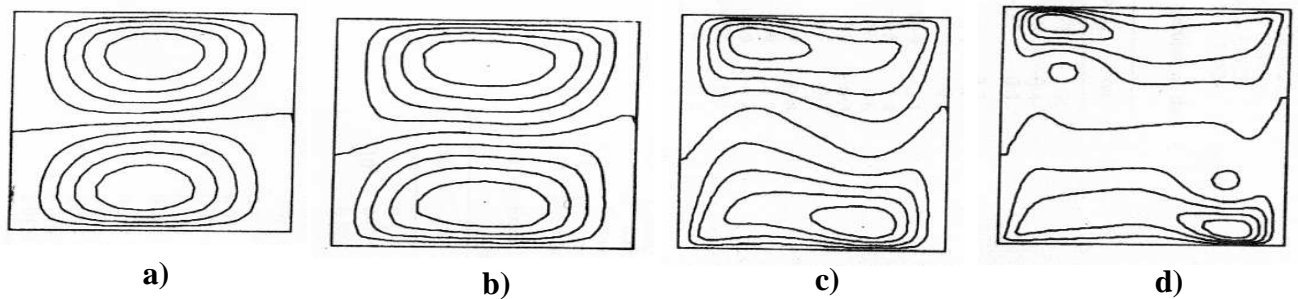


Figure IV.6: Structure des isocontours de la composante horizontale de la vitesse dans le cas de la convection naturelle

A) Nos résultats ;      B) Référence [67]

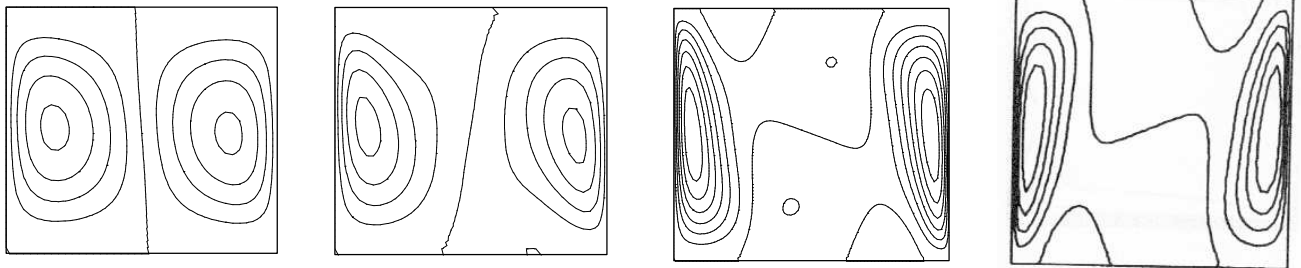
a)  $Ra = 10^3$

c)  $Ra = 10^5$

b)  $Ra = 10^4$

d)  $Ra = 10^6$

A)



B)

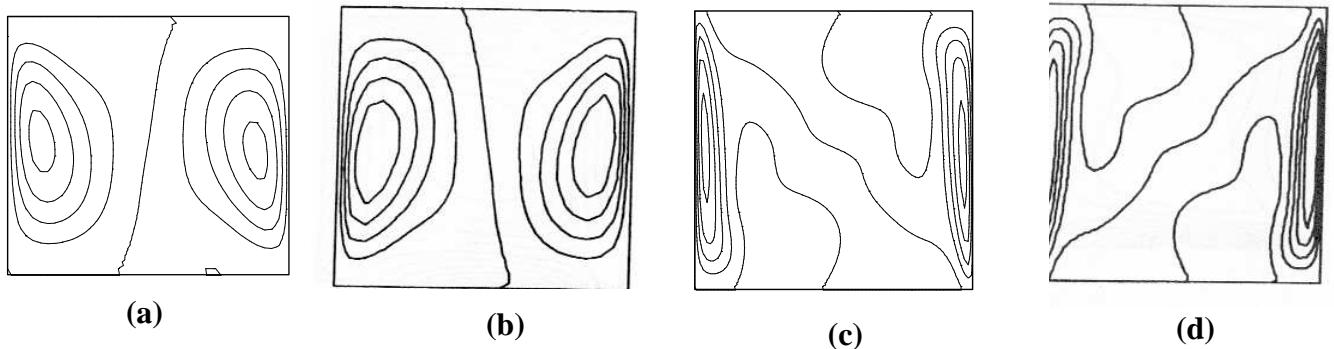


Figure IV.7: Structure des isocontours de la composante verticale vitesse dans le cas de la convection naturelle

A) Nos résultats ;      B) Référence [67]

a)  $Ra = 10^3$

c)  $Ra = 10^5$

b)  $Ra = 10^4$

d)  $Ra = 10^6$

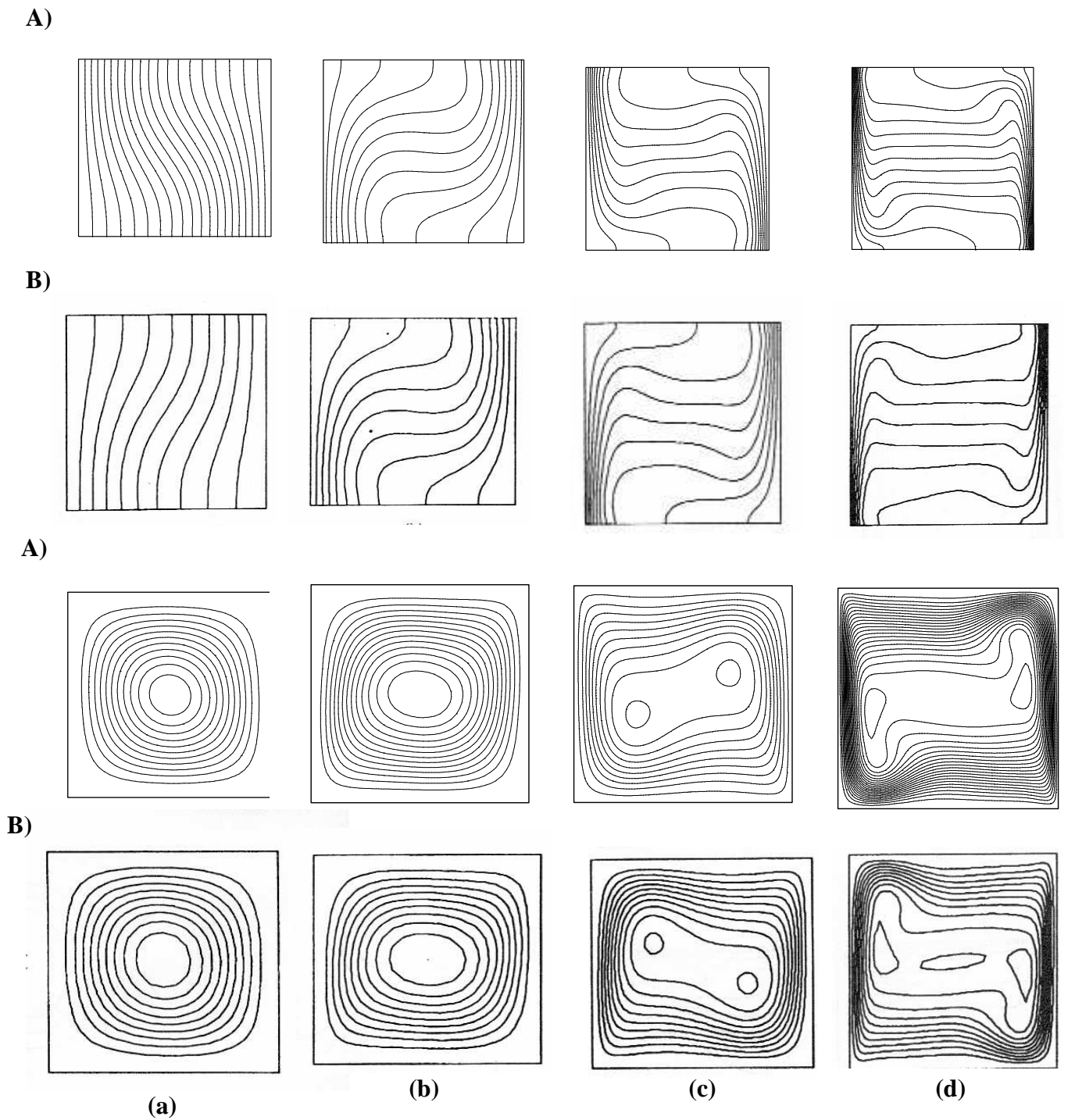


Figure IV.8 : Convection naturelle thermique dans une cavité carrée

A) Nos résultats ; B) Référence [67]

a)  $Ra = 10^3$

b)  $Ra = 10^4$

c)  $Ra = 10^5$

d)  $Ra = 10^6$

Les différentes validations effectuées, illustrées sur les figures précédentes, montrent un bon accord entre les résultats qualitatifs que nous avons obtenu grâce au code SIMPLER et ceux de De Vahl Davis. Pour appuyer ce constat, nous avons récapitulé dans le tableau IV.1 toutes les comparaisons quantitatives. Nous avons notamment indiqué l'écart relatif entre les deux études en ce qui concerne le calcul du nombre de

Nusselt  $Nu$  défini par  $\int_0^1 \frac{\partial T}{\partial x} dy$  .

$Ra = 10^3$	maillage	$ \psi_{\min} $	$ u_{\max} $	$ v_{\max} $	$Nu_{\min}$	$Nu_{\max}$	$\overline{Nu}$
Référence [67]	41 × 41	1.174	3.634	3.679	0.694	1.50	1.118
Présent travail	41 × 41	1.177	3.657	3.686	0.689	1.50	1.119
Erreur relative %		0.2	0.6	0.1	0.7	0	0.1

$Ra = 10^4$	maillage	$ \psi_{\min} $	$ u_{\max} $	$ v_{\max} $	$Nu_{\min}$	$Nu_{\max}$	$\overline{Nu}$
Référence [67]	41 × 41	5.098	16.182	19.509	0.592	3.545	2.234
Présent travail	41 × 41	5.079	16.09	19.55	0.581	3.436	2.259
Erreur relative %		0.3	0.6	0.2	1	3	1

$Ra = 10^5$	maillage	$ \psi_{\min} $	$ u_{\max} $	$ v_{\max} $	$Nu_{\min}$	$Nu_{\max}$	$\overline{Nu}$
Référence [67]	81 × 81	9.142	34.81	68.22	0.736	7.761	4.510
Présent travail	81 × 81	9.649	43.52	68.42	0.727	7.434	4.546
Erreur relative %		5.2	25	0.2	1	4.2	0.8

$Ra = 10^6$	maillage	$ \psi_{\min} $	$ u_{\max} $	$ v_{\max} $	$Nu_{\min}$	$Nu_{\max}$	$\overline{Nu}$
Référence [67]	81 × 81	16.961	65.33	216.75	1.005	18.076	8.798
Présent travail	81 × 81	17.03	66.87	220.92	1.001	18.025	8.980
Erreur relative%		0.4	2	2	0.3	0.2	0.2

Tableau IV.1 : Comparaison des résultats numériques pour la convection naturelle

**IV.2. Ecoulement dans une cavité adiabatique à paroi entraînée (Driven Cavity)**

La cavité entraînée est un problème hydrodynamique classique, il traite l'écoulement isotherme dans une cavité carrée. Le fluide est initialement au repos dans un domaine carré (voir figure IV.1). Il se met en mouvement car la paroi supérieure est entraînée à une vitesse uniforme  $u_0$  (régularisée aux coins pour éviter les singularités de la pression). Le paramètre caractéristique du problème est le nombre de Reynolds  $Re = \rho u_0 L / \mu$ . Le domaine de calcul est un carré défini comme suit : est  $0 \leq x \leq 1$  et  $0 \leq y \leq 1$ . Il est discrétisé selon un maillage uniforme qui varie suivant le nombre de Reynolds.

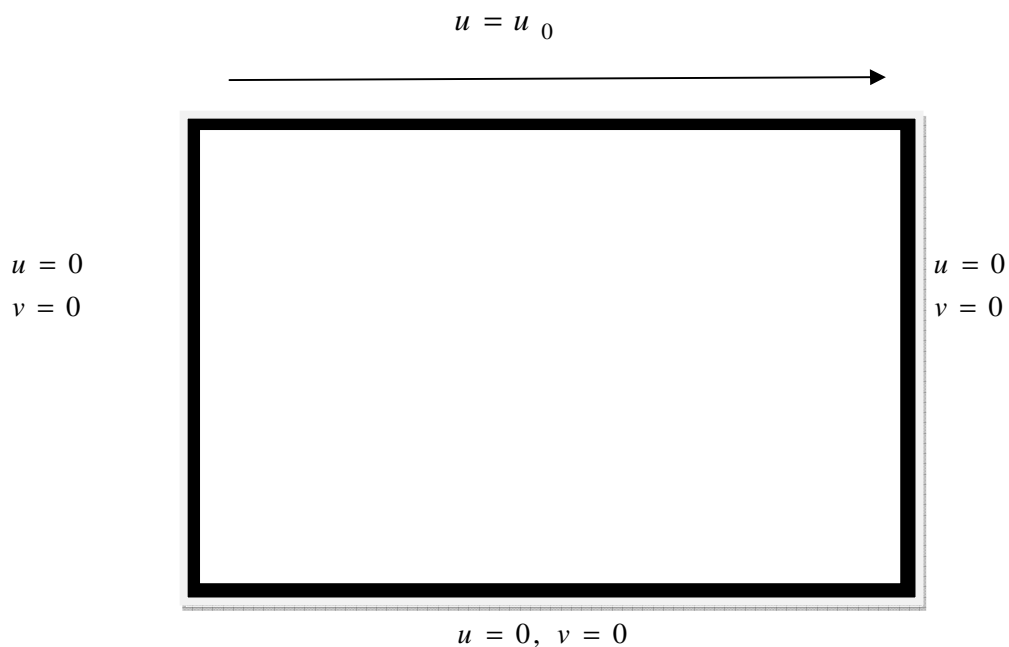


Figure IV.9 : Cavité adiabatique à paroi entraînée

Nous nous intéressons ici uniquement à des nombres de Reynolds modérés  $100 \leq Re \leq 10000$ . Dans cet intervalle, notre modèle indique que l'écoulement converge vers un état stationnaire. Nous observons des tourbillons secondaires qui ont sensiblement la même taille que ceux obtenues par Nonino et Croce [68].

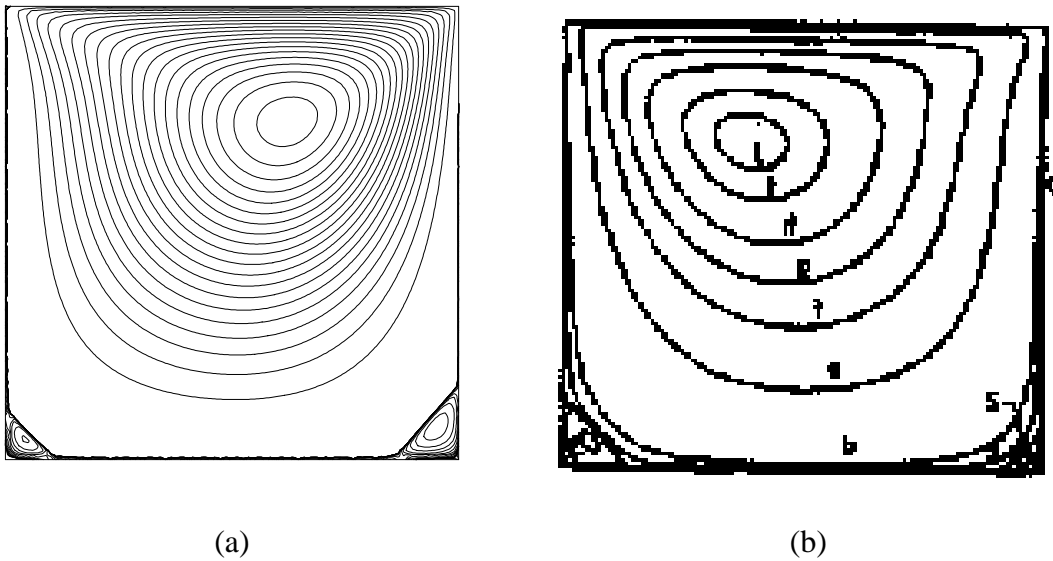


Figure IV.10 : Isovaleurs de la fonction de courant pour  $Re = 100$ .

(a) Nos résultats, (b) Référence [68].

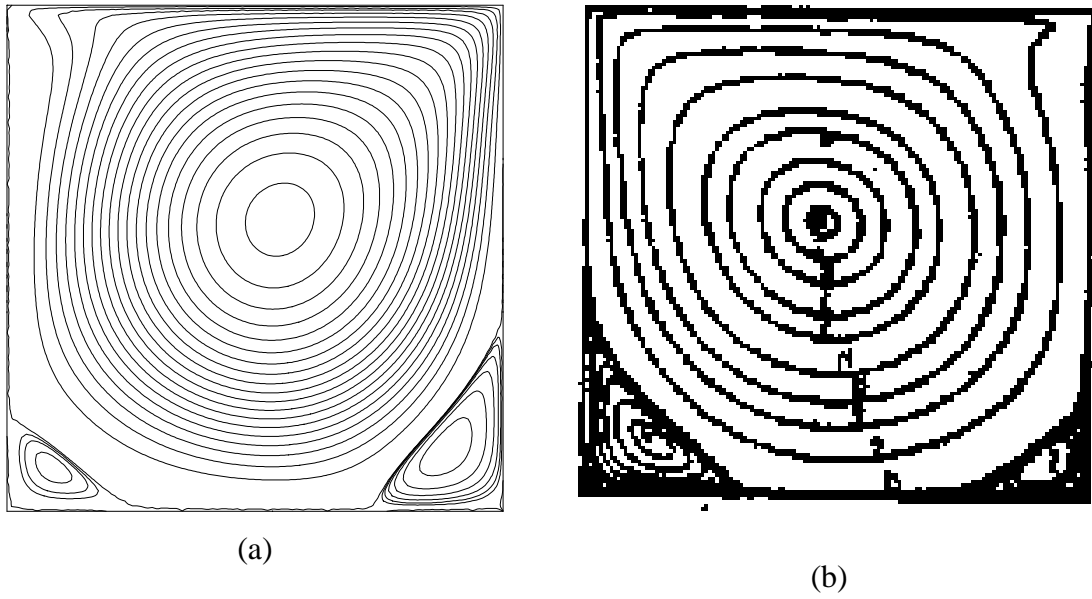


Figure IV.11 : Isovaleurs de la fonction de courant pour  $Re = 1000$ .

(a) Nos résultats, (b) Référence [68].

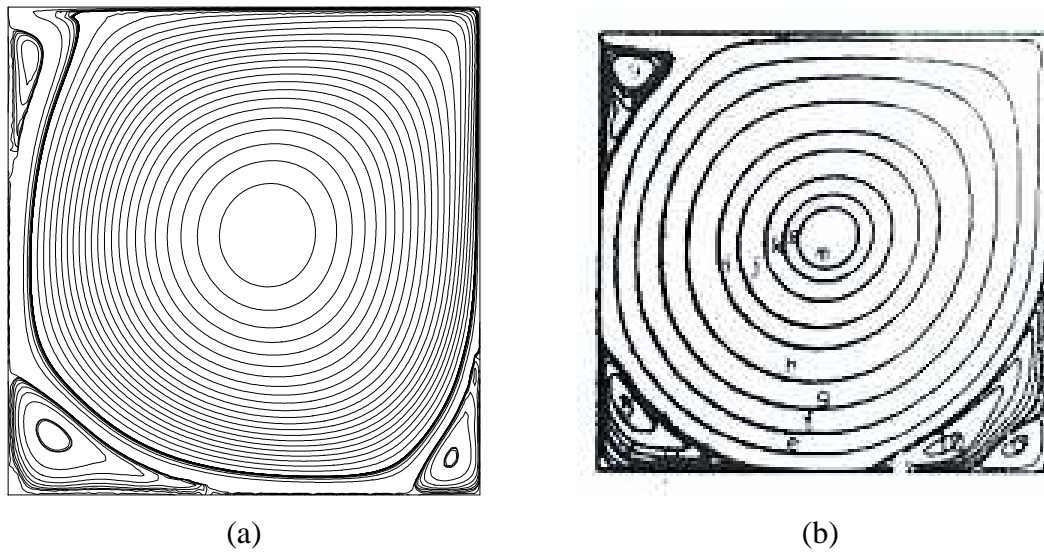


Figure IV.12 : Isovaleurs de la fonction de courant pour  $Re = 10000$ .

(a) Nos résultats, (b) Référence [68].

### IV.3. Convection naturelle thermosolutale

#### a) Validation avec des résultats expérimentaux

La convection thermosolutale bidimensionnelle dans une cavité rectangulaire différentiellement chauffée et concentrée a été étudiée expérimentalement par Han et Kuehn [69]. Ce travail a été effectué en utilisant une technique électrochimique avec des électrodes verticales maintenues aux températures différentes. Une comparaison des résultats est réalisée dans les deux cas où les forces de volume d'origine thermique et solutale coopèrent et s'opposent. Notre validation est fondée sur la comparaison des nombres de Nusselt et Sherwood moyens pour plusieurs nombres de Grashof thermique et solutal (voir le tableau IV.2).

Rapport de forme	$G_{rT}$	$G_{rM}$	N	$P_r$	$S_c$	$\overline{Nu}$ Référence [69]	$\overline{Nu}$ Présent travail	$\overline{Sh}$ Référence [69]	$\overline{Sh}$ Présent travail
H / L = 1	$2.0 \times 10^5$	0	0	8.5		10.6	10.6		
		$3.1 \times 10^6$	$\infty$		2390			101	100.4
	$-3.7 \times 10^5$	$3.2 \times 10^6$	-8.6	8.5	2390	5.3	4.2	92	91.4
H / L = 4	$3.4 \times 10^5$			8.8		11.6	11.5		
		$3.2 \times 10^6$	$\infty$		2390			103	102.1

Tableau IV.2 : Comparaison de nos résultats avec ceux de la Référence [69].

## b) Validation avec des résultats numérique

Une validation qualitative du transfert de soluté est réalisée pour une enceinte rectangulaire remplie d'air ( $Pr = 0.71$ ). Ce travail a été entrepris auparavant par Béghein et al [70] et Benzeghiba [71]. Les résultats semblent corrects par rapport à Benzeghiba [70]. En comparant avec ceux de Béghein et al [71], nous observons une différence qui est causé par un maillage inadéquat ( $41 \times 41$ ) et qui induit des perturbations importantes des résultats obtenus.

Le	Présent travail avec un maillage de (41×41)	Référence [70]	Référence [71]
0.5	11.31	11.29	11.00
1	16.84	16.87	16.40
5	30.80	30.81	28.70

Tableau IV.3 : Comparaison des nombres de Sherwood moyens pour la convection naturelle thermosolutale avec :  $Pr = 0.71$ ,  $Ra = 10^7$  et  $N = 0.01$

#### IV.4. La convection naturelle thermique en présence d'un milieu poreux

Dans notre modèle physique la zone pâteuse est assimilée à un milieu poreux où le terme de Darcy est rajouté aux termes de diffusion dans les équations de conservation de la quantité de mouvement (modèle de Brinkman). La comparaison pour les écoulements en présence de milieux poreux est très limitée puisque la majorité des travaux proches de la configuration qui nous intéresse, ont été réalisés en convection naturelle dans des cavités rectangulaires.

