

Modélisation par éléments finis d'écoulements à surface libre avec changement de phase solide-liquide

Marc Médale*, Marc Jaeger

Institut universitaire des systèmes thermiques industriels, CNRS UMR 6595, Technopôle de Château-Gombert, 5, rue Enrico-Fermi, 13453 Marseille cedex 13, France

(Reçu le 10 mars 1998, accepté le 3 décembre 1998)

Abridged English version at the end of the text

Abstract — A finite element thermal analysis of flows with free and moving boundaries. Industrial processes such as welding and mould casting generally involve flows with free surfaces and solid-liquid phase change phenomena. Computation of such processes requires front tracking techniques. For that purpose we have developed an Eulerian finite element model which can deal with both kinds of interfaces (fluid-fluid, liquid-solid) on unstructured meshes. Then, in order to accurately take into account the material discontinuity through the fluid-fluid interface the mesh is locally adapted for the flow computation steps. Moreover, this interface mesh fitting allows us to easily include interfacial phenomena such as surface tension or radiative fluxes. On the other hand, the evolution of the phase change front is undertaken through an enthalpy formulation of the heat transfer problem. For most industrial applications, the phase change occurs over a finite temperature range, thus leading to a mushy region. So no mesh adaptation is required for this second type of interfaces. However, the governing flow equations must be modified in order to consider the porous nature of the material in the mushy region. The 2D numerical analysis of an electron beam welding process with our model is presented. © Elsevier, Paris.

welding / molten pool / moving interfaces / phase change / metal flow / finite elements / mesh fitting

Résumé — Les procédés industriels tels que le soudage et le moulage en fonderie font apparaître des écoulements combinant une ou plusieurs surfaces libres avec des fronts de changement de phase liquide-solide. Leur simulation numérique nécessite la mise en œuvre de techniques de suivi d'interfaces. Nous avons à cet effet développé un modèle basé sur la méthode des éléments finis, qui permet de traiter simultanément ces deux types d'interfaces (fluide-fluide, liquide-solide). Il adopte une description cinématique eulérienne sur des maillages non structurés. Après détermination de la position des interfaces fluide-fluide, on effectue une adaptation locale et temporaire du maillage permettant de préserver la discontinuité matérielle. Cette opération permet en outre de prendre en compte les phénomènes interfaciaux tels que la tension superficielle et le rayonnement thermique. Le suivi des fronts de changement de phases est assuré à l'aide d'une formulation enthalpique, avec prise en compte d'une zone pâteuse (changement de phase anisotherme). Pour cette seconde classe d'interface, il n'est donc pas nécessaire de recourir à une adaptation du maillage. Par contre, les équations régissant l'écoulement sont modifiées pour modéliser les zones pâteuses. Ce modèle est appliqué à l'étude numérique bidimensionnelle d'un procédé de soudage par faisceau d'électrons. © Elsevier, Paris.

soudage / bain liquide / interfaces mobiles / changement de phase / thermo-hydraulique / éléments finis / maillage adaptatif

Nomenclature

C_P	capacité thermique massique à pression constante	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
dl	élément de longueur	m
dS	élément de surface	m^2
F	champ scalaire F	

f_{liq}	fraction volumique de liquide	
f^v	force de volume	$N \cdot m^{-3}$
g	accélération de la pesanteur	$m \cdot s^{-2}$
h	enthalpie sensible	$J \cdot kg^{-1}$
H	enthalpie	$J \cdot kg^{-1}$
ΔH	enthalpie latente	$J \cdot kg^{-1}$
\bar{I}	tenseur identité	
k	coefficient de conductivité thermique	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
K	coefficient de perméabilité affecté à la zone pâteuse	m^{-2}
L	chaleur latente de changement de phase	$J \cdot kg^{-1}$

* Correspondance et tirés à part.
 medale@iusti.univ-mrs.fr

Cet article fait suite à une communication présentée par les auteurs aux 8^{es} JITH qui se sont tenues à Marseille du 7 au 10 juillet 1997.



\mathbf{n}	vecteur normal extérieur au domaine	
p	pression	Pa
\mathbf{q}	vecteur flux de chaleur par conduction .	$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$
Q	densité volumique de production interne de chaleur	$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
R	rayon de courbure	m
s	abscisse curviligne	m
S^T	terme modélisant la zone pâteuse dans l'équation de la chaleur	$\text{W}\cdot\text{m}^{-3}$
S^u	terme modélisant la zone pâteuse dans les équations de l'écoulement	$\text{N}\cdot\text{m}^{-3}$
t	temps	s
\mathbf{t}_g	vecteur tangent à la frontière	
T	température	K
\mathbf{T}	vecteur contraintes	Pa
\mathbf{u}	vecteur vitesse	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Lettres grecques

β	coefficient d'expansion volumique	K^{-1}
ε	émissivité	
γ	tension superficielle	$\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$
λ	coefficient de pénalisation	
μ	viscosité dynamique	$\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2}$
ρ	densité volumique de masse	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
σ	constante de Boltzman	
$\bar{\sigma}$	tenseur des contraintes	Pa
Ω	domaine d'étude	m^3
$\partial\Omega$	frontière du domaine d'étude	m^2

Indices

0	grandeurs de référence
liq	se rapportant à la phase liquide
sol	se rapportant à la phase solide

Exposants

$\partial\Omega$	se rapportant à la frontière $\partial\Omega$ du domaine Ω
------------------	---

1. INTRODUCTION

D'un point de vue technologique, la maîtrise de nombreux procédés industriels (moulage, soudage, dépôt et revêtement (*coating*), etc.), repose souvent sur la compréhension de problèmes d'interfaces. En effet, en raison de la formation d'un bain liquide, une des difficultés majeures du problème est liée à la coexistence d'une interface mobile liquide-gaz (surface libre du bain) et d'un front mobile de fusion-solidification. De nombreux travaux de recherches ont été publiés sur chacun de ces aspects, mais pris séparément. L'objet de ce travail est de présenter un modèle en mesure de considérer simultanément ces deux types d'interfaces.

Du point de vue mathématique, peu de solutions analytiques ont pu être développées pour ces problèmes en raison de leur caractère très fortement non linéaire. Ce dernier est induit par les faits suivants :

- la position des interfaces est une inconnue du problème [1] ;

- les propriétés physiques de la plupart des matériaux dépendent fortement de plusieurs paramètres, tels que par exemple la température, la cinétique de changement de phase, la forme de l'interface, etc. [2] ;

- les transferts thermiques sont, dans de nombreux cas, dominés par la convection qui se développe dans la phase liquide [3] ; en effet, outre les mouvements de convection forcée, il peut aussi apparaître des mouvements de convection naturelle dus à un gradient de densité provenant, d'une part de la dépendance de la densité à la température du fluide [4], et d'autre part de la dépendance de la densité à la concentration du fluide [5, 6] ou à un gradient de tension superficielle en présence d'une surface libre [7].

Des solutions analytiques ont néanmoins été proposées dans le cadre d'hypothèses simplificatrices, aussi bien dans le cas d'interfaces fluide-fluide que dans le cas de problèmes de changement de phase. Par exemple, le problème de conduction pure avec changement de phase isotherme a initialement servi de problème modèle à frontière mobile. En effet, les travaux précurseurs de Neumann (1860) et de Stefan (1891) ont abouti à une solution analytique dans le cas d'un changement de phase isotherme [8]. Cependant, l'application pratique des quelques solutions analytiques existantes demeure limitée aux domaines géométriques académiques (semi-finis), soumis à des conditions aux limites et initiales des plus simples.

Dans ce contexte, les méthodes numériques ont contribué à la résolution de problèmes plus généraux et plus complexes que ceux qui étaient jusque-là résolus par les méthodes analytiques. Pour cette raison, elles ont fait l'objet de très nombreuses publications au cours des dernières décennies.

Lorsqu'un seul des deux milieux situés de part et d'autre d'une interface mobile est modélisé, on parle de problème à frontière mobile. Dans ce cas, on utilise généralement des techniques d'adaptation du maillage à la position de la frontière [9, 10]. Cependant on peut se ramener à un maillage de référence fixe à l'aide d'une transformation conforme, tant que le domaine d'étude reste connexe [11]. Lorsque le problème se pose en termes d'interfaces mobiles, on peut encore utiliser dans certains cas ces méthodes. Néanmoins, dès que l'on s'intéresse à des problèmes présentant des interfaces géométriquement complexes, il est préférable d'adopter une approche eulérienne. Dans ce cas, les interfaces se transportent sur un maillage fixe.