La validation des résultats présenté ici est basé sur la comparaison des nombres de Nusselt moyen avec les résultats numériques proposés par Benzeghiba [71], Nithiarasu [63] et Lauriat [73] pour un transfert naturel thermique convectif dans une cavité poreuse différentiellement chauffée pour le modèle de Darcy Brinkman. Cette validation est faite en fonction des nombres adimensionnels de Rayleigh  $Ra$  et Darcy  $Da$  (conditionne le mouvement convectif dans la matrice poreuse) tout en variant la porosité ( $\varepsilon$ ) du milieu poreux (voir le tableau IV.4) :

Da	Ra	$\varepsilon = 0.4$		$\varepsilon = 0.9$			
		$\overline{Nu}$ Référence [63]	$\overline{Nu}$ présent travail	$\overline{Nu}$ Référence [63]	$\overline{Nu}$ présent travail	$\overline{Nu}$ Référence [33]	$\overline{Nu}$ Référence [71]
$10^{-6}$	$10^7$	1.080	1.078	1.080	1.078	1.070	1.08
$10^{-6}$	$10^8$	2.99	3.06	3.01	3.08	3.06	3.03
$10^{-6}$	$10^9$	12.0	11.66	12.2	12.2	13.2	12.4
$10^{-2}$	$10^3$	1.02	1.01	1.02	1.02	1.02	1.02
$10^{-2}$	$10^5$	3.80	3.36	4.19	4.24	4.26	4.30

Tableau IV.4 : Comparaison des nombres de Nusselt moyens en convection naturelle pour le modèle de Darcy-Brinkman avec :  $pr = 1$ ,  $N = 0$ ,  $A = 1$

Da	Ra	$\overline{Nu}$ Référence [63]	$\overline{Nu}$ présent travail	$\overline{Nu}$ Référence [73]
$10^{-6}$	$10^7$	1.080	1.078	1.070
$10^{-6}$	$10^8$	3.00	3.07	3.09
$10^{-6}$	$10^9$	11.57	11.69	12.80
$10^{-4}$	$10^5$	1.08	1.07	1.07
$10^{-4}$	$10^6$	3.00	2.87	2.97
$10^{-4}$	$10^7$	9.63	9.026	9.62

Tableau IV.5 : Comparaison des nombres de Nusselt pour le modèle de Darcy-Forchheimer pour  $pr = 1$ ,  $N = 0$ ,  $A = 1$ ,  $\varepsilon = 0.4$ .

La concordance avec les résultats des auteurs cités précédemment est assez bonne quantitativement. Toute fois, un écart de 8% conséquent est enregistré vis-à-vis de G.Lauriat et V.Prasad [73] pour  $Ra = 10^9$  qui ont surestimé le transfert de chaleur par leurs approches numériques. Cet écart est retrouvé par les études les plus récentes de M.Benzeghiba [71]. Les nombres de Nusselt moyens pour le modèle de Darcy-Forchheimer qui incluent les effets inertiels microscopiques sont regroupés dans le tableau IV.5. L'accord entre les différentes simulations est assez satisfaisant.

Da	Ra	$\overline{Nu}$ Référence [63]	$\overline{Nu}$ présent travail	$\overline{Nu}$ Référence [33]
$10^{-6}$	$10^7$	1.080	1.078	1.070
$10^{-6}$	$10^8$	3.00	3.07	3.09
$10^{-6}$	$10^9$	11.57	11.69	12.80
$10^{-4}$	$10^5$	1.08	1.07	1.07
$10^{-4}$	$10^6$	3.00	2.87	2.97
$10^{-4}$	$10^7$	9.63	9.026	9.62

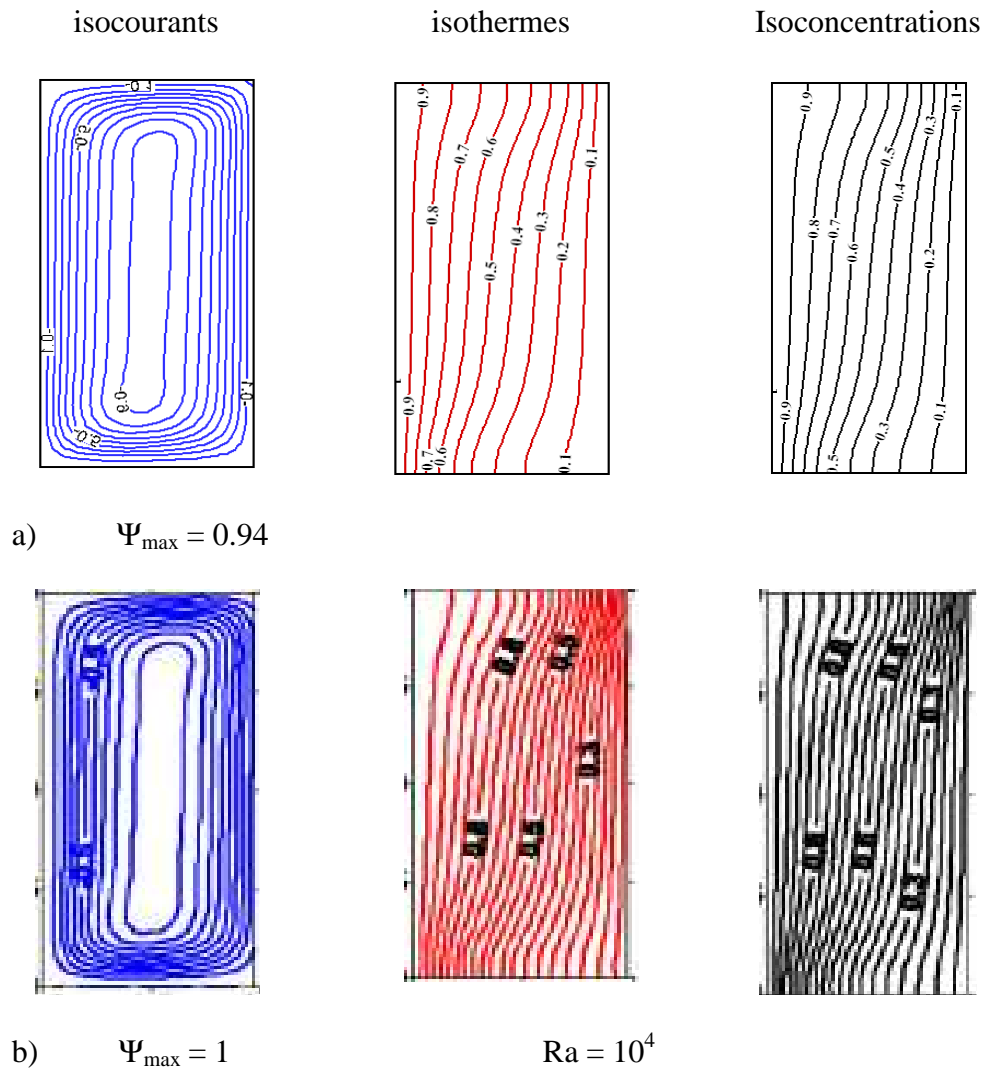
Tableau IV.5 : Comparaison des nombres de Nusselt pour le modèle de Darcy-Forchheimer pour  $pr = 1$ ,  $N = 0$ ,  $A = 1$ ,  $\varepsilon = 0.4$ .

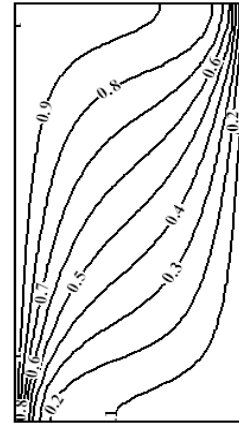
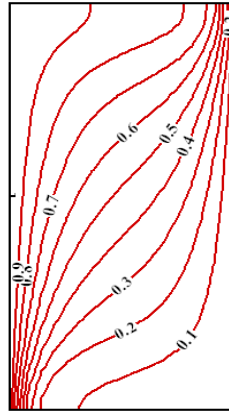
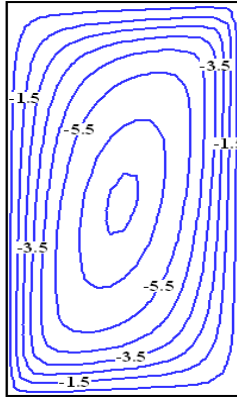
#### IV.5. La convection naturelle thermique en présence d'un champ magnétique

L'effet du champ magnétique au cours de la croissance réside dans le terme source de l'équation de conservation de quantité de mouvement. Afin d'assurer une bonne discrétisation de ce terme et l'inclure dans notre programme de calcul, une validation du code a été effectuée vis-à-vis au travail de M.A. Teamah [74] où le phénomène de convection thermosolutale sous l'effet d'un champ magnétique constant a été analysé. Cette référence nous a permis de valider les effets des nombres de Rayleigh et de Hartmann sur la structure d'écoulement. Les calculs ont été effectués avec un maillage de  $20 \times 40$  mais nous avons vérifié pour  $Ra = 10^6$  qu'un maillage de  $40 \times 80$  donne des résultats quasiment identiques. La comparaison est satisfaisante et la différence sur la valeur maximale de la fonction de courant est inférieure à 4 %.

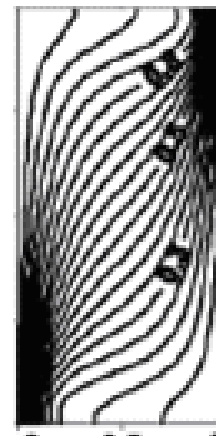
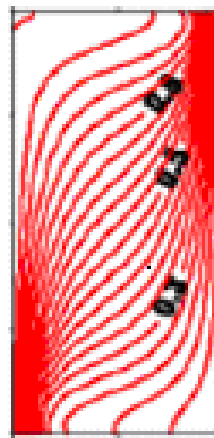
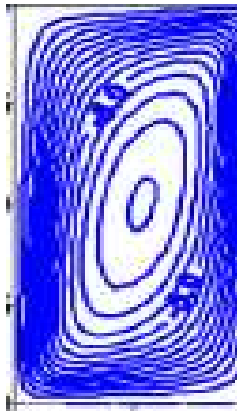
Lorsqu'on s'intéresse à la convection naturelle thermosolutale dans les liquides, d'après la figure IV.13 on constate qu'à faibles nombres de Lewis, les écoulements peuvent présenter une structure monocellulaire centralisée. L'effet du nombre de Rayleigh est éclairé sur la figure IV.3 à un nombre de Hartmann constant. À faible

nombre de Rayleigh ( $Ra = 10^3$ ), la cellule est prolongée verticalement où les isocourants et isoconcentrations représentent un quasi parallélisme axial. En contrepartie, tellement que la déviation des isovaleurs est très importante pour ( $Ra = 10^6$ ), un parallélisme est obtenu au centre de la cavité dans la direction de prolongation de la cellule.





a)  $\Psi_{\max} = 7.1$



b)  $\Psi_{\max} = 7.5$

$Ra = 10^5$

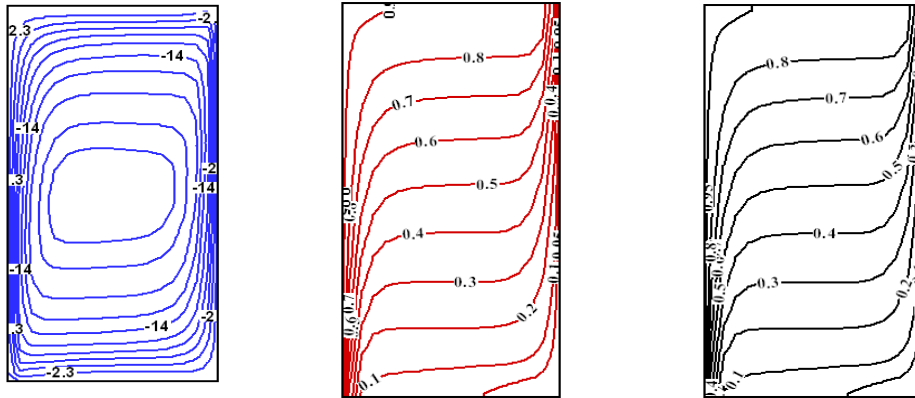
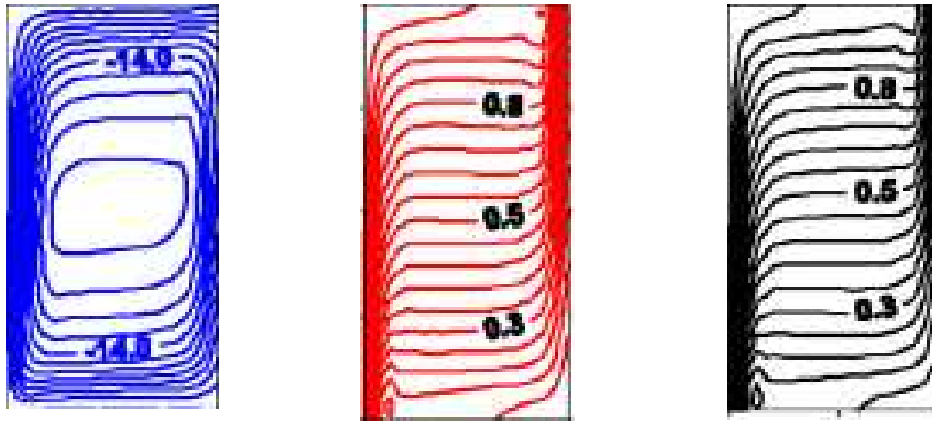
a)  $\Psi_{\max} = 23.8$ b)  $\Psi_{\max} = 24$  $Ra = 10^6$ 

Figure IV.13 : Convection thermosolutale sous l'effet d'un champ magnétique constant avec :  $pr = 0.7$ ,  $N = 1$ ,  $A = 1$ ,  $Le = 1$ ,  $Ha = 25$

(a) Présent travail

(b) Référence [74]

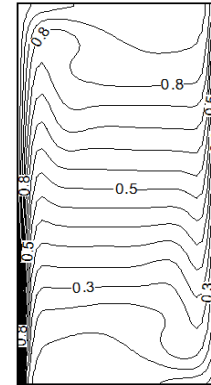
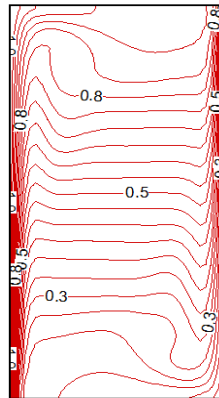
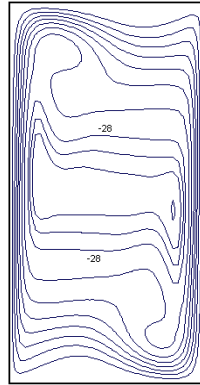
La figure IV.14 illustre l'effet du champ magnétique représenté par le nombre de Hartmann sur la structure de l'écoulement ainsi que le transfert de chaleur et de masse à  $Ra = 10^6$  où la convection naturelle est bien prononcée. Pour  $Ha = 0$ , on remarque que l'écoulement est multicellulaire. La comparaison des champs de concentration et de température calculés montre un accord qualitatif satisfaisant sur l'existence du régime multicellulaire. L'augmentant du nombre de Hartmann influe directement sur la

structure de l'écoulement où la transition vers le régime unicellulaire est observée. Cet effet est attribué à la réduction de l'intensité de convection naturelle. Ces constatations sont confirmées par la simulation de M.A. Teamah [74].

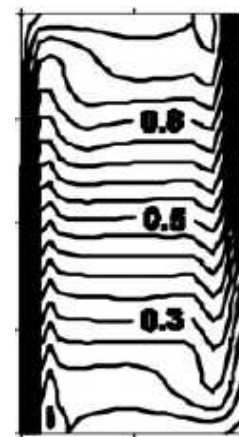
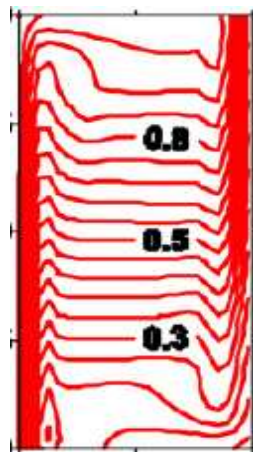
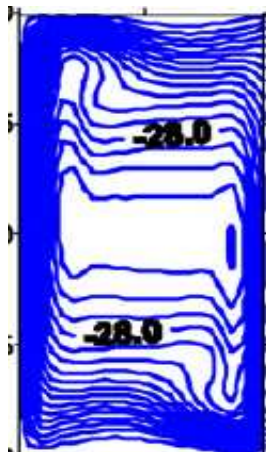
isocourants

isothermes

Isoconcentrations

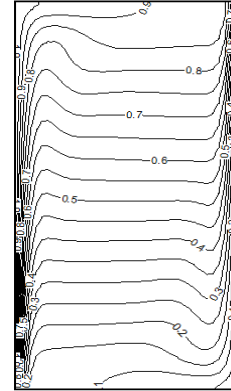
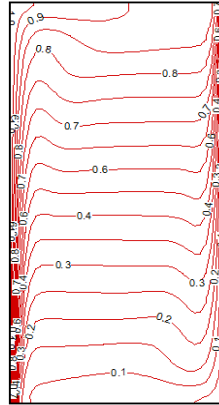
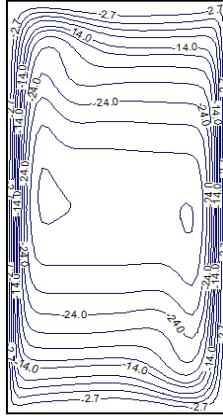


a)  $\Psi_{\max} = 37.3$

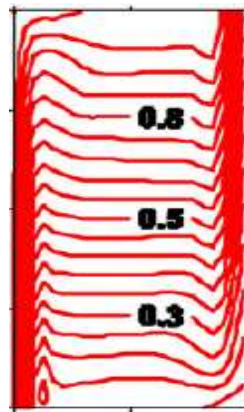
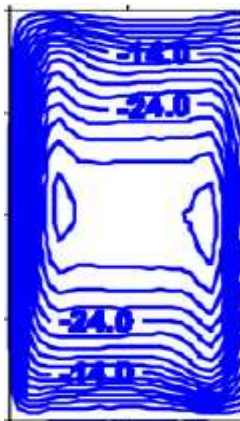


b)  $\Psi_{\max} = 38.0$

Ha = 0

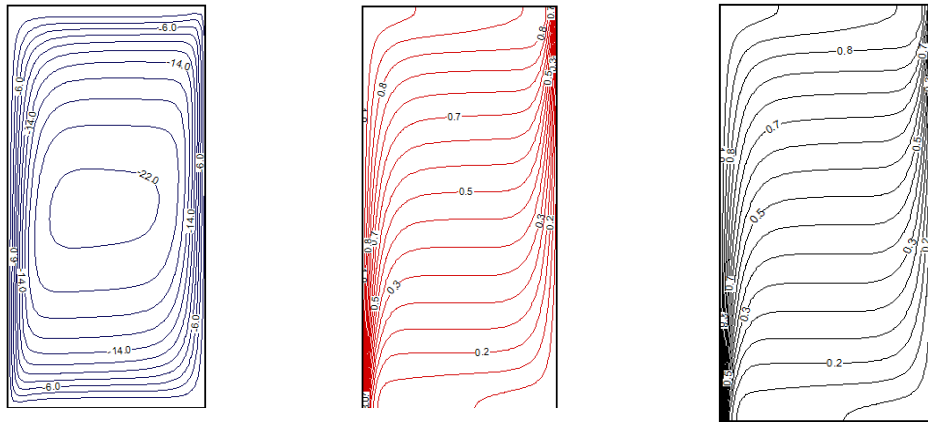


a)  $\Psi_{\max} = 33.6$

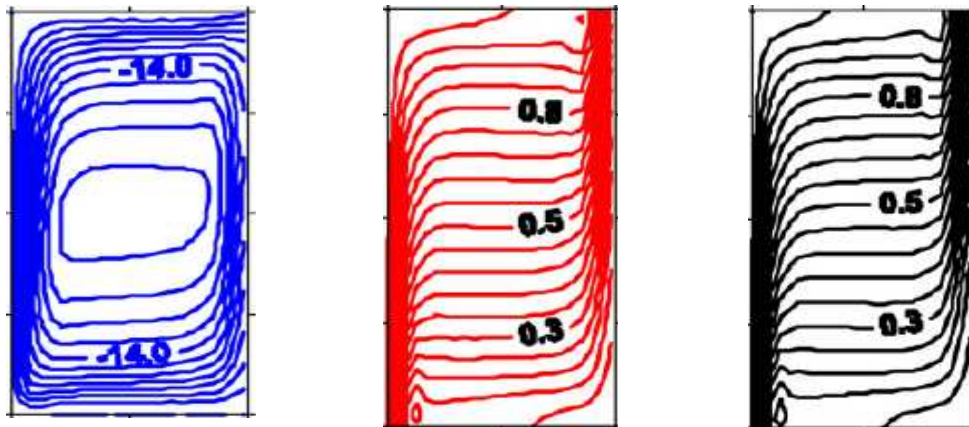


b)  $\Psi_{\max} = 34$

Ha = 20

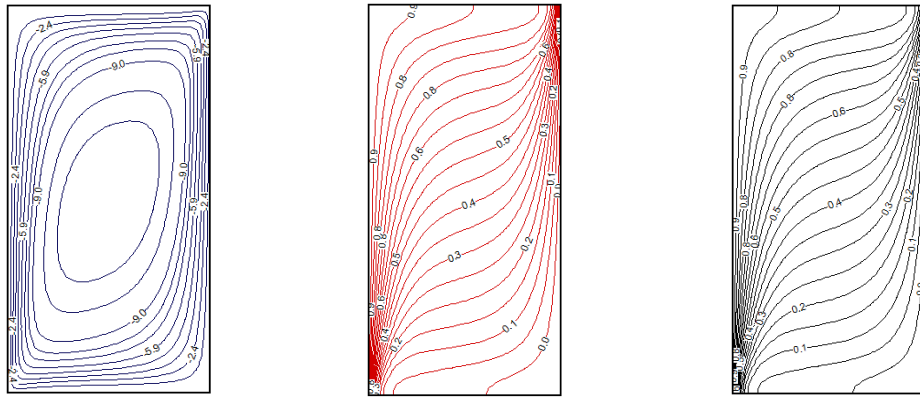


a)  $\Psi_{\max} = 23.8$

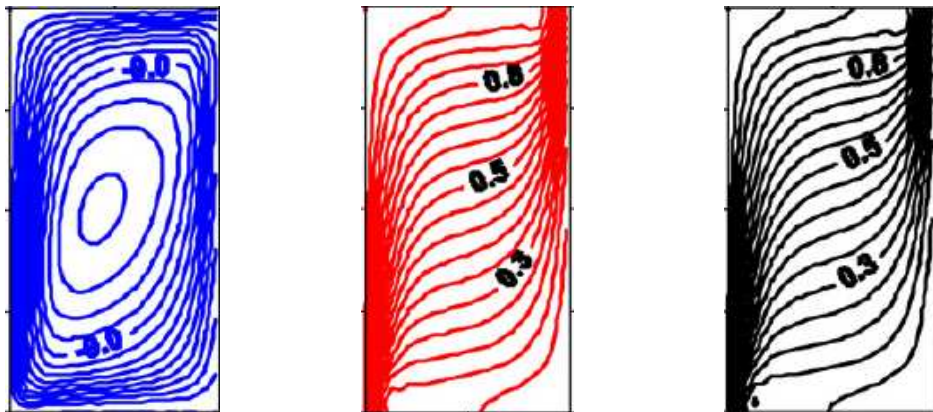


b)  $\Psi_{\max} = 24$

Ha = 50



a)  $\Psi_{\max} = 14$



b)  $\Psi_{\max} = 14$

Ha = 100

Figure IV.14 : Convection thermosolutale sous l'effet d'un champ magnétique constant avec :  $Ra = 10^6$ ,  $pr = 0.7$ ,  $N = 1$ ,  $A = 1$ ,  $Le = 1$

(a) Présent travail

(b) Référence [74]

#### IV.6. Validation de la méthode d'enthalpie « Changement de phase avec convection naturelle »

Ce paragraphe a pour but de valider le code de calcul pour un problème bi-dimensionnel classique de changement de phase dans une enceinte rectangulaire en présence de convection naturelle. Nous avons utilisé l'expérience de Gau et Viskanta [75] comme référence pour la validation.

La figure IV.5 donne une représentation de l'enceinte utilisée lors de cette expérience. Elle est de hauteur  $H = 6.35 \text{ cm}$  et de largeur  $W = 8.89 \text{ cm}$ . Les deux parois horizontales sont adiabatiques tandis que les deux parois verticales sont isothermes. La paroi chaude est à  $T_1 = 38^\circ \text{ C}$  et la paroi froide est à  $T_0 = 28.3^\circ \text{ C}$ . La cavité est remplie de Gallium solide pur, initialement à la même température que la paroi froide  $T_0$ .