D'autre part, dans le cadre de la résolution des problèmes de fusion-solidification, les méthodes d'adaptation du maillage à la position de l'interface ne s'appliquent qu'aux cas de changement de phase isotherme (corps purs). Dans le cas contraire (alliages...), l'interface solide-liquide n'est plus une surface de discontinuité franche, mais s'apparente alors, à l'échelle macroscopique, à une zone pâteuse où coexistent les phases liquide et solide. Dans ce cas aussi, les méthodes à maillage fixe sont préférables, en se basant sur l'hypothèse stipulant

qu'à l'échelle macroscopique les propriétés thermodynamiques varient continûment de la phase solide à la phase liquide au sein de la zone pâteuse [12]. Il devient alors possible d'établir une formulation globale des équations de conservation sur l'ensemble du domaine d'étude. Les propriétés physiques relatives à la zone pâteuse peuvent être calculées en fonction de la fraction massique des phases solide et liquide en présence [13]. De plus, les conditions d'interphases sont, par conséquent, implicitement satisfaites à l'échelle macroscopique, via les équations locales d'équilibre thermodynamique.

Dans le cadre de la résolution des problèmes à interface fluide-fluide, la majorité des modèles à maillage fixe utilise une approche similaire. La discontinuité de propriétés physiques est étalée sur une région de part et d'autre de l'interface, dont la largeur dépend de la finesse du maillage [14–17]. Cependant, cette approche est ici moins justifiée que dans le cas d'un changement de phase anisotherme, puisque à l'échelle macroscopique il existe réellement une discontinuité de propriétés physiques. Le modèle numérique que nous avons développé permet de traiter simultanément ces deux types d'interfaces, avec une approche eulérienne sur des maillages fixes non structurés :

- une ou plusieurs interfaces fluide-fluide qui présentent une discontinuité matérielle franche ; la technique de suivi d'interfaces fluide-fluide est une version modifiée de la méthode de pseudo-concentration ; après détermination de la position de chaque interface, une adaptation locale et temporaire du maillage permet de préserver la discontinuité matérielle au travers de celle-ci [18] ; cette opération permet de plus de prendre en compte les phénomènes interfaciaux tels que la tension superficielle et le rayonnement thermique ;

- un ou plusieurs fronts de changement de phase solide-liquide anisotherme ; leur suivi est assuré à l'aide d'une formulation enthalpique du problème des transferts thermiques avec prise en compte d'une zone pâteuse (changement de phase anisotherme) ; pour cette seconde classe d'interface, il n'est donc pas nécessaire de recourir à une adaptation du maillage ; par contre, les équations régissant l'écoulement sont modifiées pour modéliser les régions poreuses correspondant aux zones de changement de phase.

La modélisation physique sur laquelle est basée ce modèle numérique et son expression mathématique sont exposées au § 2. La mise en œuvre numérique n'est abordée que brièvement au § 3, car les détails peuvent être trouvés dans un précédent article [18]. La validité de cette approche est démontrée au § 4, dans lequel nous présentons une étude numérique bidimensionnelle d'un procédé de soudage par faisceau d'électrons.

2. MODÈLE MATHÉMATIQUE DU PROBLÈME

Les équations gouvernant le comportement thermomécanique du milieu continu en cours de transformation

solide-liquide sont les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Cependant, une formulation spécifique doit être utilisée pour tenir compte du fait que le milieu considéré n'est pas homogène, et que ses propriétés physiques peuvent évoluer considérablement lors du changement de phase. Ainsi, l'hétérogénéité du milieu peut être introduite à l'aide d'un modèle dérivé de l'approche biphasique [19], ou encore d'une manière plus simple, qui consiste à considérer les propriétés physiques moyennes sur le volume de contrôle [20]. Nous avons repris dans notre modèle cette dernière approche, qui donne des résultats convenables tant que l'on n'entre pas dans des considérations microscopiques.