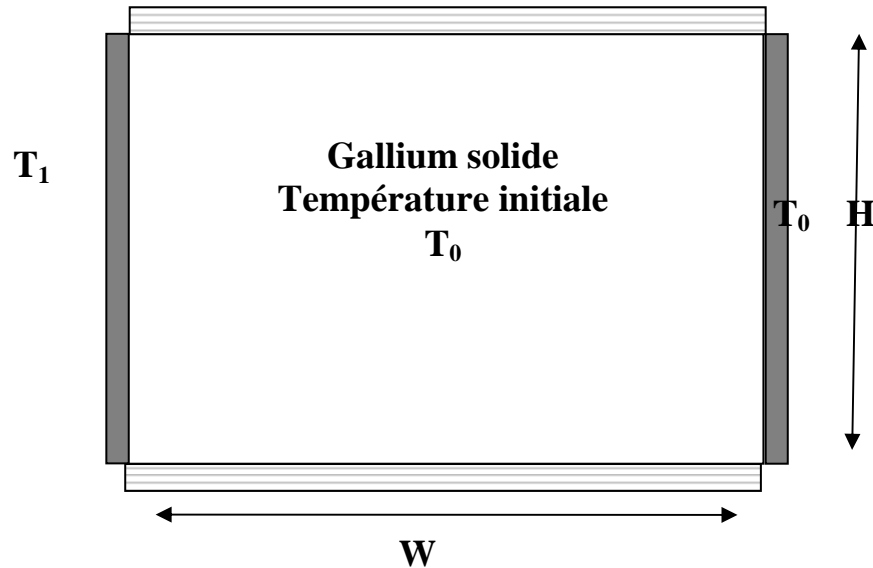


Figure IV.15 : L'expérience de Gau et Viskanta [75].

Les propriétés physiques du Gallium utilisées dans la simulation numérique sont données dans le tableau IV.5.

c	381.5	$\beta$	1.2E-4
k	32.0	$\mu$	1.81E-3
$\Delta H$	80160	$\rho$	6093
$T_f$	302.93	$\rho_{ref}$	6095

Tableau IV.6 : Propriétés physiques utilisées pour le Gallium pur (unités M.K.S.A).

Ces propriétés correspondent à un nombre de Prandtl de 0.0216, ce qui montre que l'énergie diffuse beaucoup plus rapidement que la quantité de mouvement dans le Gallium liquide.

Pour résoudre ce problème, nous avons adopté la formulation enthalpique proposée par Voller/1987/ pour laquelle l'énergie totale est séparée en deux composantes, la chaleur sensible et la chaleur latente. Une description plus détaillée de cette méthode enthalpique est fournie par Brent et al [76].

A cause de la nature de la méthode enthalpique, nous avons présenté les termes de convection qui apparaissent dans les équations de conservation par un schéma de puissance du premier ordre qui ne requiert que l'information du voisin immédiat. Nous avons utilisé un maillage non uniforme ( $42 \times 32$ ), de telle manière à avoir un maximum de point là où la fraction de liquide varie rapidement. Nous avons vérifié que la réduction du pas d'espace n'engendre pas de variation perceptible dans la solution. Un pas de temps constant de 5s a été choisi. Les trois critères suivants doivent être satisfaits simultanément pour déclarer la convergence :

-La norme résiduelle adimensionnée de l'équation de conservation de la masse est inférieur à  $10^{-5}$ .

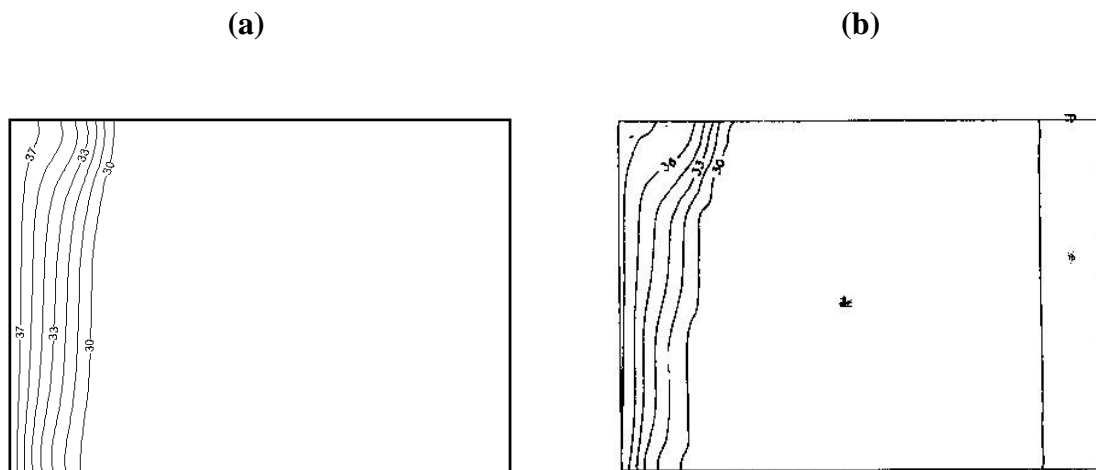
-La norme résiduelle adimensionnée de l'équation de conservation d'énergie est inférieure à  $10^{-6}$ .

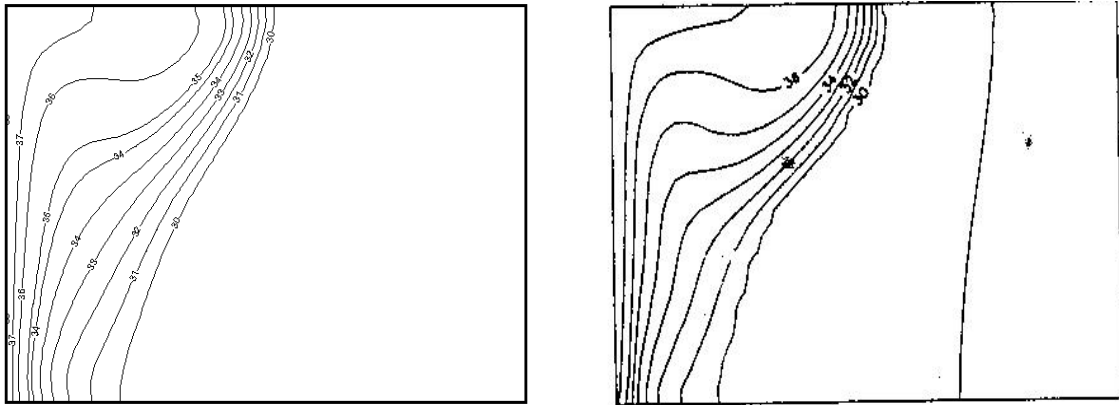
-Le champ de fraction liquide demeure inchangé.

Les figures IV.6 et IV.7 représentent les champs de température et d'écoulement pendant la l'évolution dans le temps du phénomène de fusion du Gallium.

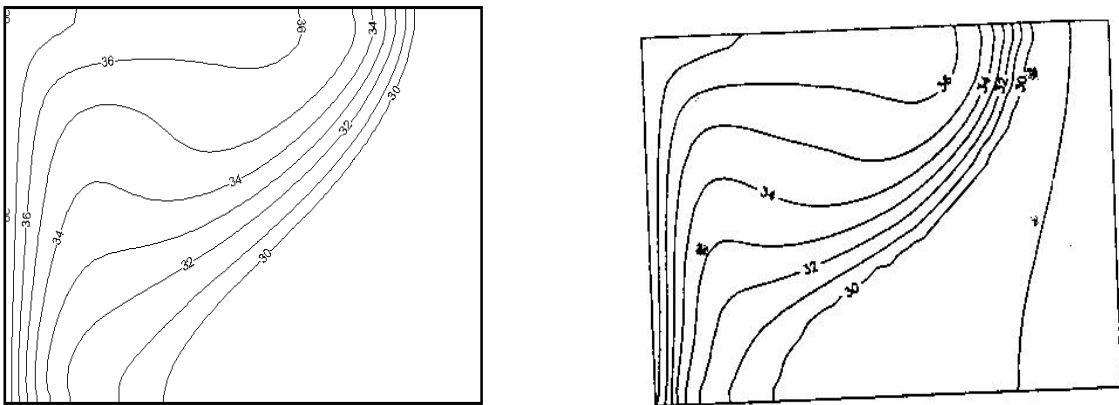
Après 3min de fusion, l'intensité de convection est très faible, cela résulte un front virtuellement plan. Après 6min, l'intensité de convection augmente et devient plus importante. Ce qui explique le développement morphologique de l'écoulement et du champ de température.

D'après la comparaison de nos résultats avec ceux de Brent et al [76], on constate qu'une bonne concordance est obtenue.





t = 10 min



t = 19 min

Figure IV.16 : Comportement du champ thermique pendant le changement de phase :

a) Nos résultats    b) Référence [76]

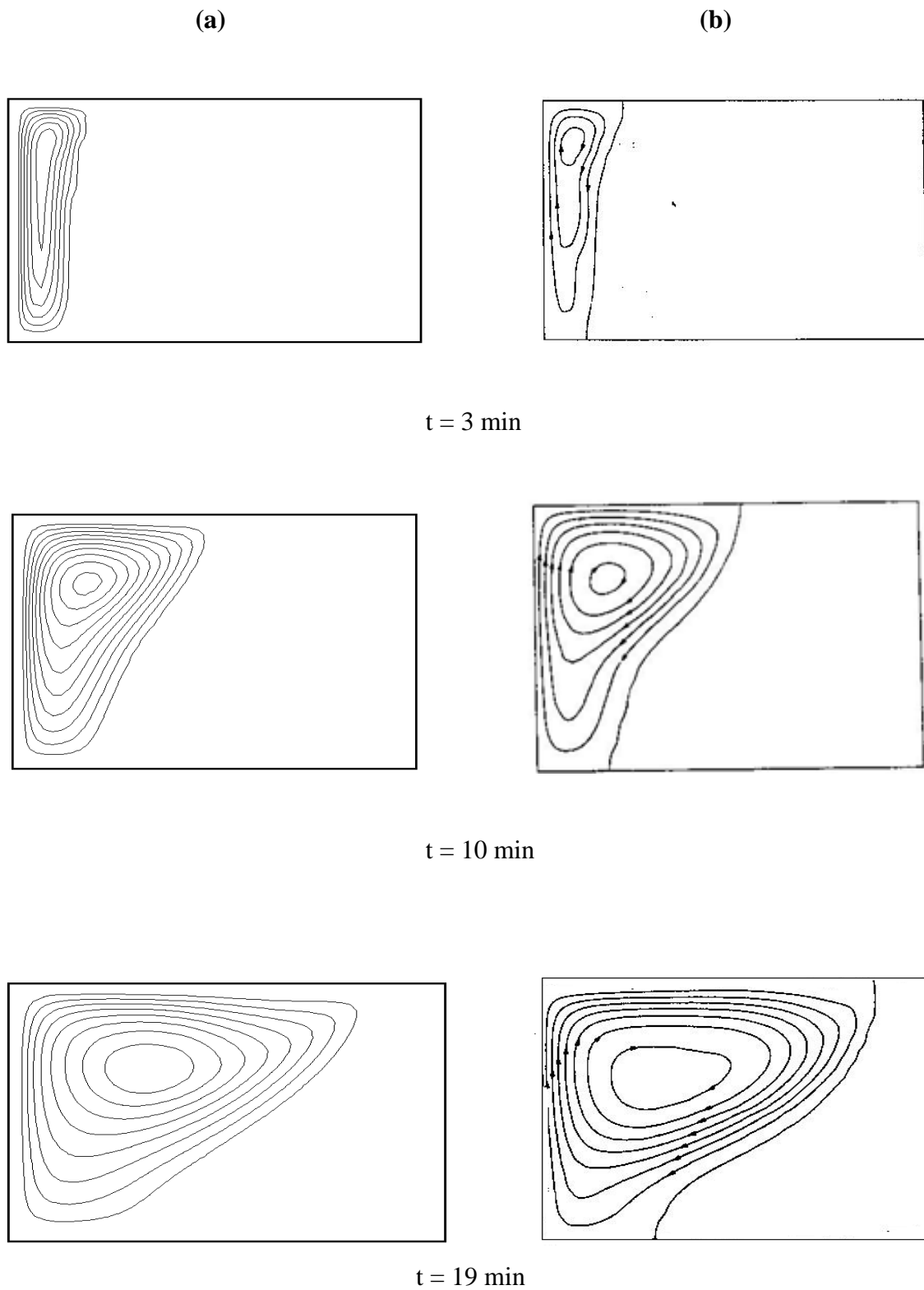


Figure IV.17 : Comportement de la fonction de courant pendant le changement de phase : a) Nos résultats b) Référence [76]

## **V. CONCLUSION**

Après avoir détaillé la structure du code de calcul établi, nous avons effectué une série de simulations numériques. La qualification de ce programme est assez concluante pour les différents cas limites. Nous pouvons donc aborder sereinement l'exploitation de ce code pour étudier l'effet de certains paramètres liés au mode de transfert en présence du changement de phase sous l'effet magnétique dans le dernier chapitre.

---

---

## **RESULTATS ET DISCUSSION**

---

---

### **I. INTRODUCTION**

Après avoir mis au point et validé notre modèle numérique grâce aux résultats disponibles dans la littérature, nous nous proposons d'étudier le transfert de chaleur et de masse lors du changement de phase dans un espace annulaire. Cette étude a pour but la compréhension du phénomène de couplage double-diffusif lors du processus de solidification verticale par la méthode de Bridgman et l'analyse de l'effet électromagnétique sur la convection dans le bain ainsi que sur la distribution du soluté dans le produit final.

Parmi les paramètres gouvernant le système d'équation, nous distinguons le nombre de Rayleigh thermique qui caractérise l'écart de température, le rapport des forces de poussée conjuguées qui exprime la dominance des forces d'Archimède en fonction du rapport des diffusions cinétique et solutale explicité par le nombre de Schmidt, le nombre de Stefan qui représente le rapport entre la chaleur sensible et la chaleur latente, le nombre de Hartmann caractérisant la racine carré du rapport entre la force électromagnétique appliqué et la force de viscosité, le rapport de forme décrivant la géométrie de la cavité cylindrique et enfin le nombre de Prandtl définissant la nature du fluide. Les domaines de variation de chaque paramètre sont en général :

$$0 \leq Ha \leq 400, 10^3 \leq Ra \leq 10^6, 10^{-1} \leq Ste^{-1} \leq 100, 1 \leq A \leq 10$$

Dans la majorité de nos calculs, nous avons considéré le cas d'un fluide à un nombre de Prandtl inférieur à l'unité. Ce choix est motivé par le fait que la plus part des solutions des matériaux semi conducteurs sont des solutions aqueuses où  $Pr < 1$  dans les quelles le nombre

de Schmidt est supérieur à 1 à cause de la différence importante entre la diffusivité de masse et de chaleur [77-78]. Cela indique l'importance de l'effet convectif sur les ségrégations.

Dans le cas de changement de phase, le nombre de Stefan fait son apparition pour les modèles mono domaines. D'après Voller et Prakash [46], Brent et al [76], Beckermann et Viskanta [48], la formule responsable sur ce phénomène dans le système d'équations est prise en considération dans le terme source d'équation d'énergie. Pour les modèles à deux domaines -où les deux phases liquide et solide sont séparées-le changement de phase est pris en considération comme étant une condition à l'interface de solidification. Dans ce cas, d'après Brown et Kim [56], le nombre de Stefan est remplacé par le nombre de Peclet déterminé en fonction de la vitesse de tirage.

Le signe du rapport des poussées d'Archimède  $N$  dépend fortement de la nature des alliages métalliques et de leurs dopants. Dans le cas où le soluté est plus lourd que le solvant, Sn-pb [79] et HgCdTe [56], les coefficients d'expansion thermique et solutal sont de signe différent. Par conséquent, le rapport de poussées est négatif. Dans le cas contraire où le solvant est plus lourd que le soluté, on cite l'exemple de l'alliage GaInSb où les deux coefficients d'expansion thermique et solutal sont positifs [58].

En solidification sous champ magnétique, le nombre de Hartmann fait son apparition. La valeur de ce paramètre dépend fortement de l'intensité de convection dans le bain. Dans l'étude antérieure de Sampath et Zabaras [80],  $Ha$  varie de 0 à 400 pour une valeur de Rayleigh égale à  $8.2 \times 10^4$ . Ces considérations, nous ont amené à évaluer la contribution du nombre de Hartmann tout au long de nos simulations.

Dans un premier temps, nous analysons le phénomène de transfert de chaleur dans une configuration annulaire de type Bridgman divisée en trois zones ; chaude, profil de température et froide, où les résultats sont comparés avec des résultats expérimentaux fournis par l'unité de Développement et Technologie du Silicium (UDTS). Par la suite, nous nous intéressons au transfert de chaleur et de masse en présence du changement de phase sans et sous l'effet électromagnétique.

## II. TRANSFERT DE CHALEUR DANS UN FOUR DE TYPE BRIDGMAN VIDE

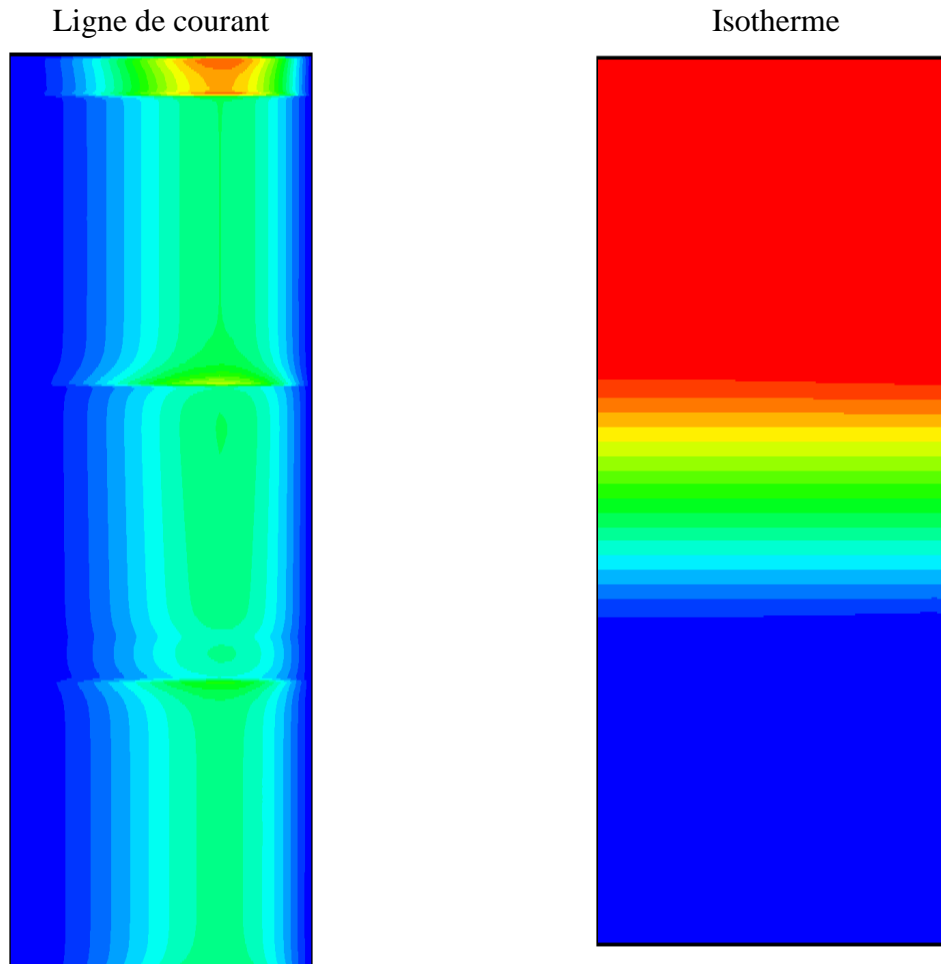
Nous présentons maintenant nos résultats concernant une cavité cylindrique de rapport de forme égale à 36 (pour une longueur de 500 mm et un rayon de 14 mm) divisée en trois zones :

- Chaude de température  $T_{hot}$  et de longueur adimensionnelle égale à 13.
- Zone du profil de température linéaire de longueur adimensionnelle égale à 11.5 et d'équation  $T(z) = -a \times z + b$ , avec  $a$  et  $b$  sont donnés expérimentalement.
- Zone froide de température  $T_{cold}$  et de longueur 11.5.

La région chaude a été constituée d'un cordon de kanthal chauffant enroulé au tube intérieur. La création du profil de température entre les deux zones se fait par le décalage du bobinage de la résistance où la température est surveillée par un thermocouple et réglée par un régulateur intégré dans le circuit. Notre étude numérique a été basée sur les données expérimentales obtenues au sein de l'UDTS.

Nous nous limiterons à la représentation des structures de l'écoulement et des isothermes à l'intérieur d'un four de type Bridgman vide à un nombre de Rayleigh  $Ra = 3 \times 10^5$  pour un écart de température  $\Delta T = T_{hot} - T_{cold}$  égale à  $80^\circ C$ . L'étude du phénomène de transfert de chaleur du problème physique proposé a nécessité l'application du code de calcul pour les groupements adimensionnels suivant ;  $GR_2 = 0$  et  $GR_4 = 0$  avec  $\varepsilon = 0$ .

Nous retrouvons sur la figure V.1 pour un rapport de forme  $A = 36$ , l'écoulement purement thermique est multicellulaire. D'après les valeurs des isocourants on constate qu'à un nombre de Rayleigh  $Ra = 3 \times 10^5$ , l'écoulement est très faible. La cavité tend alors vers une stratification verticale en température et le transfert de chaleur est pratiquement diffusif avec des isothermes sensiblement horizontales.



$$Ra = 3 \times 10^5, 10^{-3} \times \psi : (0, 0.1, 2)$$

Figure V.1 : Ligne de courant et isothermes en convection naturelle purement thermique dans un four de type Bridgman.

Dans le but de comparer les résultats numériques avec ceux de l'expérimental, la représentation de la distribution de température sur les deux figures V.2 et V.3 est faite en dimensionnel. La superposition des profils de température axiaux en plusieurs positions radiales confirme que le mode de transfert de chaleur est régit par la conduction (figure V.2).

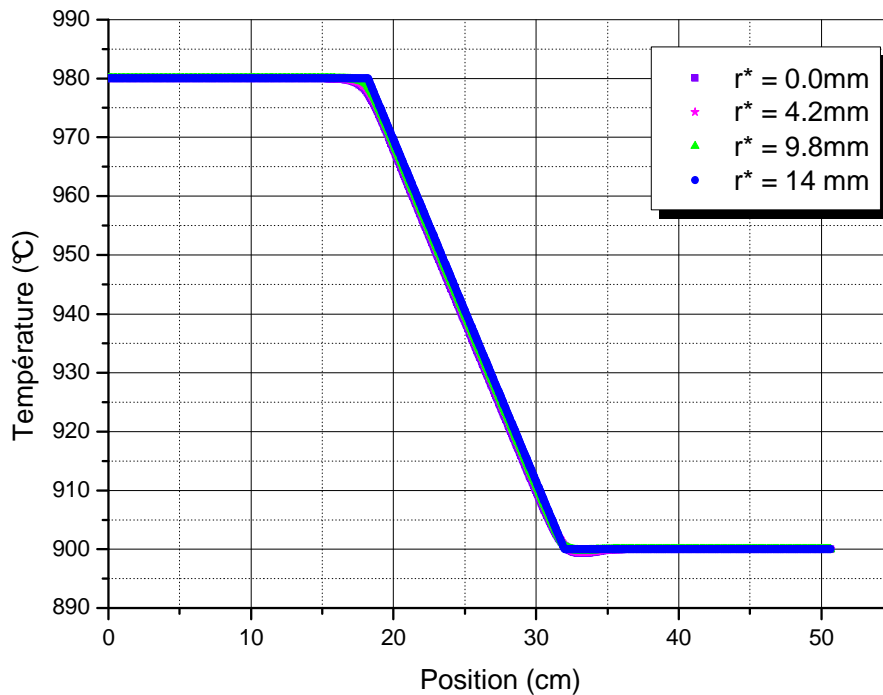


Figure V.2 : La répartition de la chaleur verticale en plusieurs positions radiales

En réalité, une zone de température constante n'est jamais obtenue. Notre comparaison a été focalisée sur la zone du profil de température expérimental. Les résultats exposés sur la figure V.3 représentent une erreur de 11 %. Cet écart entre les deux profils de température est dû à la non-uniformité du flux de chaleur imposé à la surface latérale au four expérimental ainsi qu'au phénomène de rayonnement non- considéré dans nos calculs.

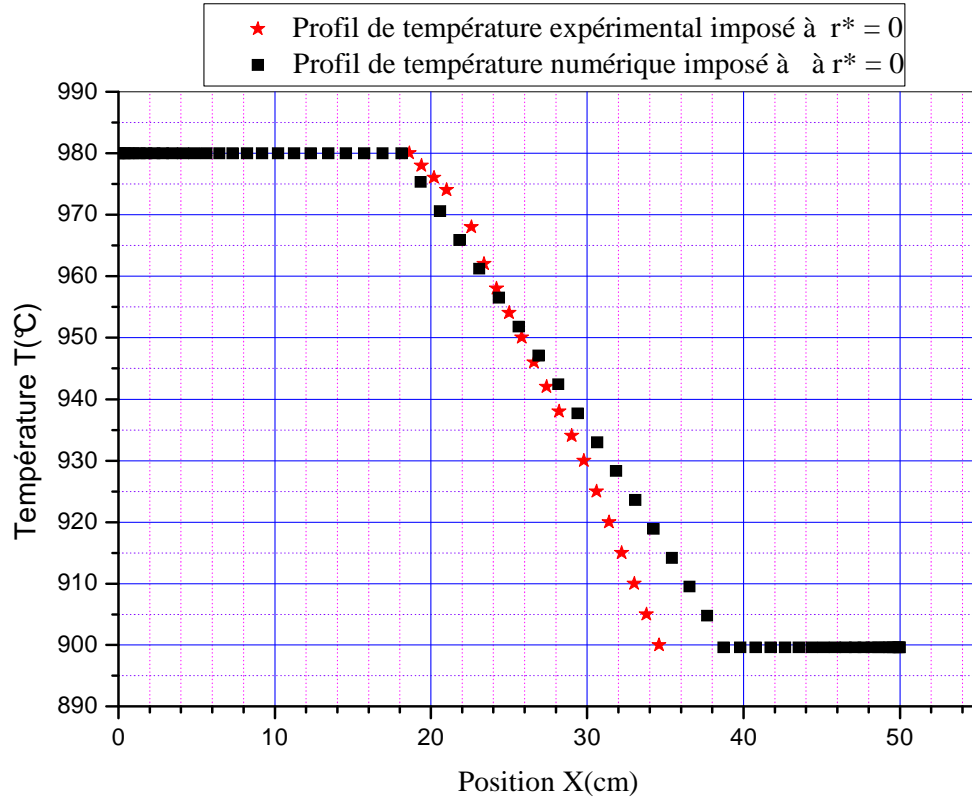


Figure V.3 : Comparaison entre les profils de température: expérimental et numérique au centre du four

L'étude précédente nous a permis de définir une configuration de type Bridgman ainsi que valider notre code avec des résultats expérimentaux fournis par l'équipe CRM11 au sein de l'UDTS.

Dans ce qui suit, on étudie numériquement le transfert de chaleur et de masse pendant le changement de phase d'un métal liquide semi-conducteur exposé à un profil de température linéaire. Le déplacement du bain fondu à une vitesse constante  $\vec{V}_g$  dans la zone du profil de température de longueur  $L_g$  en régime variable est modélisé par la variation du profil de température à la surface latérale du domaine de calcul en fonction du temps.

### III. Le déplacement uniforme du bain dans le four

#### III. 1. Effet du nombre de Rayleigh thermique

Pour des raisons de solubilité, il arrive souvent que le soluté s'incorpore difficilement dans une des deux phases (la phase solide en général). Ainsi au cours de la solidification, le solide rejette le soluté en avant du front de solidification, cela a pour conséquence d'augmenter la concentration dans le bain liquide. Le lingot n'étant pas infini, il y aura une accumulation en soluté dans le bain liquide. Ainsi, une partie du lingot solidifiée dans les premiers temps aura une composition plus pauvre qu'une partie solidifiée plus tardivement. On comprend aisément que la ségrégation, phénomène intrinsèque de la solidification des alliages métalliques, est gênante dans la mesure où elle est source d'hétérogénéité de composition des lingots ainsi obtenus. Les ségrégations sont particulièrement influencées par les phénomènes convectifs.

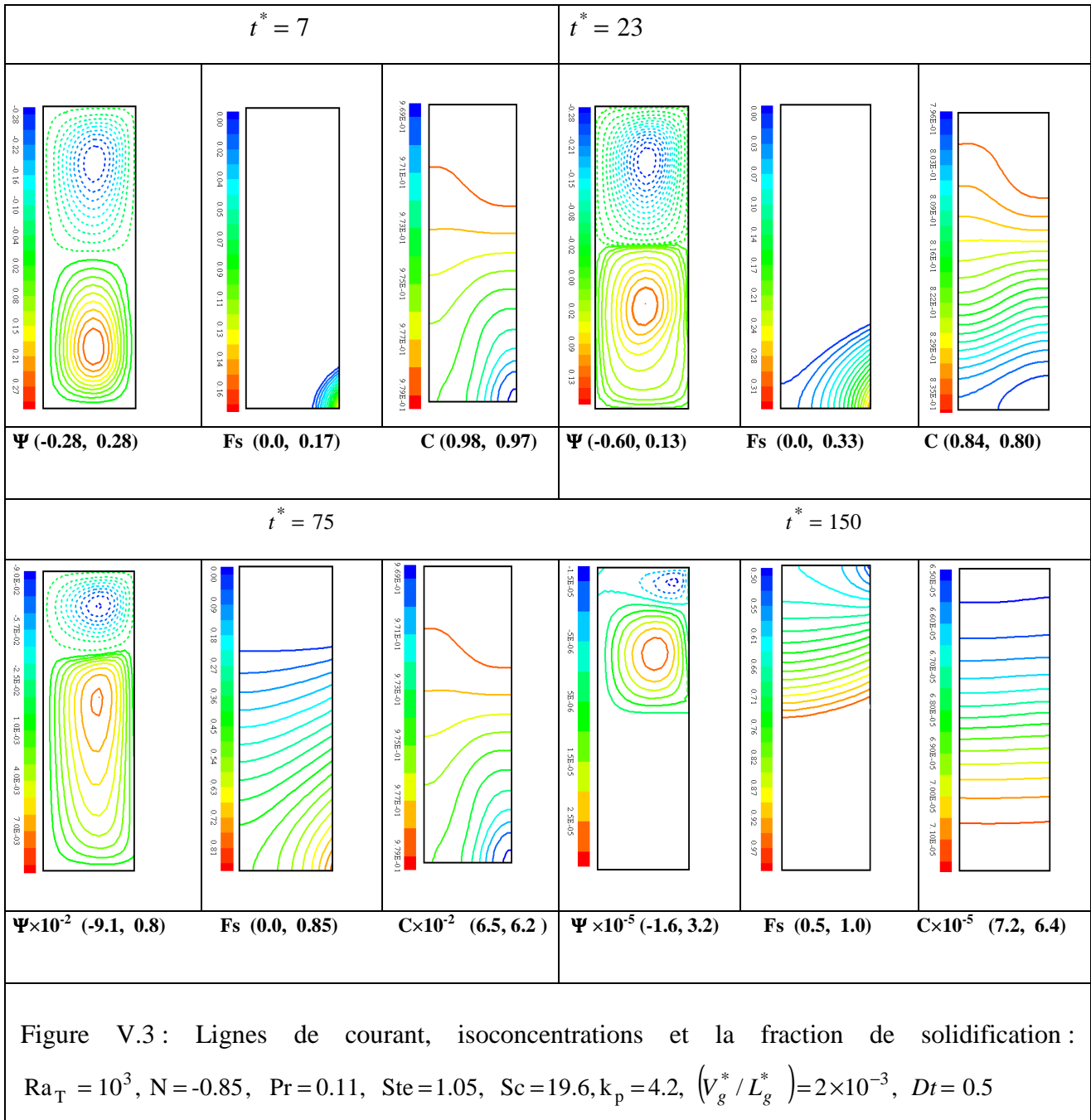
Pour étudier l'effet du nombre de Rayleigh thermique en convection thermosolutale en présence du changement de phase, nous avons choisi un cas typique où les forces d'Archimède thermique et solutale s'opposent avec un rapport  $N = -0.85$ . La variation du nombre de Rayleigh thermique se situe dans la plus parts des cas entre  $10^3$  et  $10^6$ . Le cas extrême envisagé ( $Ra_T = 10^6$ ) correspond à une convection solutale où le nombre de Rayleigh équivalent est élevé ( $Ra_s = -8.5 \times 10^6$ ). Une telle valeur du nombre de Rayleigh est envisageable sans pour autant dépasser le régime laminaire, car comme l'indiquent El Ganaoui et al [81], le signal temporel de la fonction de courant devient apériodique et le bain fondu devient siège d'un régime complexe. Bejan et Lage [82] indiquent que la transition en régime turbulent dépend principalement du nombre de Grashof et non pas du nombre de Rayleigh. Cette transition se produit à des nombres de Grashof de l'ordre de  $10^8$ . Par conséquent, nous admettons dans nos simulations que l'écoulement est laminaire.

La convection naturelle double diffusive est un phénomène très important dans le processus de solidification verticale où les écoulements ; thermique et solutal sont entraînés par un gradient de température axial dans la direction du processus de solidification verticale. Le soluté rejeté à l'interface est moins lourd que le solvant, donc le nombre de Rayleigh solutal dans ce cas est négatif.

Au cours du changement de phase des alliages métalliques caractérisés par des diagrammes de phase, on constate l'apparition de trois zones pendant le processus : liquide, pâteuse et solide. La partie liquide est définie par  $F_s = 0$ , pâteuse par  $0 < F_s < 1$  et  $F_s = 1$  pour la région solide. La modélisation du phénomène de solidification en régime variable nous a permis de poursuivre le processus dans le temps et voir l'évolution des trois régions (voir figure V.3).  $At^* \leq 7$ , l'écoulement est bicellulaire et symétrique. Cette symétrie est provenue par le mouvement uniforme du bain dans la zone du profil de température.  $At^* > 7$ , la fraction du solide croît, la zone pâteuse se développe et l'écoulement devient dissymétrique. On remarque que l'intensité de l'écoulement positif s'affaiblit et sa cellule s'allonge verticalement dans la cavité avec le développement de la zone pâteuse. En revanche, l'écoulement négatif se rétrécit où il n'occupe plus que le voisinage de la paroi supérieure. Dans ce cas, on a les iso concentrations qui prennent une forme en « S » et qui la gardent jusqu'à  $t^* = 75$ .

$At^* = 150$ , lors de la disparition du liquide et l'apparition de la zone solide. L'écoulement devient très faible ainsi que le rejet du soluté à l'interface (zone pâteuse/solide). Cela résulte un champ de soluté faible et une stratification horizontale en concentration.

D'après ce qui a précédé, on conclut que pour un écart de température entre les deux zones ; chaude et froide  $\Delta T$  égale à 80 qui correspond un nombre de Rayleigh thermique ( $Ra_T = 10^3$ ), l'écoulement thermique dans le bain fondu est faible et l'écoulement solutal est nettement dominant. Dans ce cas, la cavité tend alors vers une stratification verticale en concentration et le transfert de chaleur est pratiquement diffusif.



Les valeurs des iso courant et le développement morphologique du champ de concentration (voir figure V.4 & V.5) ont montré que pour  $Ra_T > 10^3$ , la convection est bien prononcée et l'écoulement est devenu plus significatif. Nous remarquons que la similitude du champ de concentration n'est plus totalement respectée. Des variations substantielles du gradient solutal

prés de l'interface liquide – zone pâteuse à cause de la structure d'écoulement résultant du développement de la zone pâteuse. Enfin, la convection thermosolutale (solutale pour un soluté léger en bas ou thermique chaud en bas) crée un mouvement hydrodynamique à l'échelle de tout l'échantillon qui entraîne une variation importante de concentration le long de l'échantillon.

A la phase finale de solidification  $t^* > 75$ , on a la disparition totale de la zone liquide ( $F_s = 0$ ) et l'apparition de la zone solide ( $F_s = 1$ ). Cela induit une intensité de convection assez faible qui préserve la stratification horizontale du champ de concentration à des nombres de Rayleigh important.

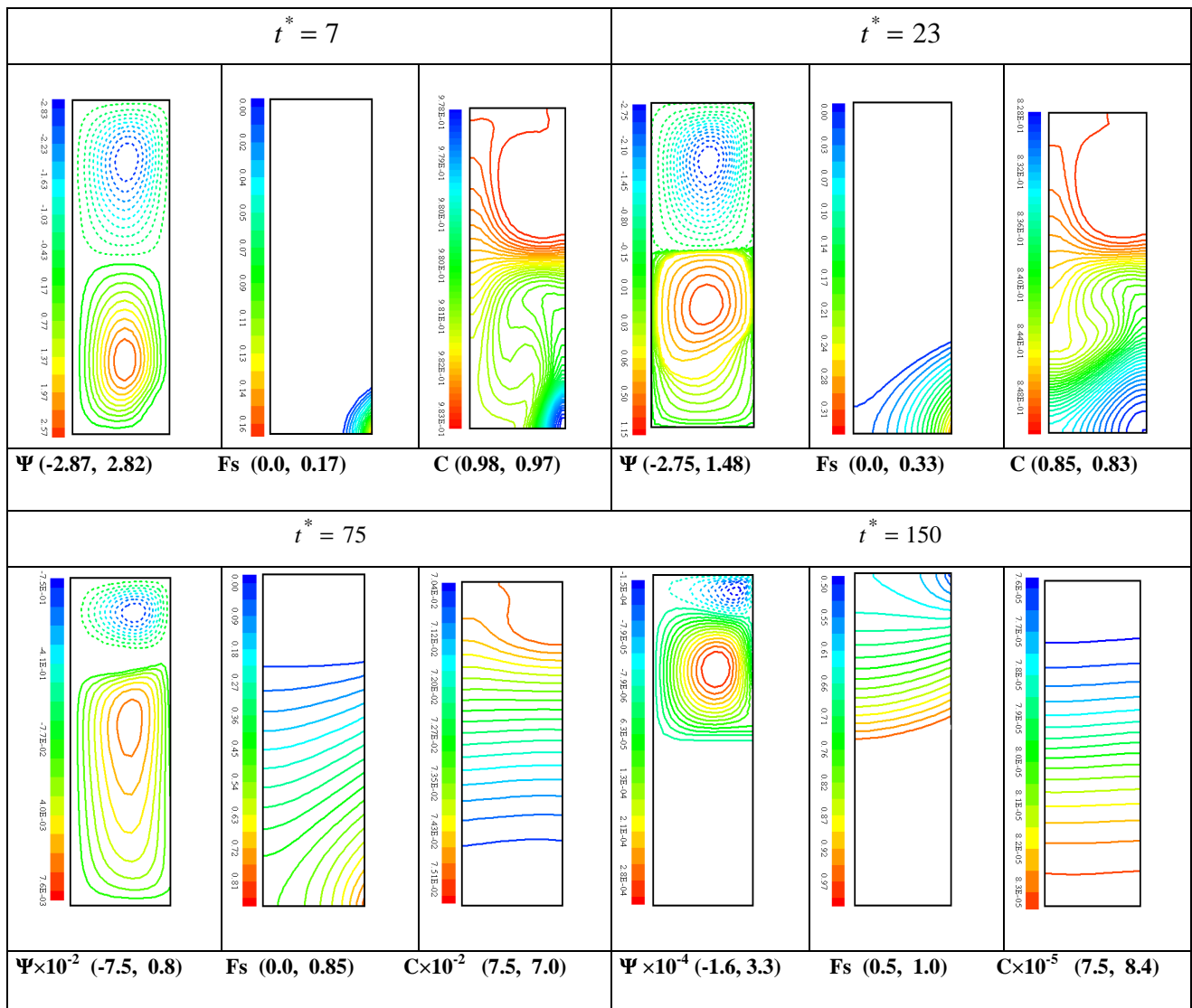
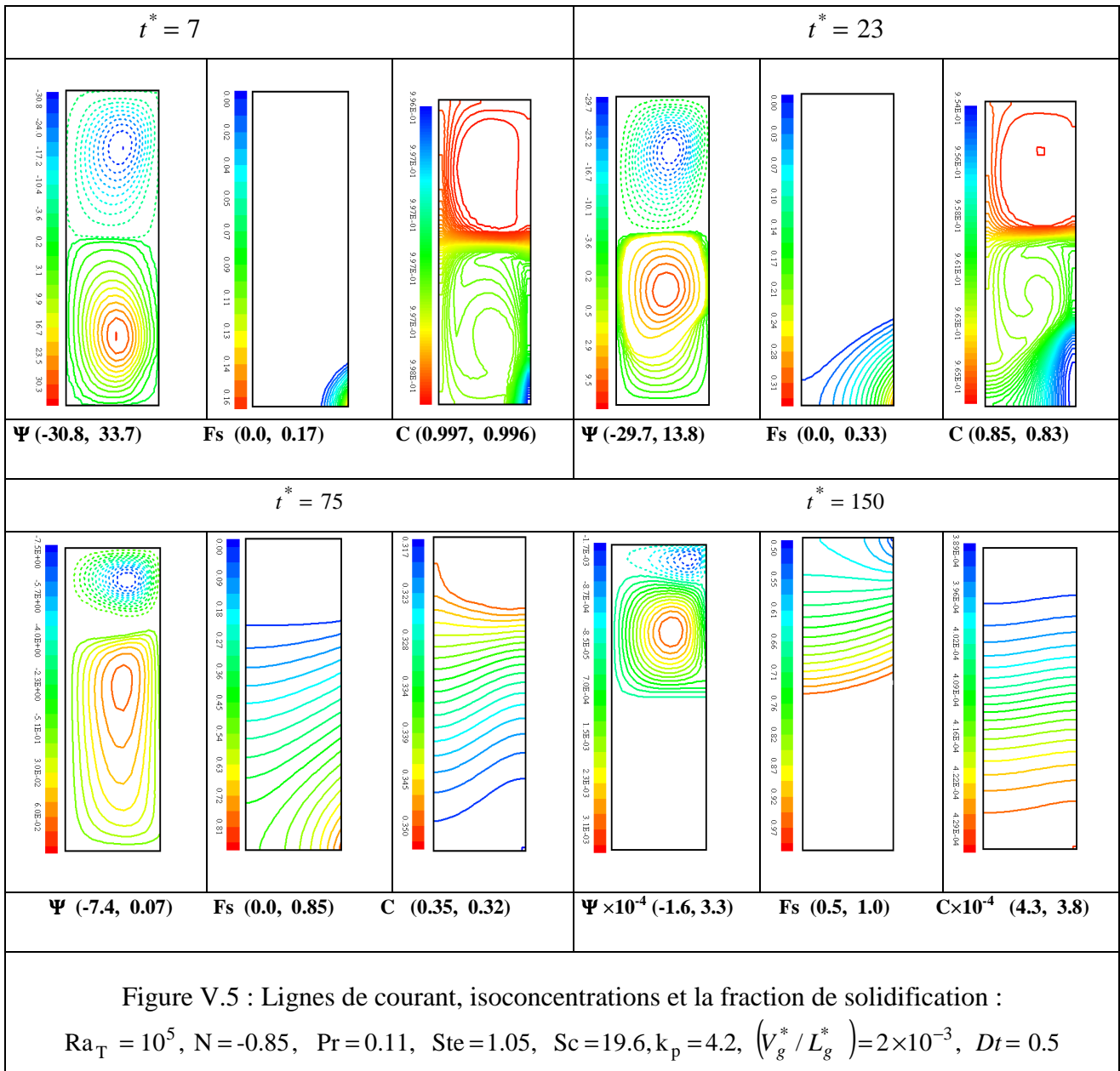


Figure V.4 : Lignes de courant, isoconcentrations et la fraction de solidification :

$$Ra_T = 10^4, N = -0.85, Pr = 0.11, Ste = 1.05, Sc = 19.6, k_p = 4.2, \left( V_g^* / L_g^* \right) = 2 \times 10^{-3}, Dt = 0.5$$



Une augmentation du nombre de Rayleigh se traduit par l'augmentation de l'écart de température entre les deux zones ; chaude et froide. Ce qui intensifie la convection dans la phase liquide où les mouvements hydrodynamiques ont une influence importante sur la structure du produit solidifié ainsi que sur la ségrégation (c'est-à-dire les inhomogénéités de composition au sein du matériau solide). Lorsqu'ils sont naturels ces mouvements sont engendrés par la convection thermosolutale due aux gradients de température et de concentration.

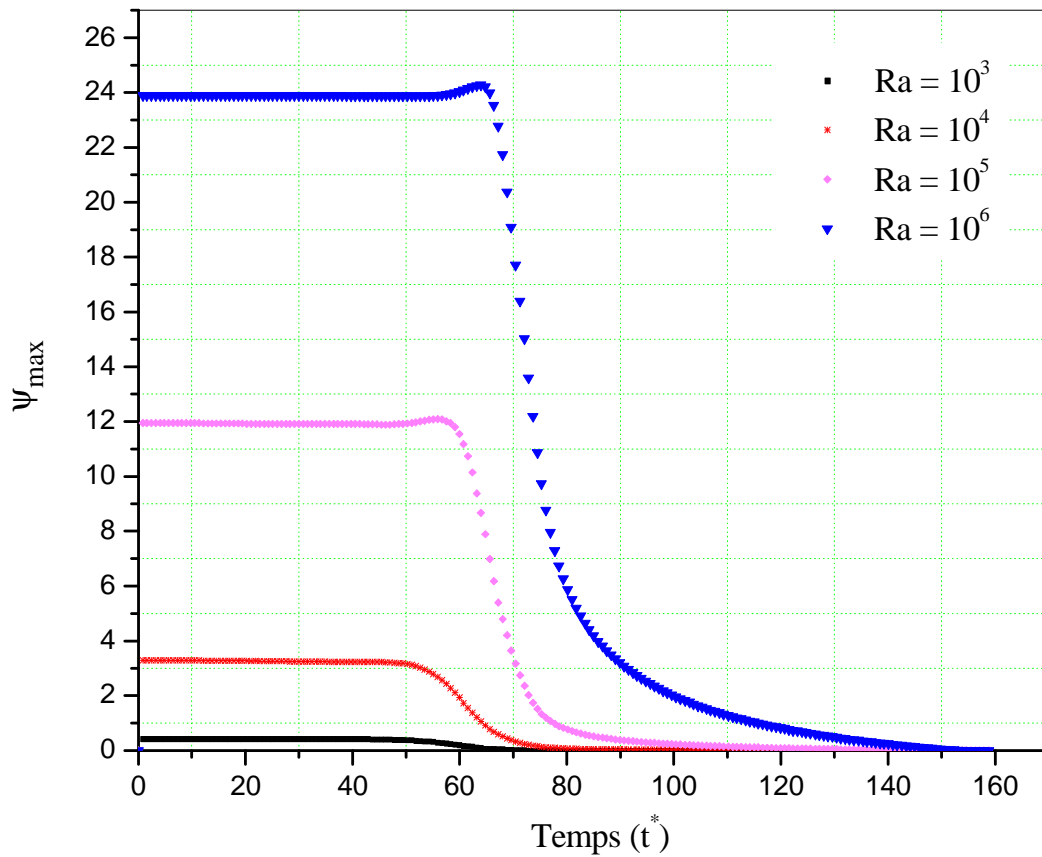


Figure V.6: L'écoulement maximal en fonction du nombre de Rayleigh

$Ra_T = 10^5$ ,  $N = -0.85$ ,  $Pr = 0.11$ ,  $Ste = 1.05$ ,  $Sc = 19.6$ ,  $k_p = 4.2$ ,  $(V_g^* / L_g^*) = 2 \times 10^{-3}$ ,  $Dt = 0.5$

L'évolution de l'écoulement dans le bain fondu est présentée sur la figure V.6 par la fonction de courant pour plusieurs nombres de Rayleigh. Au début de la croissance, l'écoulement est maximal dans la zone liquide. On remarque que plus  $Ra$  est important autant la durée de convection est importante dans le bain. A  $t^* > 90$  la zone liquide se minimise avec le temps et la valeur de la fonction de courant chute vers une valeur nulle. Par conséquent, le développement du phénomène de solidification réduit l'écoulement dans le bain fondu jusqu'à ce qu'il s'annule complètement.