2.1. Modèle d'écoulement

Notre modèle d'écoulement est basé sur les équations de Navier-Stokes incompressibles, modifiées pour prendre en compte les spécificités des problèmes de changement de phase (vitesse relative nulle à l'interface solide-liquide ; écoulement inter-dendritique dans la zone pâteuse) :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{f}^v + \mathbf{S}^u \quad (2)$$

où \mathbf{u} désigne le vecteur vitesse de l'écoulement et ρ la pression ; la masse volumique ρ du milieu et sa viscosité dynamique μ varient en fonction de la phase en présence ; le tenseur des contraintes $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ est donné par la loi de comportement des fluides newtoniens :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = -p \bar{\mathbf{I}} + \mu [(\nabla \otimes \mathbf{u}) + \nabla \otimes \mathbf{u}]^T \quad (3)$$

La force volumique, à l'origine des phénomènes de convection naturelle, est désignée par \mathbf{f}^v . Elle s'exprime dans notre modèle selon l'approximation de Boussinesq, par la relation :

$$\mathbf{f}^v = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] \mathbf{g} \quad (4)$$

où ρ_0 est la masse volumique du milieu à la température de référence T_0 , β le coefficient d'expansion volumique et \mathbf{g} le vecteur d'accélération de la pesanteur.

Enfin, \mathbf{S}^u est le vecteur de sollicitation introduisant les spécificités associées aux phénomènes de changement de phase solide-liquide. Son rôle est très sélectif, puisqu'il consiste à imposer uniquement dans la zone pâteuse une vitesse relative solide-liquide qui s'annule à l'approche de la phase solide. Ceci a été vérifié expérimentalement à l'échelle microscopique, où l'écoulement inter-dendritique s'apparente à celui que l'on peut observer au sein d'un milieu poreux. C'est donc naturellement en s'inspirant de la relation de Darcy que l'on exprime ce terme correctif :

$$\mathbf{S}^u = \frac{\mu}{K} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{sol}}) \quad (5)$$

où K est le coefficient de perméabilité affecté à la zone pâteuse, et $\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{sol}}$ représente le vecteur vitesse relative solide-liquide de l'écoulement inter-dendritique.

Les conditions aux limites associées au problème d'écoulement s'écrivent d'un point de vue formel :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\partial\Omega} \text{ sur } \partial\Omega_u ; \quad \mathbf{T} = \bar{\bar{\sigma}} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{T}^{\partial\Omega} \text{ sur } \partial\Omega_f \quad (6)$$

où $\mathbf{u}^{\partial\Omega}$ désigne le vecteur vitesse imposé sur la partie $\partial\Omega_u$ de la frontière du domaine d'étude Ω et $\mathbf{T}^{\partial\Omega}$ le vecteur des contraintes imposées sur la partie complémentaire $\partial\Omega_f$.

Les conditions appliquées aux interfaces fluide-fluide sont :

$$\mathbf{T}_\alpha + \mathbf{T}_\beta + \frac{\gamma}{R} \mathbf{n} + \frac{\partial\gamma}{\partial s} \mathbf{t}_g = 0 \text{ avec } \gamma = \gamma_0 + \frac{d\gamma}{dT} (T - T_0) \quad (7)$$

où \mathbf{T}_α et \mathbf{T}_β sont les vecteurs contraintes des fluides situés de part et d'autre de l'interface, R est le rayon de courbure local de l'interface, s son abscisse curviligne, \mathbf{n} et \mathbf{t}_g les vecteurs normal et tangent. Dans notre modèle, la tension de surface γ dépend linéairement de la température.

2.2. Modèle de transferts thermiques

Le modèle de transferts thermiques que nous avons adopté est basé sur une formulation enthalpique. Celle-ci convient particulièrement bien aux modèles à domaines fixes, puisqu'elle ne nécessite pas d'imposer explicitement la condition de changement de phase à l'interface solide-liquide. D'autre part, c'est aussi la formulation la plus adaptée à la résolution numérique des problèmes à changement de phase anisotherme. L'idée de base de la formulation enthalpique consiste à exprimer l'enthalpie H du milieu, comme étant la somme des enthalpies sensible h et latente ΔH . L'équation de conservation de l'énergie s'écrit dans ce cas sous la forme suivante :

$$\rho \left[\frac{\partial(h + \Delta H)}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)(h + \Delta H) \right] = -\nabla \cdot \mathbf{q} + Q \quad (8)$$

Le vecteur flux de chaleur par conduction \mathbf{q} s'exprime, d'après la loi de Fourier, pour un milieu isotrope, par la relation :

$$\mathbf{q} = -k \nabla T \quad (9)$$

où k est la conductivité thermique du milieu et T sa température.

Le terme Q de l'équation (8) représente une production volumique interne d'énergie (dissipation visqueuse, réaction chimique ou radioactive...).

Pour les milieux incompressibles, l'enthalpie sensible s'exprime simplement en fonction de la température T

et du coefficient de capacité thermique massique C_p , par la relation : $h = C_p T$.

Enfin, c'est par le biais d'une relation liant l'enthalpie latente aux caractéristiques physiques du changement de phase que l'on introduit toute la physique de ce phénomène. Il s'agit donc là encore d'une relation phénoménologique, propre à chaque type de matériau, et pour des conditions bien particulières. De nombreuses formulations ont été proposées à ce niveau [21, 22]. Cependant, nous avons retenu pour notre modèle la relation la plus simple, traduisant une dépendance linéaire de l'enthalpie latente par rapport à la température dans la zone pâteuse :

$$\Delta H = \begin{cases} 0 & \text{si } T < T_{\text{sol}} \\ L f_{\text{liq}} & \text{si } T_{\text{sol}} \leq T \leq T_{\text{liq}} \\ L & \text{si } T > T_{\text{liq}} \end{cases} \quad (10)$$

où L est la chaleur latente de changement de phase et f_{liq} la fraction liquide qui désigne le volume de liquide inter-dendritique à une température donnée. Elle est modélisée par :

$$f_{\text{liq}} = \frac{T - T_{\text{sol}}}{T_{\text{liq}} - T_{\text{sol}}} \quad (11)$$

où T_{sol} et T_{liq} sont les températures de solidus et de liquidus du matériau.

Ce paramètre permet à son tour d'exprimer le coefficient de perméabilité de l'écoulement inter-dendritique intervenant dans l'équation (5). Il s'agit encore de relations empiriques, parmi lesquelles nous retenons une expression dont le domaine d'application est assez vaste :

$$K = K_0 \left[\frac{f_{\text{liq}}^3}{1 - f_{\text{liq}}^2} \right] \quad (12)$$

où K_0 est un coefficient de perméabilité de référence.

Pour conclure cette partie, on propose de réécrire l'équation de conservation de l'énergie en séparant les contributions des enthalpies sensible et latente :

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right] + \rho \left[\frac{\partial \Delta H}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Delta H \right] = -\nabla \cdot \mathbf{q} + Q \quad (13)$$

Si, de plus, on intègre le terme d'enthalpie latente dans les sources thermiques, on retrouve une formulation identique à celle du modèle de transferts thermiques sans changement de phase :

$$\rho C_p \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right] = k \Delta T + S^T \quad (14)$$

$$\text{avec : } S^T = -\rho \left[\frac{\partial \Delta H}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Delta H \right] + Q \quad (15)$$

Le principal avantage de cette approche provient du fait qu'elle permet de construire aisément un modèle de fusion-solidification à partir du modèle de transferts thermiques sans changement de phase.

Les conditions aux limites associées au problème de transferts thermiques s'écrivent d'un point de vue formel :

$$T = T^{\partial\Omega} \text{ sur } \partial\Omega_T ; \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}^{\partial\Omega} \text{ sur } \partial\Omega_q \quad (16)$$

où $T^{\partial\Omega}$ désigne la valeur de la température imposée sur la partie $\partial\Omega_T$ de la frontière du domaine d'étude Ω et $\mathbf{q}^{\partial\Omega}$ le flux total de chaleur échangé sur la partie complémentaire $\partial\Omega_q$.