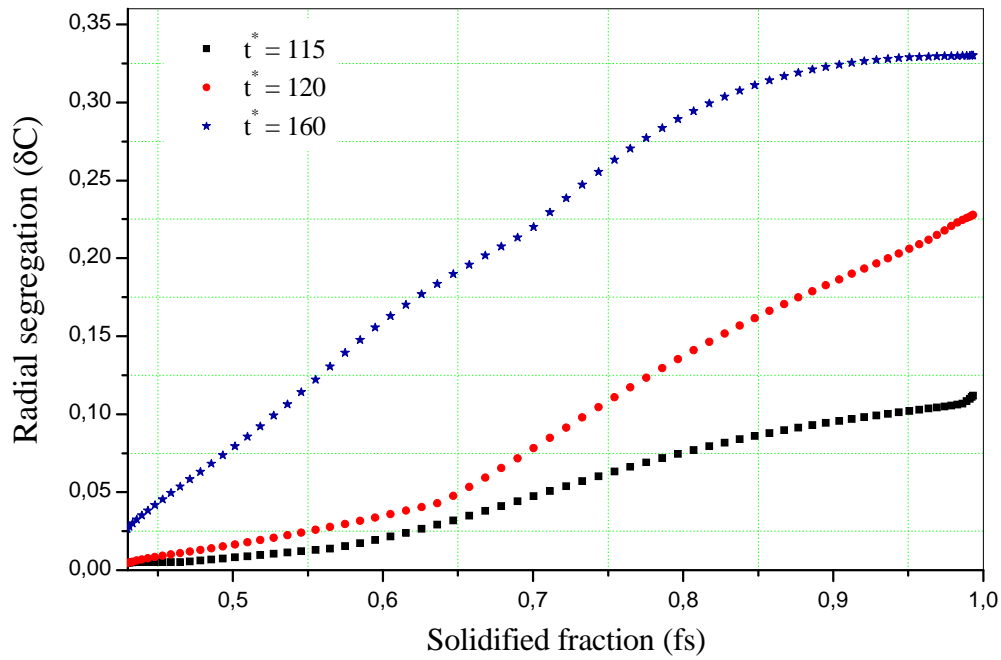


Figure V.7 : Ségrégation radiale en fonction de la fraction solidifié à  $Ra_T = 8 \times 10^5$

Les ségrégations radiales sont présentées sur la figure V.7 en fonction du temps à  $Ra_T = 8 \times 10^5$  où la convection dans le bain est assez importante. On observe des variations de concentration radiales faibles à  $t^* = 115$  par rapport à celles à  $t^* = 150$ . La compétition entre la convection dans la partie liquide et la filtration massique du soluté dans la zone pâteuse pour des grands nombres de Rayleigh donne naissance à une structure de transfert de masse complexe à l'interface (liquide-zone pâteuse). Ce phénomène devient important avec le développement de la zone pâteuse, ce qui résulte l'amplification des ségrégations radiales avec le temps.

Les résultats numériques obtenus sont comparés avec les prédictions de Kaddeche et al [59] pour un régime convectif :

$$\delta C = 1.1(1 - k_p) Pe Gr^{-1/9} Sc^{-2/9} \tag{V.1}$$

Nous retrouvons sur la figure V.8 pour  $t^* < 17$ , une superposition parfaite des résultats obtenus numériquement avec les valeurs calculés par la formule de Kaddeche et al [59] où le régime de transfert de chaleur est purement convectif. A  $t^* \geq 17$ , le régime convectif diminue avec la réduction de la zone liquide et le régime diffusif augmente avec le développement de la zone pâteuse. Par conséquent il est difficile de satisfaire la formule de Kaddeche et al [59] pour  $t^* > 20$ .

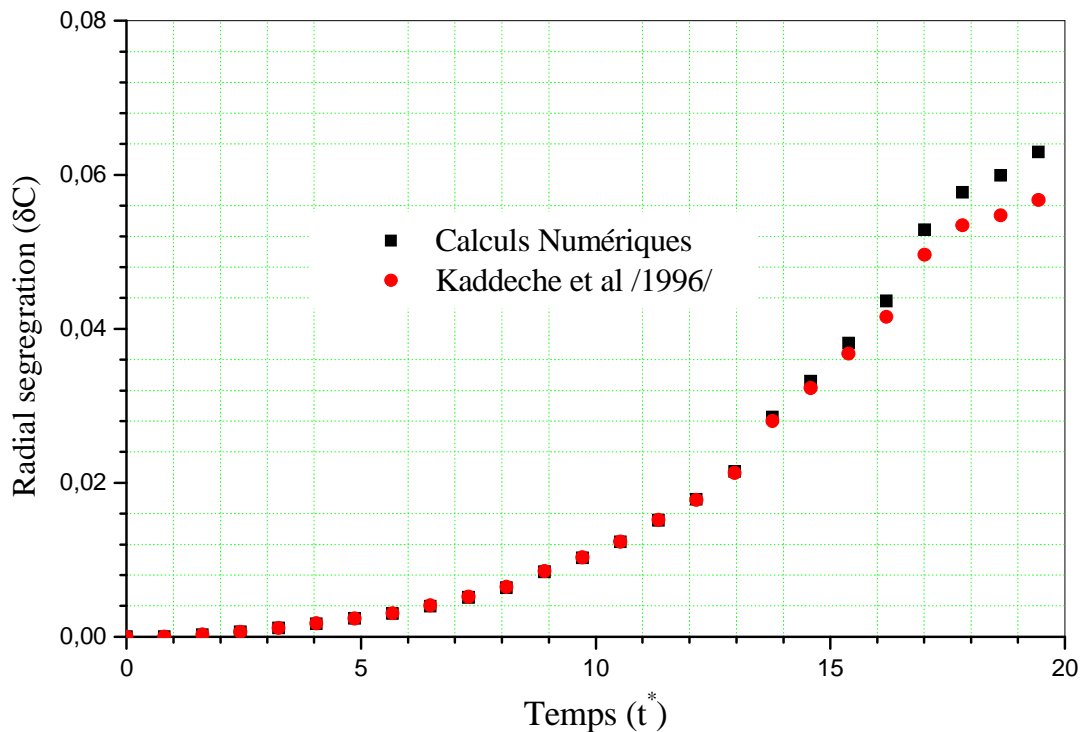


Figure V.8 : Evolution des ségrégations radiales à  $Ra_T = 8 \times 10^5$ .

Comparaison des résultats numériques et théoriques calculés par la formule de Kaddeche et al [59] pour un régime convectif.

On constate que l'écoulement complexe influe directement sur le rejet de soluté à l'interface « liquide-zone pâteuse » et engendre des hétérogénéités de composition dans le produit final. La vitesse du fluide entrant dans la zone pâteuse influe directement sur les conditions de solidification, en effet lorsque le fluide entre dans la zone pâteuse, il introduit un liquide plus chaud et plus riche en soluté. Dans le cas d'une configuration où le champ magnétique impose un mouvement dirigé vers le bas au centre de l'échantillon, il apparaît une couche visqueuse sur le bord de l'échantillon dans laquelle le liquide est dirigé vers le haut. De plus, la taille de cette couche visqueuse diminue lorsque le niveau de convection augmente laissant ainsi une place de plus en plus grande à la région centrale où le liquide est entrant. Ce résultat a été observé dans les expériences de Zaïdat [83].

L'utilisation d'un champ électromagnétique pour contrôler les écoulements dans le bain et la répartition du soluté dans le Crystal dans le cas des alliages métalliques est devenue un moyen privilégié et a déjà fait l'objet de plusieurs expériences et d'applications industrielles. En effet, avec un champ électromagnétique, il est possible d'agir sur les écoulements sans aucun contact physique et réduire le taux de convection dans le bain.

### III. 2. L'effet d'application d'un champ magnétique axial

Dans le cadre de cette thèse nous avons proposé d'augmenter l'intensité d'induction électromagnétique pendant la solidification d'alliage métallique en utilisant un champ magnétique permanent. Il est bien connu que l'application d'un champ magnétique dans la direction de solidification réduit l'écoulement dans le bain fondu. Cela est clairement démontré à travers l'étude faite par Samanta et Zabarar [84] sur l'intensité de l'écoulement dans le bain en fonction de l'intensité du champ magnétique appliqué. Dans ce but, on fixe le nombre de Rayleigh thermique à  $Ra_T = 8 \times 10^5$  et on fait varier le nombre de Hartmann.

D'après les figures V.9 et V.10, on constate que l'effet électromagnétique est localisé quantitativement sur l'écoulement et qualitativement sur le champ de concentration du soluté et qu'il n'a aucune influence sur la fraction solidifiée. Les iso-courants deviennent très serrés à l'horizontale et leurs valeurs baissent au fur et à mesure avec l'intensité du champ magnétique

appliqué. D'autre part, on remarque que les iso concentrations s'approchent vers une bonne stratification horizontale.

Xi Li et al [85] ont montré l'existence à l'intérieur de la zone pâteuse d'un courant thermoélectrique associé au champ magnétique permanent, donne naissance à une force de Laplace d'origine thermoélectrique. Cette force engendre un mouvement à l'intérieur de la zone pâteuse qui reste relativement localisé. Les travaux de Lehmann et al [36] montrent que l'apparition d'un champ magnétique uniforme permet d'éviter la ségrégation dans deux alliages Cu-Ag et Al-Cu en contrebalançant la convection naturelle à l'intérieur de la zone pâteuse. Un autre exemple d'effet sur la macro ségrégation est étudié par Tawari et al [86] dans le cas de l'alliage Pb-Sn 18%pds, pour lequel le déclenchement de phénomènes instables de type Rayleigh-Bénard dans la zone pâteuse, phénomènes qui conduisent à la mise en place concomitante de canaux ségrévés (formation de freckles) et de macro ségrégations longitudinales peuvent être supprimée en limitant la convection naturelle.

Ces études montrent l'importance de l'orientation du champ par rapport à la direction de croissance pour que l'effet de freinage soit effectif. De plus, cette technique est tributaire du pouvoir thermoélectrique des composés d'alliages métalliques et que les études citées ci-dessus ont été faites avec des alliages possédant une assez grande différence de pouvoir thermoélectrique.

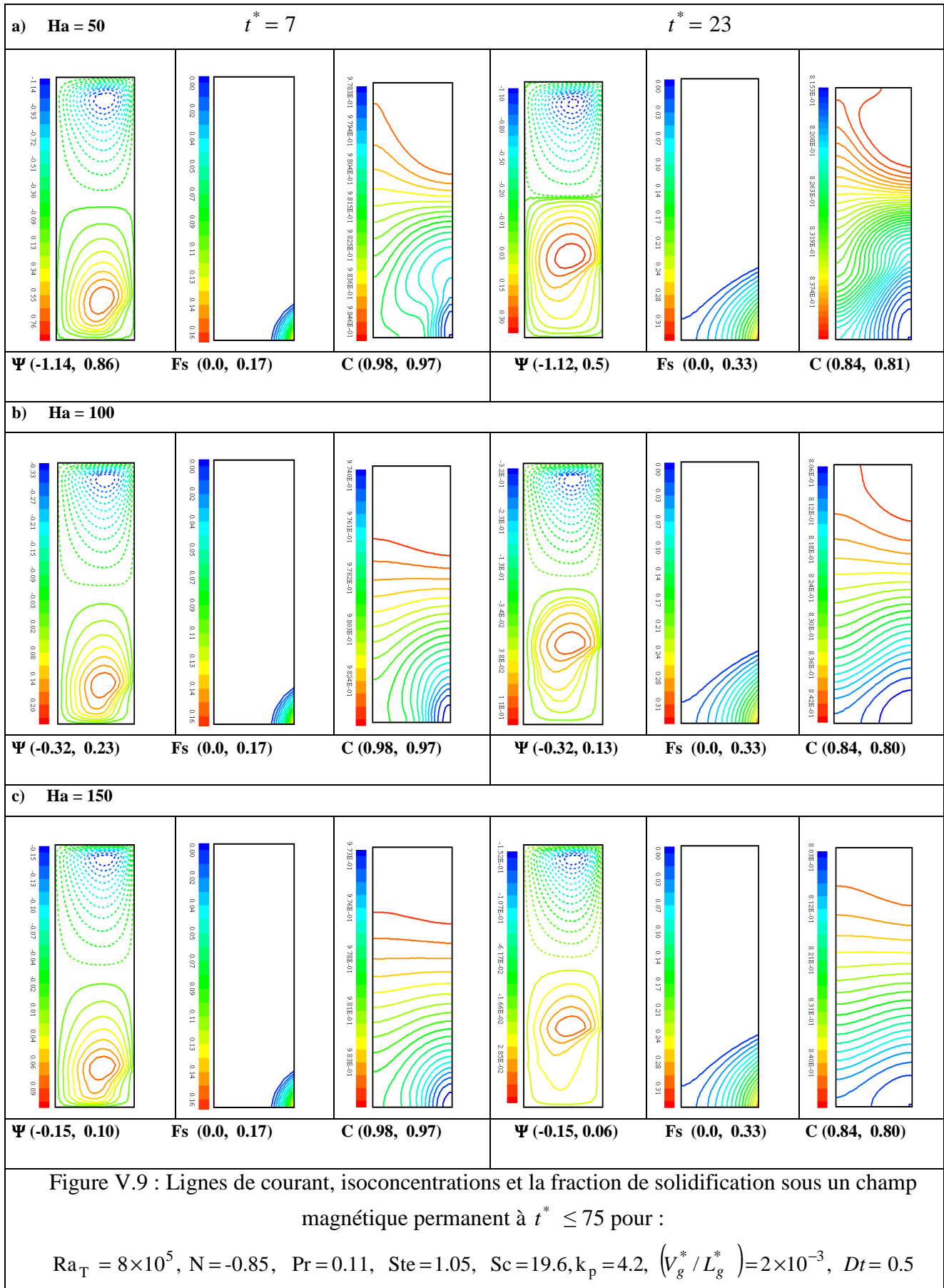
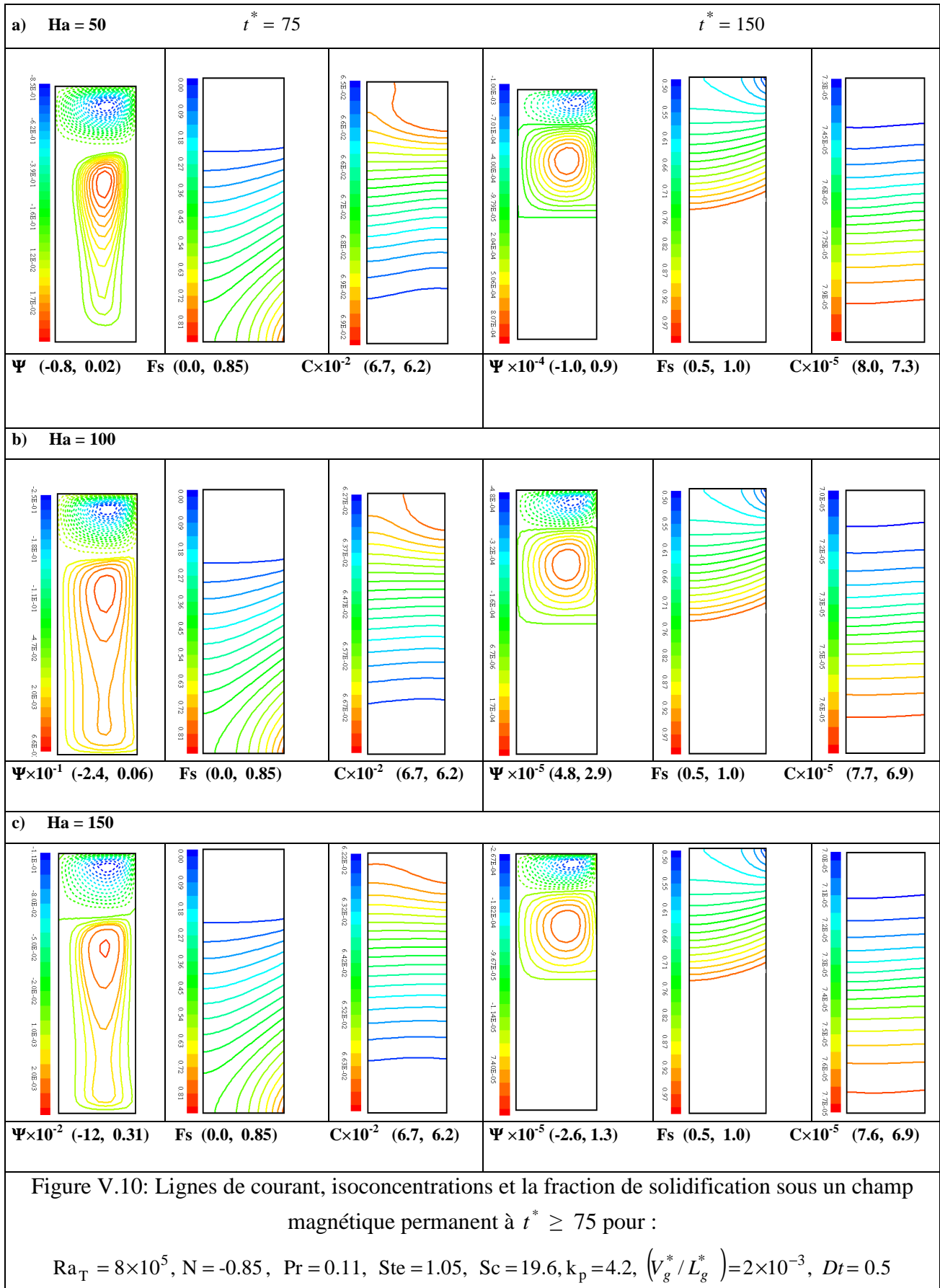


Figure V.9 : Lignes de courant, isoconcentrations et la fraction de solidification sous un champ magnétique permanent à  $t^* \leq 75$  pour :

$$Ra_T = 8 \times 10^5, N = -0.85, Pr = 0.11, Ste = 1.05, Sc = 19.6, k_p = 4.2, \left( V_g^* / L_g^* \right) = 2 \times 10^{-3}, Dt = 0.5$$



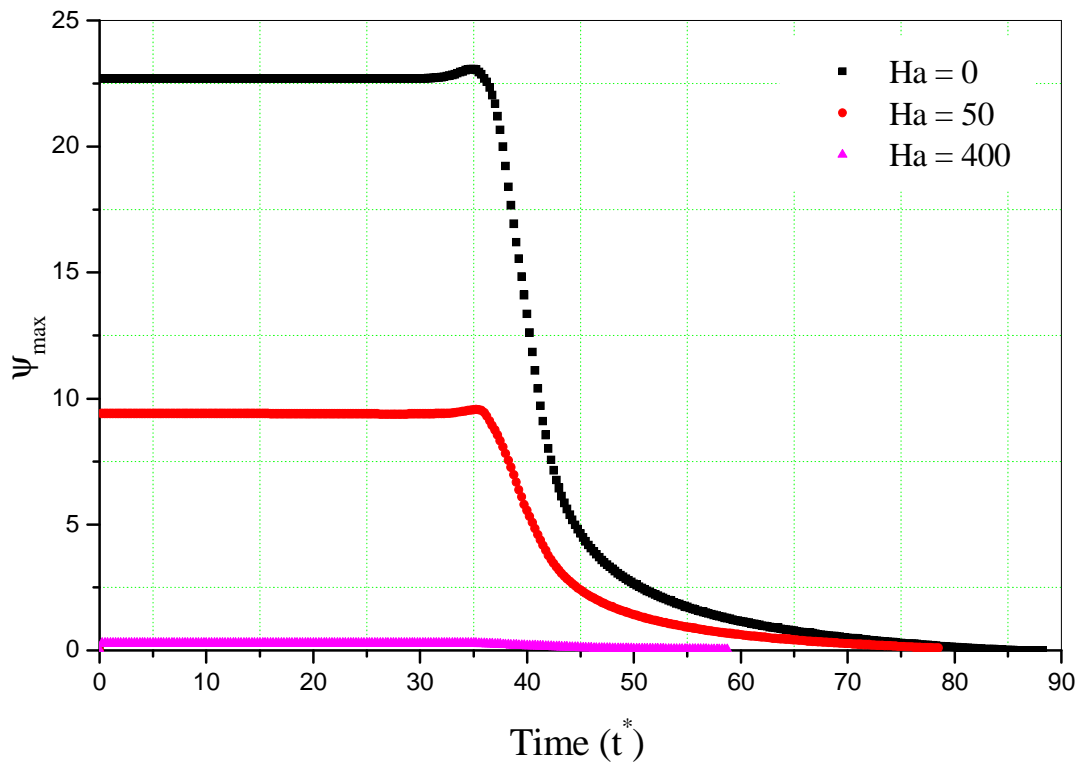


Figure V.11: L'évolution de l'écoulement maximal en fonction du nombre de Hartmann

$$Ra_T = 8 \times 10^5, N = -0.85, Pr = 0.11, Ste = 1.05, Sc = 19.6, k_p = 4.2, \left( V_g^* / L_g^* \right) = 2 \times 10^{-3}, Dt = 0.5$$

La compétition entre les forces d'Archimède et de Laplace pour des grands nombres de Hartmann donne naissance à une structure d'écoulement faible dans le bain fondu (voir figure V.11). Des calculs effectués pour  $Ra_T = 8 \times 10^5$ , ont montré que les échanges de chaleur et de masse diminuent constamment quand  $Ha$  augmente. Pour de valeurs importantes de  $Ha$ , la circulation est faible et le champ de concentration est du type diffusif. Par conséquent, une stratification solutale se forme. Cette stratification horizontale tend à diminuer les ségrégations radiales à l'interface de solidification (voir figure V.12).

D'après C.W.Lan et al [87], l'effet électromagnétique peut réduire l'écoulement provoqué par les poussées d'Archimède où le transfert de chaleur et les ségrégations des dopants peuvent être contrôlés.

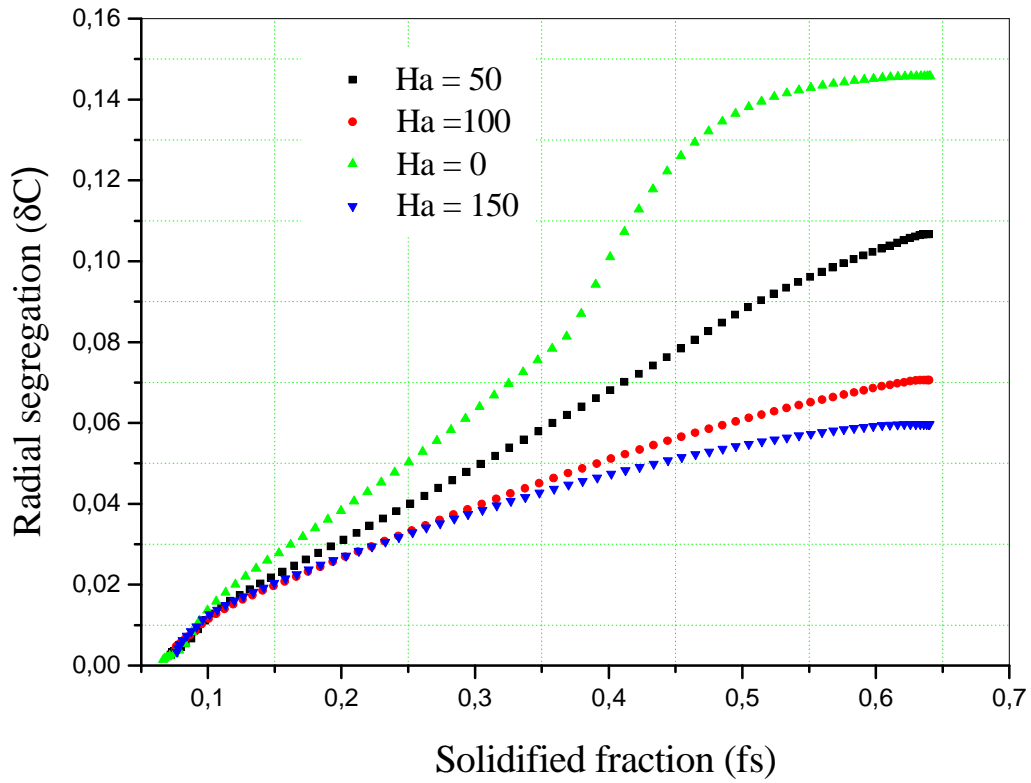


Figure V.12 : les ségrégations radiales à plusieurs inductions magnétiques

$Ra_T = 8 \times 10^5$ ,  $N = -0.85$ ,  $Pr = 0.11$ ,  $Ste = 1.05$ ,  $Sc = 19.6$ ,  $k_p = 4.2$ ,  $(V_g^* / L_g^*) = 2 \times 10^{-3}$ ,  $Dt = 0.5$

### III. 3. L'effet du rapport de forme

La cristallogenèse est réalisée dans une ampoule scellée sous vide. La géométrie de l'ampoule où le bain effectue son changement de phase est un facteur majeur dans la qualité du cristal obtenu. Dans ce but, nous avons proposé d'étudier l'effet du rapport de forme sur l'écoulement dans le bain fondu ainsi que sur les ségrégations chimiques.