2.3. Modèle de transport de l'interface fluide-fluide

L'évolution spatio-temporelle de l'interface séparant deux fluides non miscibles est décrite dans notre modèle eulerien, par l'équation de transport du champ scalaire F (fonction de type pseudo-concentration [23]) :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F = 0 \quad (17)$$

À l'instant initial, le champ F correspond à une fonction linéaire de la distance à l'interface. La position initiale de celle-ci coïncide donc à l'isovaleur $F = F_c$, où la valeur F_c est choisie arbitrairement. Il suffit donc de suivre l'évolution de cette isovaleur pour connaître les positions successives de l'interface [18].

3. MODÈLE NUMÉRIQUE

3.1. Formulation éléments finis

La formulation éléments finis de chacun des trois modèles mathématiques décrits ci-dessus est obtenue par la démarche habituelle [24]. La méthode des résidus pondérés, appliquée respectivement aux équations (1)–(2), (14) et (17), conduit à rechercher l'annulation des trois formes intégrales associées aux problèmes d'écoulement, de transferts thermiques et de transport de l'interface. Ces expressions sont données en annexe.

Concernant l'écoulement, nous avons opté pour une formulation pénalisée en variables primitives. La discrétisation spatiale est effectuée avec un élément triangulaire à sept nœuds (T7), possédant une approximation C^0 quadratique par élément de la vitesse et discontinue linéaire par élément de la pression. L'utilisation de la formulation pénalisée, conjuguée à une approximation discontinue par élément de la pression, permet d'éliminer cette dernière par condensation statique au niveau local. Les inconnues du problème d'écoulement sont donc les composantes du vecteur vitesse en chaque nœud du maillage.

La discrétisation spatiale des deux autres problèmes est obtenue à l'aide de l'élément isoparamétrique de Lagrange triangulaire à six nœuds (T6), conduisant à

une approximation C^0 quadratique par élément de la température et du champ F .

La discrétisation temporelle des problèmes d'écoulement et de transferts thermiques est assurée par le schéma d'Euler implicite. Celle du problème de transport du champ scalaire F est, quant à elle, effectuée à l'aide du schéma de Crank–Nicholson.

3.2. Algorithme d'adaptation du maillage

L'implantation numérique de la méthode d'adaptation locale et temporaire du maillage à la position de l'interface fluide-fluide procède très synthétiquement selon les trois étapes suivantes (pour plus de détails on se reportera à l'article [18]) :

- recherche sur le maillage spécifié en données des éléments traversés par cette interface ;
- génération d'un maillage temporaire adapté à la position de cette interface par découpage de ces éléments ; c'est sur ce maillage qu'est calculé le champ de vitesses ;
- retour au maillage initial pour le calcul du champ F , avant de procéder à une nouvelle étape d'adaptation du maillage pour la nouvelle position de l'interface.

3.3. Algorithme de couplage numérique

Le couplage entre les problèmes de mécanique des fluides et de thermique est pris en compte grâce à un algorithme de résolution adapté à la formulation éléments finis découplée que nous venons de présenter. Un calcul de l'écoulement et du champ de température est effectué à chaque pas de temps sur le maillage temporaire, en commençant par la thermique lorsque c'est le moteur de l'écoulement. En fin de pas, la position de l'interface est réactualisée sur le maillage initial.

Les problèmes de mécanique des fluides et de thermique étant non linéaires, ils sont résolus par une méthode de Newton itérative, mais en se limitant à une convergence partielle à chaque pas de temps.

Pour la recherche des régimes stationnaires, s'ils existent, la valeur du pas de temps est augmentée régulièrement, en fonction de l'évolution de la solution, jusqu'à ce qu'une résolution stationnaire puisse être enclenchée. La boucle sur les pas de temps est alors remplacée par une boucle de résolutions stationnaires, qui s'achève avec la convergence de l'ensemble des problèmes.

4. APPLICATION

À titre d'application, nous présentons l'analyse thermo-hydraulique d'un procédé de soudage sous vide par faisceau d'électrons. Nous considérons le soudage



d'une plaque de grande longueur vis-à-vis de son épaisseur ($e = 0,01 \text{ m}$) et du diamètre du faisceau d'électrons ($d = 0,001 \text{ m}$), défilant à vitesse uniforme ($V_{\text{def}} = 0,01 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$). La densité surfacique de puissance résultant du bombardement électronique à la surface de la plaque est connue, supposée constante et égale à $10^7 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$.

Les inconnues de ce problème sont le champ de température dans le bain de fusion et dans la partie solide de la plaque, le champ de vitesse dans le bain liquide et enfin la déformation de la surface libre. En effet, sous l'action de la pression d'évaporation du métal (13,34 Pa), la surface libre se creuse en formant un *key hole*. Celui-ci modifie la surface d'application de la source de chaleur et par conséquent la géométrie du bain de fusion.

Dans la modélisation de ce problème, nous introduisons les hypothèses restrictives suivantes :

- l'étude peut être restreinte à une analyse bidimensionnelle dans le plan de symétrie du problème ;
- la plaque peut être considérée infinie dans la direction de défilement ;
- parmi les propriétés physiques, seule la tension superficielle dépend continûment de la température, conformément à l'équation (7) ; d'autre part, la conductivité thermique est doublée lors de la transition de phase liquide-solide ; les autres propriétés demeurent constantes ; les valeurs correspondant au matériau considéré (alliage d'aluminium) sont :

$$\rho = 2500 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3} ; \mu = 0,003 \text{ N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2} ;$$

$$\gamma_0 = 0,1 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1} ; \frac{d\gamma}{dT} = -0,0003 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$C_P = 1000 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} ; k_{\text{liq}} = 100 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} ;$$

$$k_{\text{sol}} = 200 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1} ; \varepsilon = 0,5 ;$$

$$T_{\text{liq}} = 1450 \text{ }^\circ\text{C} ; T_{\text{sol}} = 1400 \text{ }^\circ\text{C}$$

Pour la modélisation, nous nous plaçons dans le repère lié au faisceau d'électrons. La vitesse u_{sol} apparaissant dans l'équation (5) est alors égale à V_{def} dans la direction de défilement de la plaque. Un schéma descriptif du problème modélisé est présenté sur la figure 1. Les conditions aux limites s'énoncent :

- pour l'écoulement :
 - vitesse de défilement imposée sur la frontière solide du bain liquide ;
 - contraintes à la surface libre du bain liquide imposées par la tension superficielle et la pression d'évaporation sous le faisceau d'électrons, conformément à l'équation (7) ;
- pour les transferts thermiques :
 - flux convectif sur la section d'entrée ($\rho C_P V_{\text{def}} (T - T_0)$, avec $T_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$) ;
 - flux radiatif sur les frontières horizontales et sur la surface libre ($\varepsilon\sigma(T^4 - T_0^4)$, avec $T_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$) ;
 - libre sur la section de sortie.

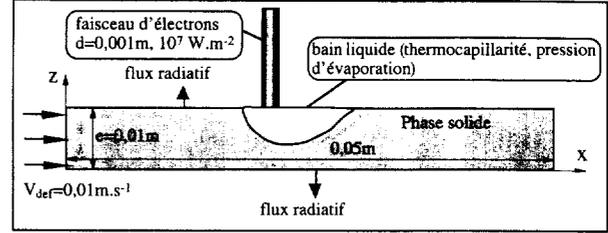


Figure 1. Schéma descriptif du problème d'application.
Figure 1. Sketch of the studied problem.

Le maillage utilisé pour le calcul est représenté sur la figure 2. Il est constitué de 9477 nœuds et 2900 éléments triangulaires (T6 pour la thermique, T7 pour l'écoulement). La région du bain liquide est maillée beaucoup plus finement, en raison des gradients de vitesse et de température très importants qui y règnent. La figure 2b présente un agrandissement de la vue du maillage centrée sur cette zone. Pour le calcul de l'écoulement, seuls les éléments contenant du fluide sont considérés. Pour les nœuds situés dans la phase solide, la vitesse est imposée à la vitesse de défilement de la plaque. Les sections d'entrée et de sortie ont été repoussées à une distance de plus de 20 fois le diamètre du faisceau, distance à partir de laquelle les résultats ne sont sensiblement plus modifiés.