D'une façon générale, nous observons qu'en convection naturelle, les cavités à fort allongement vertical  $A > 1$  n'engendrent que des écoulements de faible intensité. En effet, les parois passives (horizontales) sont alors bien moins étendues que les parois actives (verticales). Le transfert thermique se fait essentiellement par conduction tandis que le transfert de masse se fait par convection dans les couches limites très étroites le long des parois actives. Cela permet l'établissement des isoconcentrations en « s », voir figure V.13.

Pour une cavité carrée ( $A = 1$ ), nous avons obtenu deux cellules thermiques et solutales : l'une en haut et l'autre en bas de la cavité. La symétrie obtenue résulte une égalité des deux écoulements, positif et négatif, en valeur absolue.

Pour des rapports d'aspect supérieurs à l'unité, l'écoulement acquies une structure multicellulaire symétrique. Pour  $A = 3$ , on enregistre l'apparition des cellules de circulations faibles qui occupent une petite partie de l'espace annulaire au niveau de l'axe de symétrie. Néanmoins, cette structure disparaît pour un rapport de forme élevé ( $A = 10$ ), figure V.13.

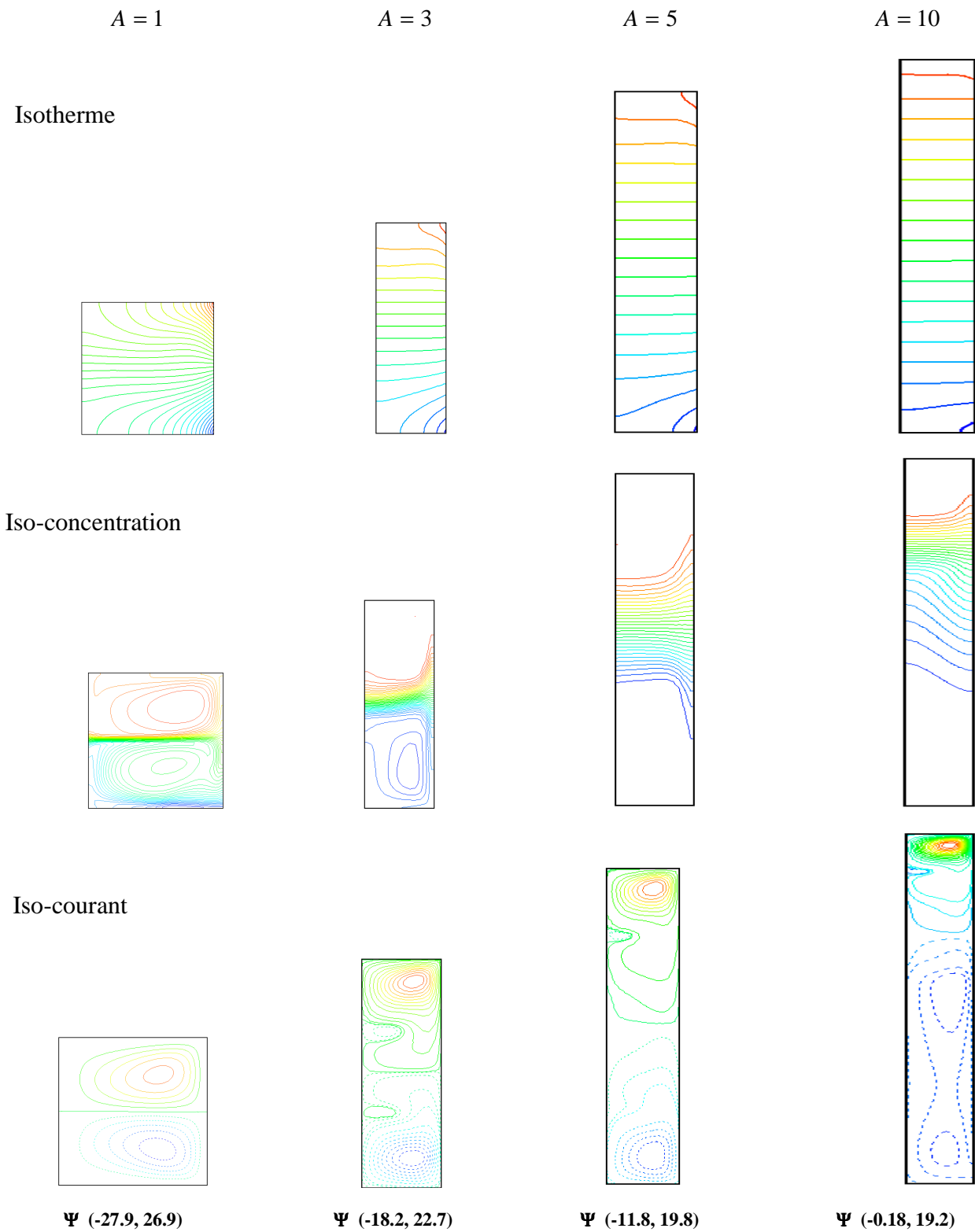


Figure V.13 : Isothermes, isofonctions de courant et isoconcentrations pour différent rapport de forme en convection naturelle à  $t^* = 12$  avec:

$$Ra_T = 8 \times 10^5, N = -0.85, Pr = 0.11, Ste = 1.05, Sc = 19.6, k_p = 4.2, \left( \frac{V_g^*}{L_g^*} \right) = 2 \times 10^{-3}, Dt = 0.5, Ha = 0$$

La figure V.14 illustre le comportement des ségrégations radiales pour différent rapport de forme  $A$ . On constate que  $\delta C$  devient faible avec l'augmentation du rapport de forme. Ce résultat confirme les analyses expérimentales de Plaza et Diéguez [88] faites sur la croissance du Gallium Antimonide par la méthode de Bridgman. Ils ont démontré que l'incorporation des dopants dans des ampoules larges engendre des ségrégations radiales plus que dans le cas des ampoules fines. On conclut que l'allongement de la cavité est un moyen très intéressant pour réduire la convection dans le bain, figure V.15, les ségrégations radiales, figure V.16, ainsi qu'homogénéiser la distribution des dopants dans le produit final.

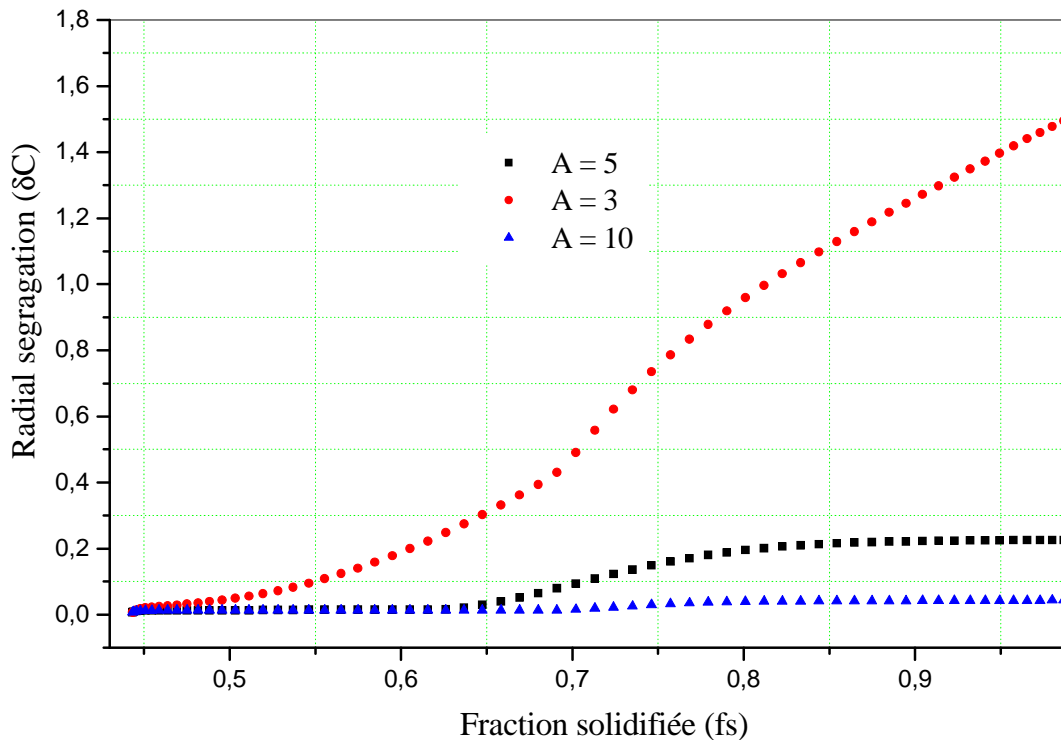


Figure V.14 : Les ségrégations radiales pour différent rapport de forme  $A$  à  $t^* = 118$ .

$$Ra_T = 8 \times 10^5, N = -0.85, Pr = 0.11, Ste = 1.05, Sc = 19.6, k_p = 4.2, \left( V_g^* / L_g^* \right) = 2 \times 10^{-3}, Dt = 0.5$$

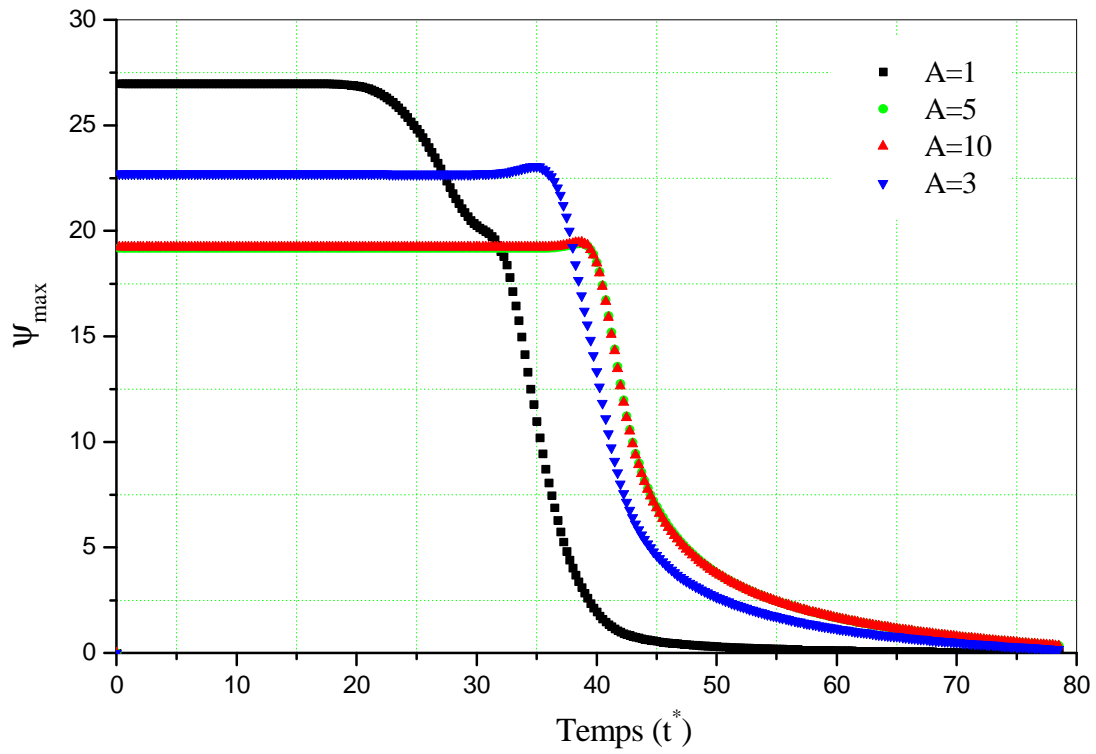


Figure V.15 : L'évolution de l'écoulement maximal pour différent rapport de forme A  
 $Ra_T = 8 \times 10^5$ ,  $N = -0.85$ ,  $Pr = 0.11$ ,  $Ste = 1.05$ ,  $Sc = 19.6$ ,  $k_p = 4.2$ ,  $(V_g^* / L_g^*) = 2 \times 10^{-3}$ ,  $Dt = 0.5$

### III. 4. L'effet du nombre de Stefan

L'évolution de la solidification est présentée en fonction du rapport entre la chaleur latente et la chaleur sensible exprimé par le nombre de Stefan inverse ( $Ste^{-1}$ ).

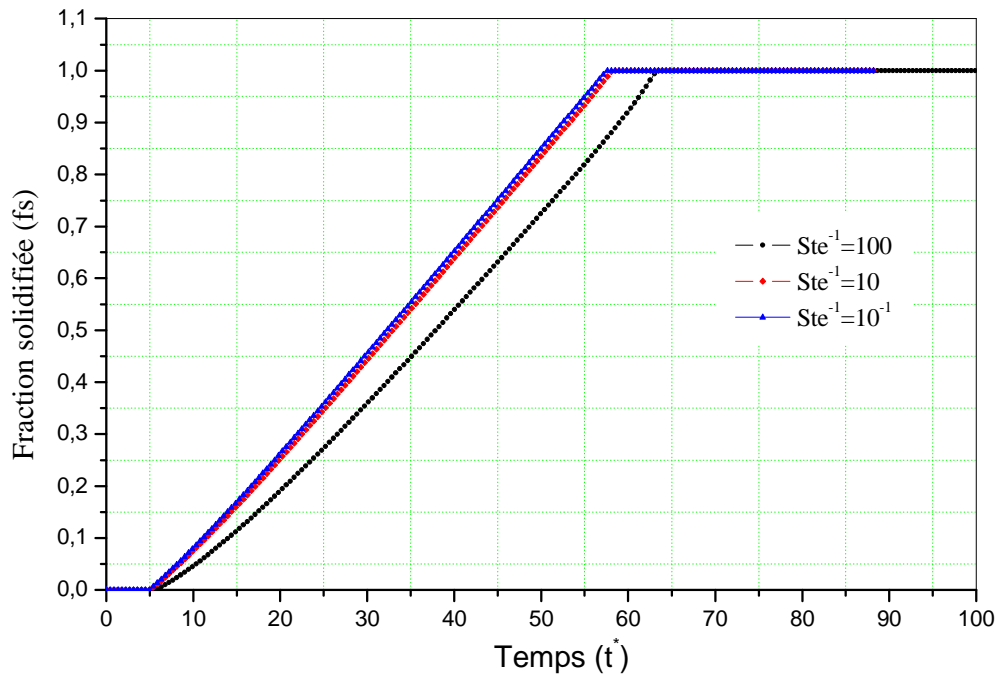


Figure V.16 : Evolution du phénomène de solidification en fonction du nombre de Stefan

$Ra_T = 8 \times 10^5$ ,  $N = -0.85$ ,  $Pr = 0.11$ ,  $A = 3$ ,  $Sc = 19.6$ ,  $k_p = 4.2$ ,  $(V_g^* / L_g^*) = 2 \times 10^{-3}$ ,  $Dt = 0.5$

Nous remarquons que l'augmentation du nombre de Stefan entraîne une diminution dans la fraction solidifiée. Après la phase transitoire, toutes les fractions solidifiées associées à des nombres  $Ste^{-1}$  différents tendent vers 1 où le régime permanent est atteint à la fin du changement de phase. Ce résultat est logique du fait que la solidification engendrée lors d'un grand dégagement de chaleur par le bain liquide ( $Ste^{-1} = 100$ ) est plus lente que celle lors de petites quantités libérées ( $Ste^{-1} \leq 10^{-1}$ ). Bennacer et al [64] ont exposé ce résultat numérique pour le phénomène de fusion par la méthode de floating zone.

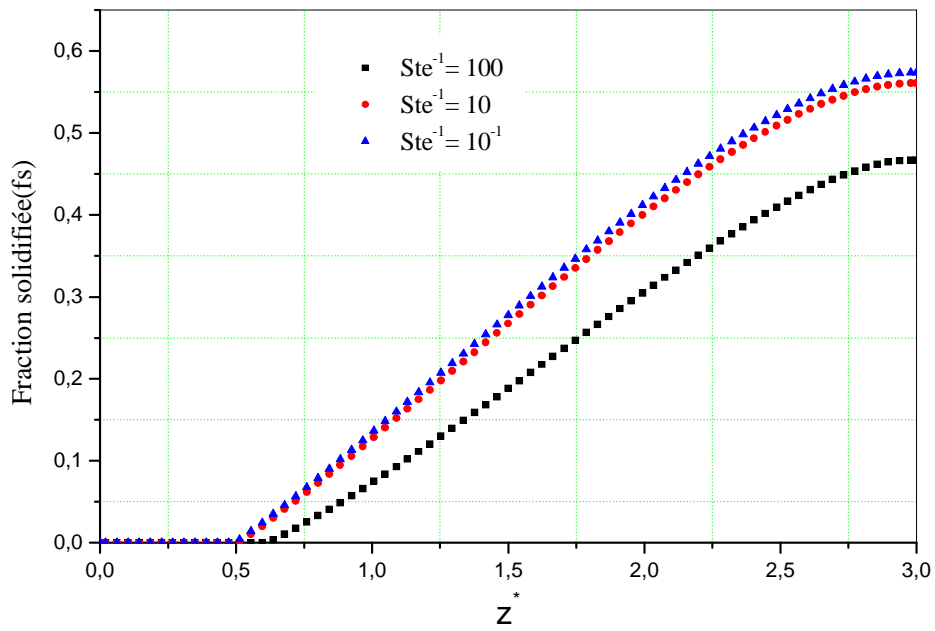


Figure V.17 : Evolution du phénomène de solidification en fonction de la coordonnée axiale à  $t^* = 72$

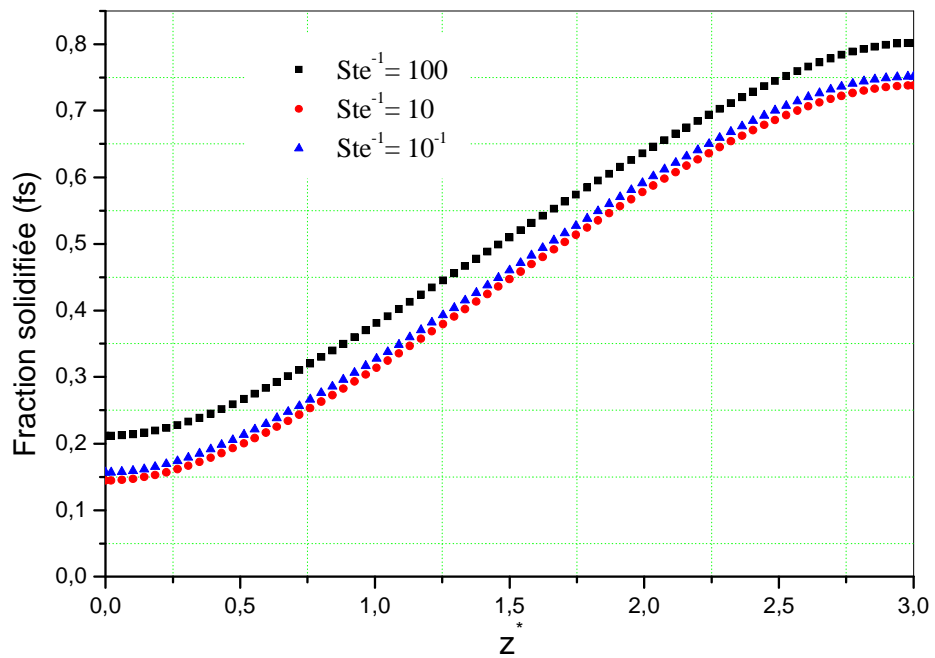


Figure V.18 : Evolution du phénomène de solidification en fonction de la coordonnée axiale à  $t^* = 133$

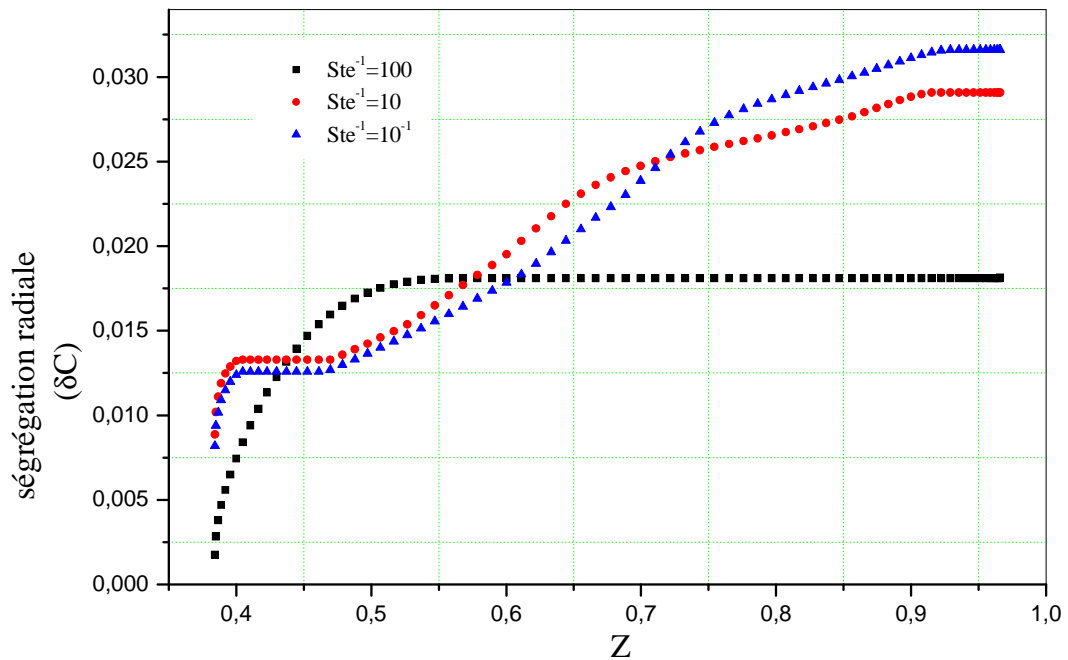


Figure V.19 : Evolution des ségrégations radiales en fonction du nombre de Stefan à  $t^* = 120$

On retrouve sur la figure V.19 l'évolution axiale des ségrégations radiales à plusieurs nombres de Stefan. En changement de phase rapide ( $Ste^{-1} = 10^{-1}$  et  $Ste^{-1} = 10$ ), les ségrégations radiales sont plus prononcées que pour le cas où  $Ste^{-1} = 100$ . Plus le changement de phase est long plus les ségrégations sont moins induites. Tout simplement, à  $Ste^{-1} = 100$ , le changement de phase est plus important que le transfert de chaleur. Et comme c'est le transfert de chaleur par convection qui provoque les ségrégations, donc quand il est réduit les ségrégations seront aussi négligées.

### III. 5. L'effet de la vitesse de tirage

Le régime transitoire est obtenu par le déplacement uniforme du profil de température à la surface latérale du domaine de calcul du bain fondu. Ce mouvement se fait à une vitesse constante de la zone chaude ( $T_h$ ) à la zone froide ( $T_c$ ). Cette vitesse de déplacement définit la vitesse de tirage du bain fondu dans la zone du profil de température.

La maîtrise de la technique de croissance par la méthode de Bridgman nécessite de contrôler précisément le gradient de température et la vitesse de tirage, et de les adapter au matériau à faire croître dans le but d'améliorer la qualité de produit. Pour mieux visualiser l'effet de la vitesse de tirage, on a choisi un cas à faible nombre de Rayleigh où la convection n'a pas une grande influence sur le processus de solidification. Pendant que la vitesse de tirage varie, la longueur de la zone du profil de température est maintenue constante.

L'évolution du processus de solidification dépend fortement de la vitesse de tirage. Lorsque la fraction solidifiée atteint l'unité, cela veut dire que le changement de phase est achevé. La figure V.18 présente le processus de solidification pour plusieurs vitesses de tirage adimensionnelles. D'après la figure ci-dessous, on remarque que pour un rapport de  $V_g^*/L_g^* = 10^{-4}$ , le changement de phase est très long comparant avec celui de  $V_g^*/L_g^* = 8 \times 10^{-3}$ .

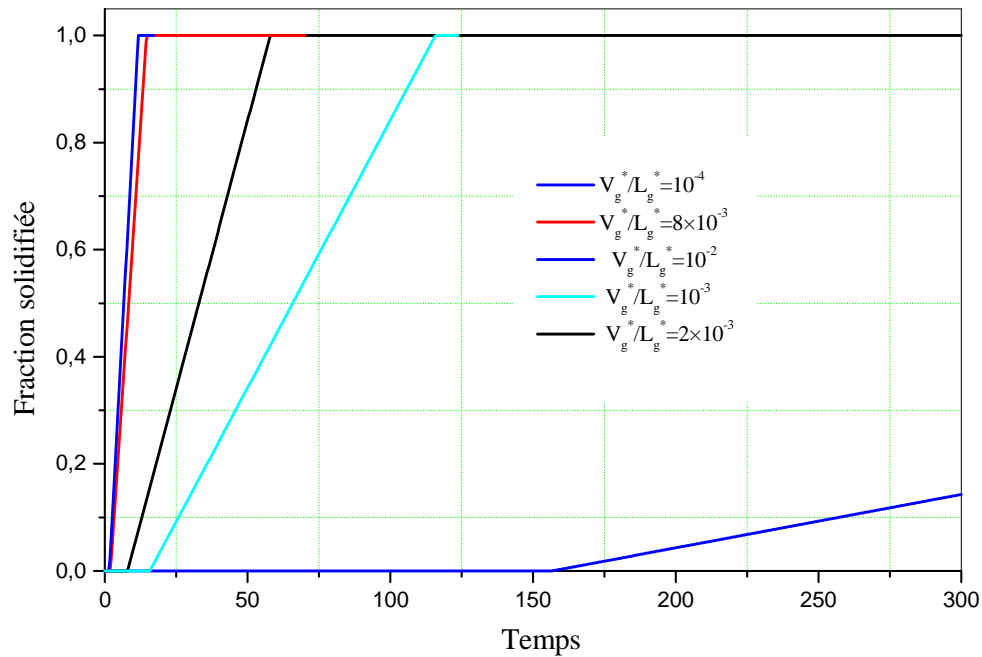


Figure V.20 : Evolution de la solidification en fonction de la vitesse de tirage

Les calculs effectués pour  $V_g^*/L_g^* = 2 \times 10^{-3}$  et  $V_g^*/L_g^* = 10^{-3}$  ont montrés qu'à faible vitesse de tirage, les ségrégations radiales sont faibles (voir figure V.21). En appliquant nos résultats sur le GaInSb, le dimensionnement des rapports  $V_g^*/L_g^* = 2 \times 10^{-3}$  et  $V_g^*/L_g^* = 10^{-3}$  correspondent à des vitesses  $V_g = 1.2 \mu\text{m}/\text{s}$  et  $V_g = 0.54 \mu\text{m}/\text{s}$  respectivement pour  $R = 12 \text{ mm}$  et  $L_g = 216 \text{ mm}$ . L'étude expérimentale et la modélisation numérique de la convection thermosolutale durant la croissance de type Bridgman sur le GaInSb de Stelian [57] a montré que pour  $V_g = 1 \mu\text{m}/\text{s}$ , les ségrégations radiales sont faible et l'effet électromagnétique sur la croissance peut être négligé dans ce cas.

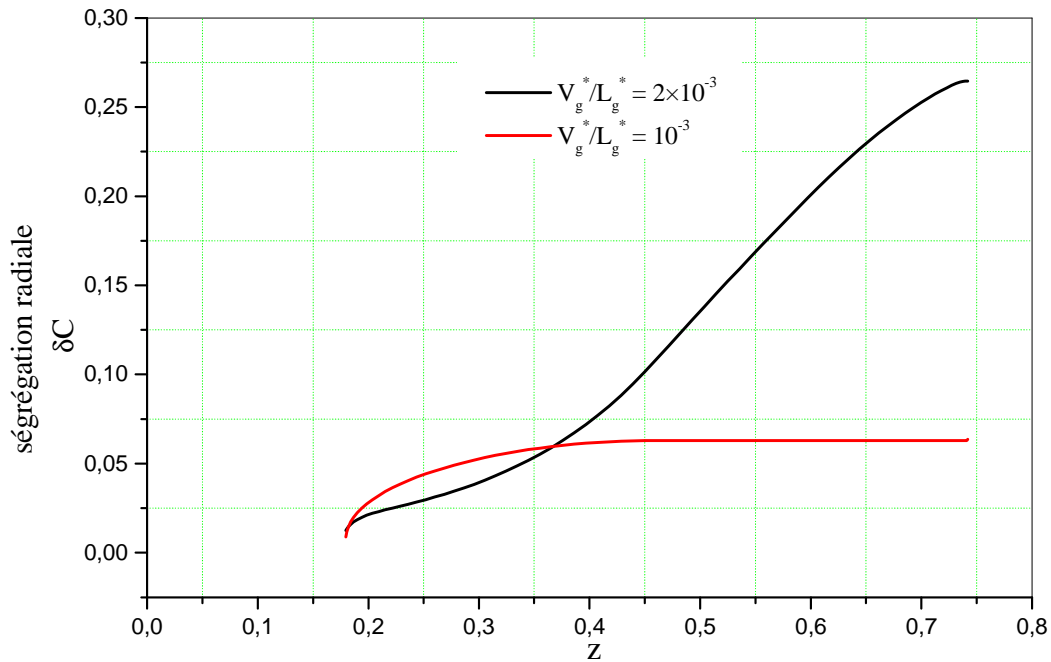
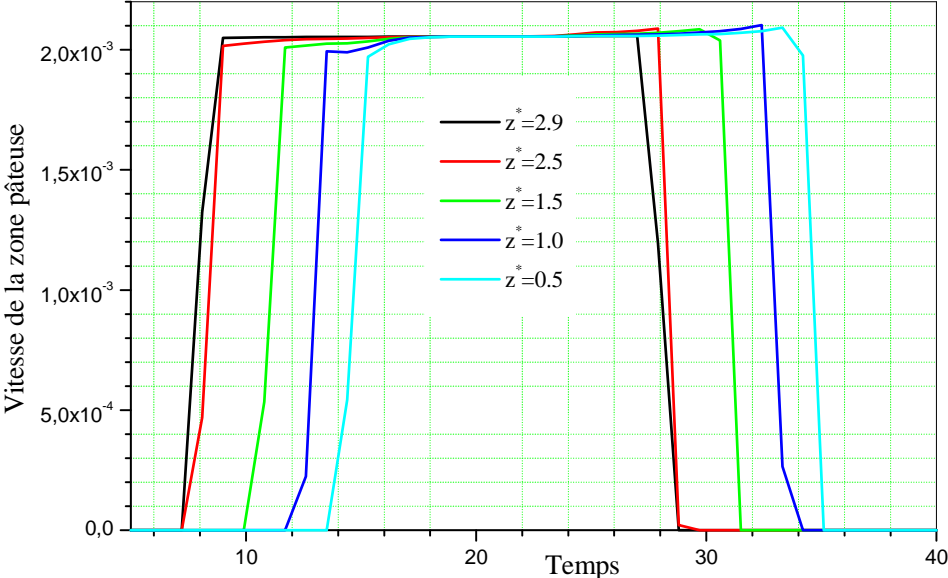


Figure V.21 : Evolution axiale des ségrégations radiales en fonction de la vitesse de tirage

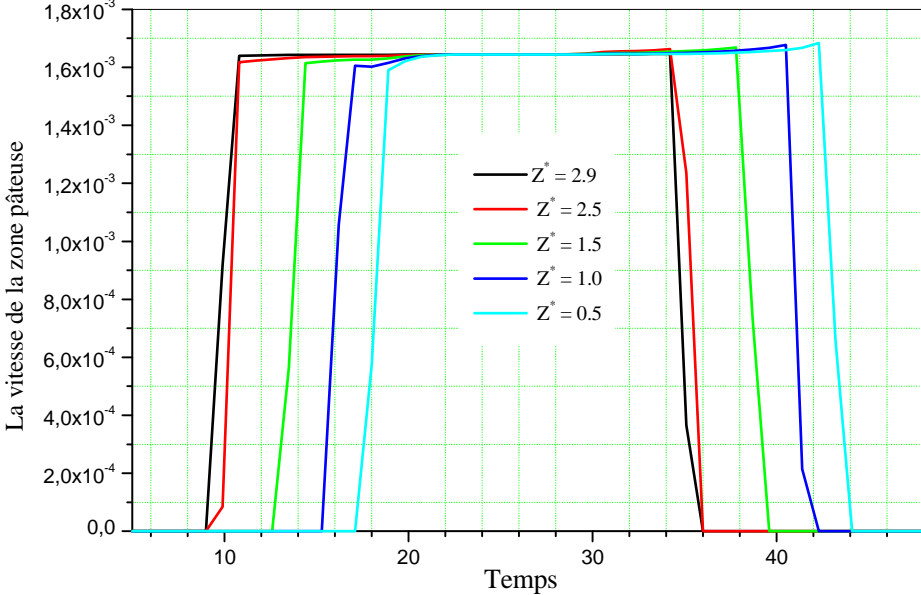
Pour simuler la vitesse de la zone pâteuse en fonction de la vitesse de tirage, la longueur de la zone du profil de température est maintenue constante et les calculs ont été effectués pour quelques points du domaine de calcul.

Le calcul de la vitesse de la zone pâteuse a été effectué via la relation définie par Timchenko

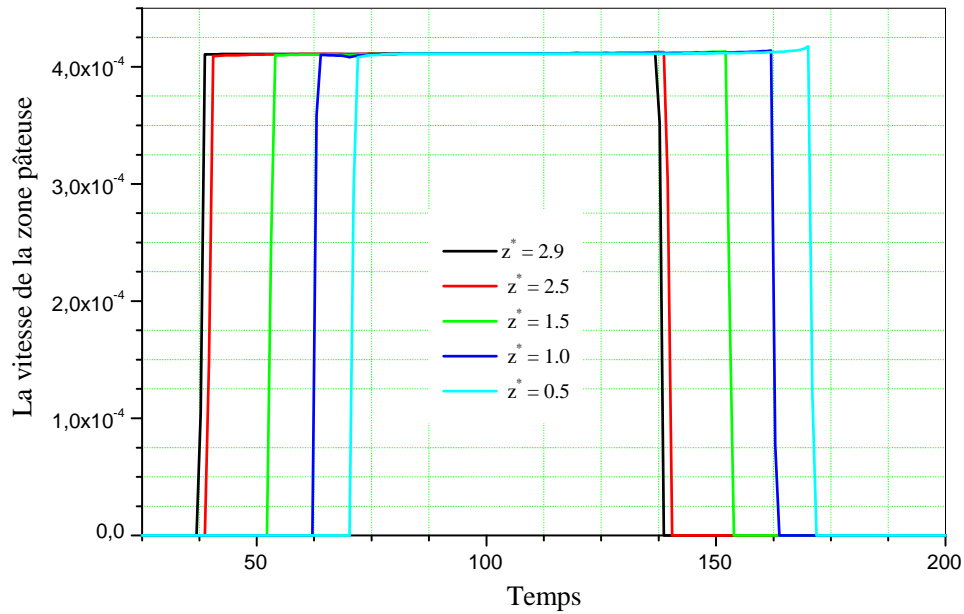
et al [52] ( $\vec{v} = \left( \frac{\partial f_s}{\partial t} \right) \Delta z$ ) pour  $V_g^*/L_g^* = 10^{-2}$ ,  $V_g^*/L_g^* = 2 \times 10^{-3}$  et  $V_g^*/L_g^* = 8 \times 10^{-3}$ .



(a)



(b)



(c)

Figure V.22 : Evolution de la vitesse de la zone pâteuse en fonction du rapport  $V_g^*/L_g^*$

(a)  $V_g^*/L_g^* = 10^{-2}$ , (b)  $V_g^*/L_g^* = 8 \times 10^{-3}$ , (c)  $V_g^*/L_g^* = 2 \times 10^{-3}$

La figure V.22 illustre l'évolution de la vitesse de la zone pâteuse en quelques points du domaine de calcul pendant le phénomène de solidification verticale. Comme le mouvement du bain liquide se fait vers le bas, on remarque que les derniers points du domaine de calcul ce sont les premiers à faire bouger à une vitesse maximale atteinte brusquement. Cette vitesse est maintenue constante au cours du changement de phase. A la fin du processus, elle rechte subitement à zéro.

Pour  $V_g^*/L_g^* = 10^{-2}$ , la vitesse de croissance est moins uniforme et la cristallisation du bain fondu est plus rapide en comparant avec le cas de  $V_g^*/L_g^* = 2 \times 10^{-3}$ . La simulation numérique et les expériences montrent que les cristaux obtenus en utilisant des vitesses de croissance

faibles sont plus homogènes et leur qualité structurale est améliorée par rapport aux cristaux obtenus à grandes vitesses.

#### IV. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons procédé à l'étude de la structure des écoulements ainsi que celles des transferts de chaleur et de masse en régime transitoire pendant le phénomène de croissance cristalline verticale par la méthode de Bridgman. Il s'avère que l'introduction de l'effet magnétohydrodynamique au cours du changement de phase pour les besoins de l'amélioration du produit final augmente le nombre de paramètres intervenants dans cette étude. Nous avons volontairement restreint notre présentation à certains facteurs majeurs, bien que les autres aient fait l'objet d'une analyse approfondie microscopique.

A travers cette recherche une étude macroscopique paramétrique a été réalisée. Nous avons montré que ; sous certaines conditions, la convection thermo-solutale influe sur les ségrégations chimiques qui déstabilise l'homogénéité du cristal obtenu. Deux méthodes ont été proposées pour éviter l'amortissement solutal au cours de la solidification et pour améliorer la qualité des cristaux :

- La croissance Bridgman sous champ magnétique.
- La croissance Bridgman à vitesse faibles.

---

## **CONCLUSION GENERALE**

---

L'une des principales motivations de ce travail est de contribuer à la compréhension des phénomènes de convection naturelle lors du processus de solidification verticale par la technique de Bridgman dans un espace cylindrique axisymétrique. L'objectif de notre travail de recherche a concerné l'étude de l'influence de la convection thermosolutale combinée à un champ magnétique permanent dans la direction de la croissance sur la solidification verticale dirigée.

Plus précisément, nous avons réalisé un modèle numérique permettant de simuler en détails la mécanique des fluides et les transferts thermiques au cours du changement de phase en régime instationnaire. L'approche milieu poreux a été retenue pour modéliser la zone pâteuse au cours de la croissance.

Avant de tester le modèle sur le cas du processus de croissance, des procédures de validation du code de calcul sont soumises. Nous avons vérifié que le modèle était capable de reproduire les résultats connus pour la convection forcée et naturelle en milieux fluide et poreux dans une cavité carrée. Ensuite nous avons validé le cas du changement de phase et la convection naturelle sous l'effet électromagnétique. La concordance entre le modèle et les résultats des autres s'avère satisfaisante.

Sur plusieurs points, ce travail apporte une contribution originale et complète les résultats disponibles en cavité cylindrique dans le cadre d'une approche macroscopique du problème de solidification sous l'effet électromagnétique. Nous avons mis au point pour cela un modèle numérique, basé sur la méthode des volumes finis pour résoudre les équations de conservation gouvernant ces écoulements axisymétriques. Nous avons testé le code de calcul en se basant sur des résultats de publications antérieures ou sur des solutions asymptotiques quand l'approche analytique est possible.

Lors de la solidification d'un alliage métallique ou semi-conducteur à partir d'un bain fondu, le transport de soluté par convection induit des hétérogénéités de composition dans le solide formé. L'application d'un champ magnétique permet de réduire les mouvements convectifs dans le liquide afin de s'approcher du régime de transport de soluté purement diffusif. Notre étude nous a permis de montrer la réduction de la convection naturelle dans le bain liquide et la diminution des ségrégations radiales en présence d'un champ magnétique axial lors de la solidification verticale de type Bridgman.

En conclusion, nous avons réussi à établir une simulation numérique originale et inédite afin de prédire la performance d'un tel dispositif de solidification. Jusqu'à nos jours, les chercheurs éprouvent beaucoup de difficulté à cerner ce problème de solidification car ce phénomène complexe fait intervenir un nombre assez important de paramètres. Ainsi à titre d'exemple nous avons réussi à diminuer les ségrégations chimiques radiales de près de 60% pour un nombre de Hartmann égale à 150 et analyser la vitesse de la zone pâteuse en fonction de la vitesse de tirage.

Deux méthodes ont été proposées dans le cadre de cette thèse pour éviter l'amortissement de l'écoulement au cours de la solidification des alliages métalliques et pour améliorer la qualité des cristaux :

- i) La croissance Bridgman sous champ magnétique.
- ii) La croissance Bridgman à vitesse faible (afin d'éviter l'effet d'amortissement).

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

**[1]. M. Speisser**

Jan Czochralski et la méthode du tirage des cristaux  
*Bulletin GFCC Mai 1999*

**[2].R.S. Feigelson**

Pulling optical fibers  
*Int.J. Crystal Growth vol.79,pp.669(1986)*

**[3]. G. Foulon**

Fibres monocristallines lasers de niobates à susceptibilités diélectriques non linéaires (2) élevées, purs ou dopés par des ions terres rares  
*Thèse université Claude Bernard Lyon I (1996).*

**[4]. C.P. Khattak, F. Schmid**

Growth of large diameter crystals by HEM for optical and laser applications  
*SPIE 505, Advances in optical materials (1984) p.4*

**[5]. O.cafrain**

Mise en œuvre et utilisation de la méthode de l'échangeur thermique (HEM) pour l'obtention de monocristaux à applications spécifiques et de céramiques supraconductrices orientées *Thèse université de Bordeaux (1997).*

**[6]. P. Bennema**

Growth and morphology of crystals  
*Handbook of Crystal Growth Vol. 1, D.T.J. Hurle ed., North Holland (1993).*

**[7]. M.C. Flemmings**

Solidification Processing,  
*McGraw-Hill, New York (1974).*

**[8]. K.A. Jackson,**

Liquid Metals and Solidification  
*American Society of Metals (1958)*

- [9]. **J.W. Cahn**  
*Acta Met*, vol. 8,pp.554(1960).
- [10]. **W.G. Pfann**  
*Trans, AIME vol.194,pp. 747(1952)*
- [11].**J.P. Garandet, J.J. Favier and D. Camel**  
Segregation phenomena in crystal growth from the melt  
*Handbook of Crystal Growth", Vol. 2, D.T.J. Hurle ed., North Holland (1994)*
- [12].**W.G. Pfann**  
Zone Melting  
*2nd edition, Wiley (1966)*
- [13].**W.W. Mullins and R.F. Sekerka,**  
*J. Appl. Phys. Vol.35,pp. 444(1964)*
- [14]. **J.A. Burton, R.C. Prim and W.P. Schlichter**  
*J. Chem. Phys. Vol.21,pp. 1987 (1953)*
- [15]. **E. Sheil, Z.**  
*Metallk ,vol.34,pp.70(1942)*
- [16]. **S.R.Coriell,R.F.Sekerka**  
Lateral solute segregation during unidirectional solidification of a binary alloy with a curved solid-liquid interface  
*Int.J. Crystal Growth vol.46,pp.479(1979)*
- [17]. Journal of materials science 19(1984) 1043-1076
- [18]. Encyclopedia of materials: Science and technology, Macroségrégations, pages 4733-4739.
- [19]. **Lehmann**  
Contrôle solidification par effet Seebeck,  
*Thèse INPG, 1996.*
- [20]. Binary Alloys Phase Diagrams, ASM, 1986.
- [21].**B.Cantor and A.Vogel**  
Dendritic solidification and fluid flow  
*Int.J. Crystal Growth vol.41,pp.109(1977)*
- [22].**S.R.Coriell, G.B.McFadden and R.F.Boisvert**  
Effect of a Forced coquette Flow on Coupled Convective and Morphological Instabilities during Unidirectional Solidification  
*Int.J. Crystal Growth vol.69,pp.15(1984)*

**[23]. R.Ananth and W.N.Gill**

Dendritic Growth in Microgravity and Forced Convection  
*Int.J. Crystal Growth vol.179,pp.263(1997)*

**[24].Ch.Charbon, A.Jcot and M. Rappaz,**

3D Stochastic Modelling of E quiaxed Solidification Presence of Grain Movement  
*Acta Metall Mater, vol.42,pp. 3953(1994)*

**[25].A.Buchhloz and S.Engler**

The influence of forced convection on solidification interfaces  
*Computational Materials Science vol.7,pp.221(1996)*

**[26].T.Campanella**

Etude de l'effet du Brassage électromagnétique sur les structures d'alliage cuivreux  
*Thèse EPFL (2003)*

**[27]. H.Nguyen Thi, B.H.Zhou, G.Reinhart and B.Billia**

Influence of forced convection on columnar microstructure during directional solidification of Al-Ni alloys  
*Proc, of the SG04 conference, Miskolc, Hongrie (2004)*

**[28].H.J.Scheel**

Accelerated crucible rotation; a novel stirring technique in high temperature solution growth  
*J.of Cryst Growth, 13/14 (1972) 560*

**[29].E.O.Schulz-Dubois**

Accelerated crucible rotation; hydrodynamic and stirring effect  
*Int.J. Crystal Growth vol.12,pp.81(1972)*

**[30].D.Ma et W.Q.Jie**

Observation of the periodic dendritic structure in an Al-38wt% Cu hypoeutectic alloy processed by ACRT-B method  
*Int.J. Crystal Growth vol.210,pp.777(2000)*

**[31]. M.D. Dupouy, D. Camel and J.J. Favier,**

Influence of thermosolutal convection on the solidification front during upwards solidification  
*Acta metall., 37 (1989) 1157*

**[32]. H. Nguyen Thi, B. Billia and H. Jamgotchian,**

Influence of thermosolutal convection on the solidification front during upwards solidification  
*J. of Fluid Mech., 204 (1989) 581*

- [33]. Y.Mao, J.Liu, W. Jie et Y.Zhou**  
Effect of the accelerated crucible rotation technique on dendritic Growth morphology  
*J.of Cryst Growth*, 171 (1997) 548.
- [34]. R.Moreau**  
Magnetohydrodynamics  
*Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, (1990)*
- [35]. O.Laskar**  
Phénomènes thermoélectrique et magnetohydrodynamiques en solidification des alliages métalliques  
*Thèse de Doctorat INPG (1994)*
- [36]. P.Lehmann, R.Moreau, D.Camel and R.Bolcato**  
Modification of interdendritic convection in directional solidification by uniform magnetic field  
*Acta Mater*, vol.46, pp. 4067(1998)
- [37]. S. N. Tewari, R. Shah and H. Song,**  
Effect of magnetic field on the microstructure and macrosegregation in directionally solidified Pb-Sn alloys  
*Metall. Mater. Trans*, 25A (1994) 1535
- [38]. G. Quillet**  
*Influence de la convection, naturelle ou force, sur l'apparition des mésoségrégations lors de la solidification des alliages métalliques*  
Thèse INPG (2003)
- [39]. A.Weiß, G. Zimmermann, R. Salber, and Z. Mbaya,**  
Microstructure Development in Solidification of Al-Si-Alloys under magnetically controlled Flow Conditions,  
*Proceedings of the Electromagnetic Processing of Materials International Conference Lyon, France (2003)*
- [40]. B. Willers, S. Eckert, U. Michel, G. Zouhar,**  
Effect of the fluid convection driven by a rotating magnetic field on the solidification of a PbSn alloy,  
*European Congress on Advanced Materials and Processes EUROMAT2003, Lausanne, Switzerland, (2003)*
- [41]. C. Beckermann and R. Viskanta**  
Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture  
*PCH 10*, 1955213 (1988).
- [42].V. R. Voller.**  
A numerical method for analysis of solidification in heat and mass transfer systems.  
*In Numerical Methods in Thermal Problems V (Edited by R. W.Lewis et al.), pp. 693-704. Pineridge, Swansea (1987).*

**[43].M. Rappaz**

Micro-/macroscopic modeling of solidification  
*Int. Mater. Rev. (1989). submitted.*

**[44].W. D. Bennon and F. P. Incropera**

A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems-I. Model formulation  
*Znt. J. Heat Mass Transfer vol.30,pp.2161-2170 (1987).*

**[45]. D. R. Poirier**

Permeability for flow of interdendritic liquid in columnar-dendritic alloys  
*Metall. Trans. B ISB, 245-256 (1987)*

**[46].V.R.Voller, C.A.Prakash**

A fixed grid numerical modeling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems  
*Int.J.Heat Mass Tran.vol.30,pp. 1709-1719(1987).*

**[47].W. D. Bennon and F. P. Incropera**

Numerical analysis of binary solid-liquid phase change using a continuum model,  
*Numer. Heat Transfer vol. 13, pp.277-296 (1988).*

**[48]. C.Beckermann and R.Viskanta**

Natural convection solid/liquid phase change in porous media  
*Int, j,Heat Mass transfer, Vol.31 No.1.pp.35-46.(1988)*

**[49].D. D. Gray and A. Giorgini,**

The validity of the Boussinesq approximation for liquids and gases  
*Int. J. Heat Mass Transfer, 19-5 (1976), 545-551.*

**[50]. J.C.Heinrich**

Numerical simulation of thermosolutal instability during directional solidification of binary alloy  
*Comput.Methods Appl.Mech. Engrg. 69 65-88 (1988).*

**[51]. P.C.Carman**

*Tran.inst.Chem. engrs 15, 150-166(1937)*

**[52]. V.Timchenko, P.Y.P.Chen, E.Leonardi,G.de Vahl Davis, R.Abbaschian,**

*Int. J. Heat and Mass Transfer vol.43 ,pp. 963-980 (2000)*

**[53]. C.W. Lan, M.H. Lee, M.H. Chuang and C.J. Shih**

Phase field modeling of convective and morphological instability during directional solidification of an alloy.

*Int.J. Crystal Growth vol.295,pp.202 (2006)*

**[54].D. Samanta, N. Zabarar**

Control of macrosegregation during the solidification of alloys using magnetic fields  
*Int. J. Heat and Mass Transfer vol.49 ,pp. 4850–4866(2006)*

**[55]. C.Stelian, T. Duffar**

Numerical analysis of solute distribution and interface stabilization during  
Experimental Bridgman growth of concentrated GaInSb alloys  
*Int.J. Crystal Growth vol.275,pp.585-594(2005)*

**[56]. R.A. Brown and D.H. Kim**

Modelling of directional solidification: from Scheil to detailed numerical simulation  
*Int.J. Crystal Growth vol.109,pp.50-69(1991)*

**[57]. C.Stelian, Y. Delannoy, Y.Fautrelle, T.Duffar**

Solute segregation in directional solidification of GaInSb concentrated alloys under  
alternating magnetic fields.  
*Int.J. Crystal Growth vol.226,pp.207-215(2004)*

**[58]. C.Stelian, Y.Delannoy, Y.Fautrelle, Thierry Duffar**

Solute segregation in directional solidification of GaInSb concentrated alloys under  
alternating magnetic fields  
*Int.J. alloys and compounds vol. 226,pp. 207-215(2004)*

**[59].S.Kaddeche, J.P.Garandet,C.Barat,H.Ben Hadid,D.Henry**

*Int.J. Crystal Growth vol.158,pp.144 (1996)*

**[60]. S.V.Patankar**

Numerical heat transfer and fluid flow  
*Mc Graw Hill Book Company, 1980.*

**[61].C. J. Ho and F. J. Tu,**

Transition to Oscillatory Convection of Cold Water in a Vertical Annulus,  
*Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 41, pp. 1559-1572 (1998)*

**[62].D.Angirasa et G.P.Peterson**

Combined Heat and Mass Transfer by Natural Convection with Opposing Buoyancy Effects  
in Fluid Saturated Porous Medium.  
*Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol.40, N°12 ,pp.2755-277(1997)*

**[63]. P. Nithiarasu, T. Sundararajan and K.N. Seetharamu**

Double-diffusive natural convection in a fluid saturated porous cavity with a freely convecting  
wall  
*Int. Comm. Heat Mass Transfer, Vol. 24, No. 8, pp. 1121-1130(1997)*

- [64]. R.Bennacer, M.El Ganaoui, E.Semma, A.Cheddadi**  
Heating flux effects on floating zone growth under micro-gravity conditions,  
*Int. J. Materials and Product Technology*, Vol. 22 , pp. 35-48(2005).
- [65].C.Benard, D.Gobin and J.Trevisan**  
Thermosolutal Natural Convection in a Rectangular Enclosure: Numerical Results  
*HTD, ,Heat Transfer in Convective Flows*, Vol.107,pp.249-254(1989).
- [66].D.Gobin,B.Goyeau and J.P.Songbe**  
Double Diffusive Natural Convection in Composite Fluid-Porous Layer  
*ASME,J. Of Heat Transfer*, Vol.120,pp.234-242(1998).
- [67]. G.De Vahl Davis**  
Laminar natural convection in an enclosed rectangular cavity  
*Int. J. Numerical Methods in Fluids*. Vol. 3, pp249-264(1983).
- [68].C.Nonino and G.Croce**  
An equal-order velocity-pressure algorithm for incompressible thermal flows, part 2:  
validation  
*università degli studi di udine, dipartimento di energetica e machine,via delle scienze  
208,33100 udine, Italy (1997).*
- [69]. H.Hwataik and T.Kuehn**  
Double diffusive natural convection in a vertical rectangular enclosure - I. Experimental study  
*Int. J.Heat Mass transfer vol.3 4.No.2.pp.449-441 (1991).*
- [70]. C.Béghein, F.Haghighat and F.Allard**  
Numerical study of double diffusive natural convection in a square cavity  
*Int.J.Heat mass transfer*, vol.35,pp.833-846 (1992).
- [71].M.Benzeghiba**  
Analyse des divers modes de convection thermosolutale dans une cavité partiellement  
poreuse.  
*Thèse de Doctorat, Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumédiene, la  
faculté de Génie mécanique et Génie des Procédés (2006).*
- [72].C.Béghein, F. Haghighat and F.Allard**  
Numerical study of double diffusive natural convection in a square cavity  
*Int.J.Heat mass transfer*, vol.35,pp.833-846 (1992).
- [73].G.Lauriat and v.prasad**  
Natural convection in a vertical porous annulus  
*Conf.Heat Transfer in porous Media, Izmir, Turkey, pp.209-238 (1990)*

**[74].M. A. Teamah**

Numerical simulation of double diffusive natural convection in rectangular enclosure in the presences of magnetic field and heat source  
*Int.l J.Thermal Sciences, vol. 47,pp. 237–248(2008)*

**[75].C.Gau, R. Viskanta**

Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall.  
*J.Heat Trans.-T.ASME, vol. 108,pp. 174-181(1986).*

**[76].A.D.Brent, V.R.Voller, K.J.Reid**

Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal  
*Numer. Heat Tr.vol.13,pp. 297-318(1988).*

**[77].R.T. Tenchev, J.A. Mackenzie, T.J. Scanlon , M.T. Stickland**

Finite element moving mesh analysis of phase change problems with natural convection  
*Int. J. Heat and Fluid Flow, vol. 26,pp. 597–612(2005)*

**[78].Stelian, Y. Delannoy, Y. Fautrelle,T. Duffar**

Bridgman growth of concentrated GaInSb alloys with improved compositional uniformity under alternating magnetic fields  
*Int.J. Crystal Growth vol.275,pp.1571-1578 (1996)*

**[79]. I.L.Ferreira, J.E.Spinelli, A. Garcia,**

Gravity-driven inverse segregation during transient upward directional solidification of Sn-Pb hypoeutectic alloys,  
*Int.J. alloys and compounds vol.475,pp.396-400(2009)*

**[80].R. Sampath, N. Zabaras,**

Inverse thermal design and control of solidification processes in the presence of a strong external magnetic field  
*Int. J. Numer. Meth. Eng. Vol.50, pp. 2489–2520 (2001).*

**[81].M. El Ganaoui, P. Bontoux, D. Morvan**

Localisation d'un front de solidification en interaction avec un bain fondu instationnaire  
*Mécanique des fluides/Fluid mechanics, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 327, Série II b, p. 41-48, 1999.*

**[82]. A.Bejan and J.L.Lage,**

the Prandtl number effect on the transition in natural convection along a vertical surface.  
*J.Heat Transfer vol.122 (1990)*

**[83].K. Zaidat**

Influence d'un champ magnétique glissant sur la solidification dirigée des alliages métalliques binaires.

*Thèse de Doctorat préparée au laboratoire : Elaboration par Procédés Magnétiques dans le cadre de l'Ecole Doctorale : Matériaux et génie des procédés, Grenoble (2005).*

**[84].Samanta, N. Zabarar**

Control of macrosegregation during the solidification of alloys using magnetic fields

*Int.J. Heat and Mass Transfer vol.49,pp. 4850–4866(2006).*

**[85]. Xi Li , Y. Fautrelle , Z. Ren**

Influence of thermoelectric effects on the solid–liquid interface shape and cellular morphology in the mushy zone during the directional solidification of Al–Cu alloys under a magnetic field

*Acta Materialia vol.55, pp. 3803–3813(2007)*

**[86]. S. N. Tewari, R. Shah and H. Song**

Effect of magnetic field on the microstructure and macrosegregation in directionally solidified Pb-Sn alloys,

*Metall. Mater. Trans, 25A (1994) 1535*

**[87]. C.W. Lan, M.H. Lee, M.H. Chuang, C.J. Shih**

Phase field modeling of convective and morphological instability during directional solidification of an alloy

*Int.J. Crystal Growth vol.295,pp.202-208 (2006)*

**[88]. J. L. Plaza and E. Diéguez**

Experimental analysis of Mn segregation in Bridgman-grown gallium antimonide: Dependency on the ampoule radius.

*Cryst. Res. Technol Vol. 39,pp. 396-400 (2004)*

---

---

# ANNEXES

---

## ANNEXE I

Cette annexe est consacrée au traitement des équations de base qui expriment les principes de conservation de la masse, la quantité de mouvement, l'énergie et le soluté gouvernant les transferts de chaleur et de masse dans un milieu purement fluide. On débutera par la formulation des équations vectorielles avant de les écrire sous leurs formes tensorielles, en configuration axisymétrique.

### I. EQUATIONS GENERALES

#### I.1 Equations de conservation de la masse

Considérant un domaine  $\Omega$  de volume  $V$ , occupé par un fluide de masse volumique globale  $\rho$ . Si on suppose qu'il n'y a pas de source ou de puit de matière dans le milieu continu, on a :

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) \right] dV = 0 \quad (\text{A. 1})$$

Cette égalité doit être satisfaite quel que soit le domaine  $\Omega$ , par conséquent, l'équation du bilan local de conservation de la masse est :

$$\left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) \right] = 0 \quad (\text{A. 2})$$

L'hypothèse d'écoulement incompressible réduit cette équation à :

$$\nabla \vec{V} = 0 \quad (\text{A. 3})$$

## I.2. Equation de conservation de la quantité de mouvement

D'après la deuxième loi de Newton, la dérivé particulière de la quantité de mouvement des fluides contenus dans un domaine X infinitésimal est égale à la somme des forces extérieures agissantes sur lui, qu'elles soient volumiques ou de surfaces. D'où :

$$\rho dV \frac{D\vec{V}}{Dt} = \vec{F}_{Ch} + \vec{F}_{Pr} + \vec{F}_{Vi} + \vec{F}_m \quad (\text{A. 4})$$

$\vec{F}_{Ch}$ ,  $\vec{F}_{Pr}$ ,  $\vec{F}_{Vi}$ ,  $\vec{F}_m$ , sont respectivement les forces qui dérivent d'un champ de potentiel (on ne confédérera que la pesanteur), les forces de pression, les forces de viscosité et enfin la force électromagnétique.

$\vec{F}_{Ch}$ ,  $\vec{F}_{Pr}$ ,  $\vec{F}_{Vi}$  ont pour expressions respectives :  $\rho \vec{g} dV$ ,  $-P dV$  et  $\vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\tau}} dV$

$\overline{\overline{\tau}}$  est le tenseur des contraintes de viscosité du fluide défini par :

$$\overline{\overline{\tau}} = 2\mu \overline{\overline{D}} - \nu_v \nabla \cdot \vec{V} \overline{\overline{I}}_d \quad (\text{A. 5})$$

Ou :  $\overline{\overline{I}}_d$  est le tenseur identité.

$\overline{\overline{D}}$  est le tenseur des taux de déformation défini par :

$$\overline{\overline{D}} = \frac{1}{2} (\overline{\overline{\nabla}} \vec{V} + \nabla^t \vec{V}) \quad (\text{A. 6})$$

$\nu_v$  est la viscosité de volume, généralement négligeable. La viscosité de volume ne peut avoir d'effet pour les écoulements incompressibles.

Comme  $\bar{\tau}$  est un tenseur symétrique - conséquence directe de la conservation des moments des forces et compte tenu des propriétés de l'opérateur  $\nabla$ , on a :  $\bar{\nabla} \bar{\tau} = \nabla (\mu \bar{\nabla} \bar{\nabla})$ . En définitif, l'équation de quantité de mouvement prend la forme vectorielle suivante :

$$\rho \left[ \frac{\partial \bar{V}}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla \bar{V} \right] = -\bar{\nabla} P + \rho \bar{g} + \nabla (\mu \bar{\nabla} \bar{\nabla}) + F_m \quad (\text{A. 7})$$

### I.3 Equation de l'énergie

Le principe de la conservation de l'énergie nous amène à écrire que la dérivé particulaire de l'énergie totale  $E = \rho U + \rho v^2/2$  ( $U$  étant l'énergie interne d'une partie d'un fluide contenue dans un domaine  $\Omega$ ) est égale à la somme des puissances des forces extérieures et des puissances calorifiques échangées avec le système extérieur à  $\Omega$

En négligeant les transferts radiatifs on a :

$$\int_{\Omega} \frac{D(\rho U)}{Dt} dV = \int_{\Omega} \left[ -\nabla \bar{q} - P \cdot \nabla \bar{V} + \bar{\tau} : \bar{\nabla} \bar{\nabla} + q_v \right] dV \quad (\text{A. 8})$$

Dans le membre de droite de cette équation, on distingue trois termes :

- $-\nabla \bar{q}$  est la densité de flux de chaleur fourni au système extérieur par conduction, avec  $\bar{q} = -k \cdot \bar{\nabla} T$ .
- $-P \cdot \nabla \bar{V}$  est la puissance des forces de pression,
- $\bar{\tau} : \bar{\nabla} \bar{\nabla}$  est la puissance des forces de viscosité.
- $q_v$  est le terme source lié au changement de phase.

En écoulement incompressible, on a :  $dU = C_v \cdot dT$  au lieu de  $C_v \cdot dT + [T \cdot \partial P / \partial T]_{\rho} - P$  dV et Le bilan énergétique étant satisfait quel que soit le domaine  $\Omega$ , on déduit l'équation du bilan local en appliquant le théorème de la divergence, ce qui donne finalement :

$$\rho C_v \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla (T \cdot \bar{V}) \right] = -\nabla \bar{q} - P \cdot \nabla \bar{V} + \bar{\tau} : \bar{\nabla} \bar{\nabla} \quad (\text{A. 9})$$

Notons qu'un bilan enthalpique (système ouvert) ferait apparaître  $C_p$  à la place de  $C_v$  et  $\beta T dP/dT$  à la place de  $-P.\nabla\vec{V}$ . Pour les écoulements incompressibles, on a intérêt à utiliser le bilan d'énergie interne au lieu du bilan enthalpique. Dans le cas des écoulements isobares, il vaut mieux utiliser un bilan enthalpique et ceci est dû au fait que la variation de l'enthalpie tient compte du travail des forces de pression.

#### I.4 Equation de la concentration

Par similitude au transfert de chaleur, on peut exprimer le transfert de soluté, grâce aux équivalences entre ces deux transferts (voir chapitre I, **A. Bejan** /1995/).

$$C \sim T \qquad D \sim \alpha \qquad \vec{J} \sim \vec{q}$$

En absence de réaction chimique, l'équation de conservation de soluté est formulée comme suit :

$$\int_{\Omega} \frac{DC}{Dt} dV = \int_{\Omega} -\nabla\vec{J} \qquad (\text{A. 10})$$

Le terme  $\vec{J}$  représente le flux de soluté qui traverse les frontières du domaine  $\Omega$ , avec  $\vec{J} = -D.\vec{\nabla}C$ . Le bilan massique est satisfait, du moment qu'aucune source ou puits d'espèces chimique ne sont relevés. Dans ces conditions, l'équation finale du transfert solutale est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(C.\vec{V}) = -\nabla\vec{J} \qquad (\text{A. 11})$$

## II. SYSTEME DE COORDONNEES UTILISEES

Vu la géométrie du problème, nous nous proposons d'écrire les équations le gouvernant dans le système des coordonnées cylindriques ( $r, \theta, z$ ). Dans un deuxième temps, on se limitera au cas des écoulements axisymétriques, c'est à dire dont toutes les variables sont indépendantes de l'angle azimutal  $\theta$ .

Certains auteurs ont préféré traiter des problèmes analogues en utilisant le système de coordonnées cartésiennes, ceci afin d'écrire plus simplement leurs équations. L'inconvénient majeur d'un tel choix est la mauvaise représentation des conditions aux limites sur les parois courbées.

Toutes les équations qui suivent sont un développement des précédentes en écriture tensorielle beaucoup plus générale.

## II.1. Equation de continuité

$$\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rv)}{\partial r} \quad (\text{A. 12})$$

## II.2. Equation du mouvement

- Projection suivant la direction z :

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rz})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\tau_{\theta z})}{\partial \theta} + \frac{\partial(\tau_{zz})}{\partial z} + \rho g_z \quad (\text{A. 13})$$

La dérivée particulaire de la variable  $\phi$  est définie par :

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + u \frac{\partial\phi}{\partial z} + v \frac{\partial\phi}{\partial r} + \frac{w}{r} \frac{\partial\phi}{\partial \theta}$$

- Projection suivant la direction r :

$$\rho \frac{Dv}{Dt} - \rho \frac{w^2}{r} = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tau_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\tau_{\theta r})}{\partial \theta} + \frac{\partial(\tau_{rz})}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} + \rho g_r \quad (\text{A. 14})$$

Le membre de gauche encadré représente la force centrifuge.

- Projection suivant la direction  $\theta$  :

$$\rho \frac{Dw}{Dt} - \rho \frac{vw}{r} = -\frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2\tau_{r\theta})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\tau_{\theta\theta})}{\partial \theta} + \frac{\partial(\tau_{\theta z})}{\partial z} + \rho g_\theta \quad (\text{A. 15})$$

Le membre de gauche encadré représente la force de Coriolis.

D'après la définition du tenseur des contraintes visqueuses  $\overline{\tau}$  pour les fluides à viscosités apparentes et en écoulement incompressible ( $\overline{\tau} = 2\mu \overline{D}$ ) et du tenseur des déformations  $\overline{D}$ , on a les résultats suivants :

$$\begin{aligned} \tau_{rr} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial r} & \tau_{r\theta} &= \mu \left[ r \frac{\partial(w/r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right] & \tau_{rz} &= \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right] \\ \tau_{\theta r} &= \tau_{r\theta} & \tau_{\theta\theta} &= 2\mu \left[ \frac{v}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right] & \tau_{\theta z} &= \mu \left[ \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right] \\ \tau_{zr} &= \tau_{rz} & \tau_{z\theta} &= \tau_{\theta z} & \tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial z} \end{aligned}$$

### II.3. Equation de l'énergie

Pour un milieu isotrope, la loi de Fourier lie le vecteur densité de flux de chaleur à la température par la relation  $\vec{q} = -k \cdot \vec{\nabla} T$  qui se traduit par :

$$q_r = -k \frac{\partial T}{\partial r} \quad q_\theta = -\frac{k}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} \quad q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z}$$

L'équation du bilan local de l'énergie interne est :

$$\rho C_v \frac{DT}{Dt} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( k \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \mu \Phi \quad (\text{A. 16})$$

où  $\mu \Phi = \overline{\tau} : \overline{\nabla \vec{V}}$  est la quantité de chaleur dissipée par frottement, son développement donne l'expression de la fonction de dissipation visqueuse  $\Phi$  :

$$\Phi = 2 \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + 2 \left( \frac{v}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left( r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{w}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} \right)^2$$

#### II.4. Equation du soluté

Dans un milieu homogène et isotrope, la loi de Fick, exprime le flux massique en fonction du gradient de concentration par la relation  $\vec{J} = -D \cdot \vec{\nabla}C$  qui est formulée après projection par :

$$J_r = -D \frac{\partial C}{\partial r} \qquad J_\theta = -\frac{D}{r} \frac{\partial C}{\partial \theta} \qquad J_z = -D \frac{\partial C}{\partial z}$$

L'équation de conservation du soluté est formulée par :

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( D r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D \frac{\partial C}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \qquad (\text{A. 17})$$

## ANNEXE II

Il s'agit de résoudre un système d'équations non linéaires. Pour le résoudre, on fait appel à des méthodes itératives où les coefficients des équations sont considérés comme connus à chaque itération ;

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (\text{A. 1})$$

La méthode de résolution classique consiste à résoudre ces équations en bloc sur une ligne (à r ou z) qui se déplace de façon à balayer l'ensemble du domaine de calcul. Cette méthode itérative consiste à résoudre, à chaque itération, "n" systèmes tridiagonaux où "n" est le nombre de lignes dans la direction de balayage.

Dans notre cas, le balayage est vertical, c'est à dire, que la résolution en bloc concerne des lignes horizontales ce qui permet de propager instantanément sur la largeur de la cavité les conditions imposées sur les parois actives.

A l'itération k+1, l'équation (A. 1) donne en tout point :

$$a_P \phi_P^{k+1} - a_E \phi_E^{k+1} - a_W \phi_W^{k+1} = a_N \phi_N^k + a_S \phi_S^k + b \quad (\text{A. 2})$$

Les  $\phi^k$  désignent les valeurs connues à l'itération précédente. Donc, cette équation ne contient que trois inconnues  $\phi_P^{k+1}$ ,  $\phi_E^{k+1}$ ,  $\phi_W^{k+1}$ . On peut ainsi, former une équation sur chaque nœud suivant la direction radiale (E : Est, W : Ouest).

En utilisant la notation indicielle, cette équation aura la forme générale suivante :

$$\beta_i \phi_i^{k+1} - \gamma_i \phi_{i+1}^{k+1} - \alpha_i \phi_{i-1}^{k+1} = \lambda_i \quad i = 1, n \quad (\text{A. 3})$$

Avec :

$$\begin{aligned}\beta_i &= a_p \\ \gamma_i &= -a_E \\ \alpha_i &= -a_W \\ \lambda_i &= a_N \phi_N^k + a_S \phi_S^k + b\end{aligned}$$

L'ensemble de ces équations constitue un système d'équations dont la matrice des coefficients est tridiagonale ;

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & 0 & & & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & & & 0 \\ 0 & & & & & \\ & & & \alpha_i & \beta_i & \gamma_i \\ & & & & & 0 \\ 0 & & & 0 & \alpha_n & \beta_n & \gamma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \\ \lambda_{n-1} \\ \lambda_n \end{bmatrix} \quad (\text{A. 4})$$

Le système ainsi obtenu, sera résolu par l'algorithme T.D.M.A (Tri Diagonal Matrix Algorithm). Cette technique de résolution rapide est attribuée à **Thomas** /1949/ et qui est une version simplifiée de l'algorithme de Gauss.

On considère deux vecteurs E et F tel que :

$$\begin{cases} \phi_i^{k+1} + E_i \phi_{i+1}^{k+1} = F_i \\ \phi_{i-1}^{k+1} + E_{i-1} \phi_i^{k+1} = F_{i-1} \end{cases} \quad (\text{A. 5})$$

En introduisant l'expression de  $\phi_{i-1}$  dans l'équation (A. 3), on obtient :

$$\phi_i^{k+1} + \frac{\gamma_i}{\beta_i - \alpha_i E_{i-1}} \phi_{i+1}^{k+1} = \frac{\lambda_i - \alpha_i F_{i-1}}{\beta_i - \alpha_i E_{i-1}} \quad (\text{A. 6})$$

En identifiant les équations (A. 5) et (A. 6), il en découle :

$$E_i = \frac{\gamma_i}{\beta_i - \alpha_i E_{i-1}} \quad \text{et} \quad F_i = \frac{\lambda_i - \alpha_i F_{i-1}}{\beta_i - \alpha_i E_{i-1}} \quad (\text{A. 7})$$

La procédure de calcul est la suivante :

- Calcul de  $E_1$  et  $F_1$  par les conditions aux limites ;
- Calcul des  $E_i$  et  $F_i$  par les relations (A. 6) pour  $i = 2$  à  $n-1$  ;
- Calcul de  $\phi_n^{k+1}$  par les conditions aux limites ;
- Détermination de  $\phi_i^{k+1}$  à partir de la relation (A. 5) pour  $i = n-1$  à 1 grâce à une substitution successive.

Une fois les valeurs de  $\phi_i^{k+1}$  sur une ligne de la direction  $r$ , sont déterminées, on passe à la ligne suivante en appliquant la même procédure tout en considérant les variables suivant l'autre direction (suivant  $z$ ) constantes. Le même cheminement est utilisé pour les autres variables dépendantes.