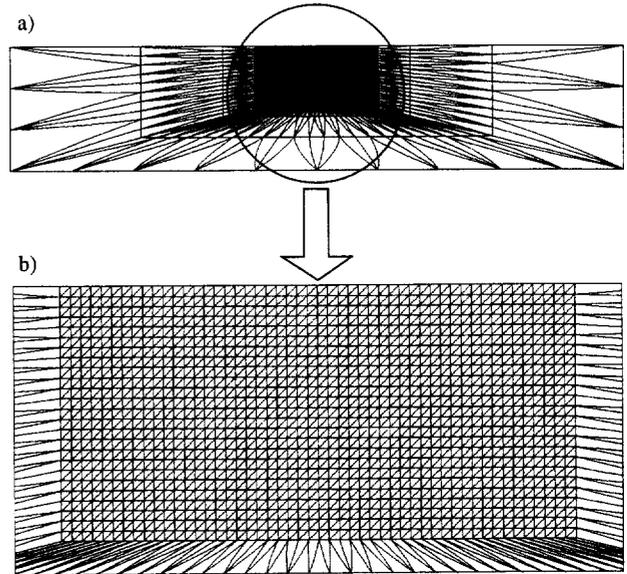


Figure 2. Maillage : a) vue d'ensemble, b) zoom sur la région du bain liquide.

Figure 2. Mesh : a) overview, b) zoom of the molten pool region.

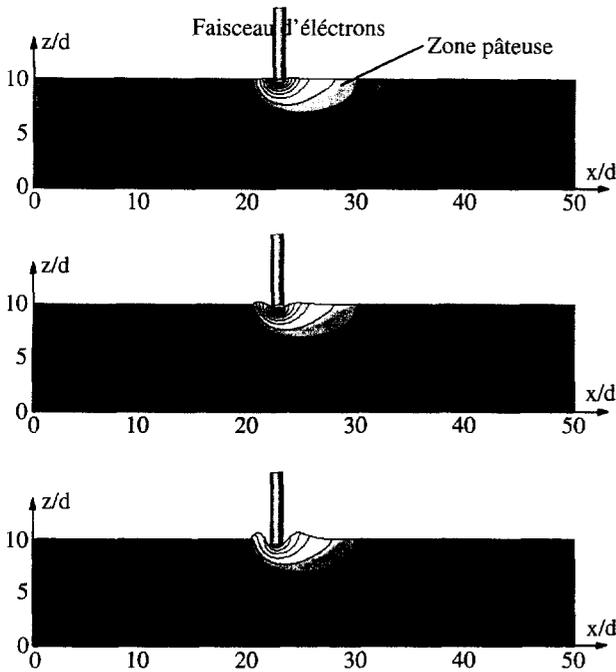


Figure 3. Isothermes sur l'ensemble du domaine d'étude : a) $t = 1,2$ s ; b) $t = 2,4$ s ; c) $t = 7,2$ s.

Figure 3. Overview of the isotherms: a) $t = 1.2$ s ; b) $t = 2.4$ s ; c) $t = 7.2$ s.

Les résultats sont illustrés sur les figures 3 à 6, pour trois valeurs successives du temps ($t = 1,2$ s, $t = 2,4$ s et $t = 7,2$ s), compté à partir de l'instant où le faisceau d'électrons commence à creuser la surface libre du bain liquide.

La figure 3 présente l'évolution des isothermes sur l'ensemble du domaine d'étude. On peut observer que, à part dans la région du bain liquide, le champ de température est très peu influencé par le creusement de la surface libre. Le métal solide entre dans le domaine d'étude à une température de l'ordre de 800 °C et en ressort à environ 1350 °C.

L'évolution des isothermes et des lignes de courant (construites sur la vitesse relative liquide-solide) dans le bain liquide en cours de creusement est représentée sur les figures 4 et 5 respectivement. On peut observer sur la figure 5 que le processus de creusement modifie complètement la configuration des lignes de courant. L'intensité maximale de la vitesse passe de $0,193$ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ($t = 1,2$ s ; figure 5a) à $0,524$ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ durant la phase de creusement ($t = 2,4$ s ; figure 5b) pour retomber à $0,183$ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ en fin de creusement ($t = 7,2$ s, figure 5c). De plus, l'écoulement que l'on récupère en fin de creusement est très différent de celui que l'on obtient avec une surface libre indéformable. Il est bien entendu toujours dominé par l'action de la tension superficielle (ce qui n'est pas le cas pendant la phase de creusement),

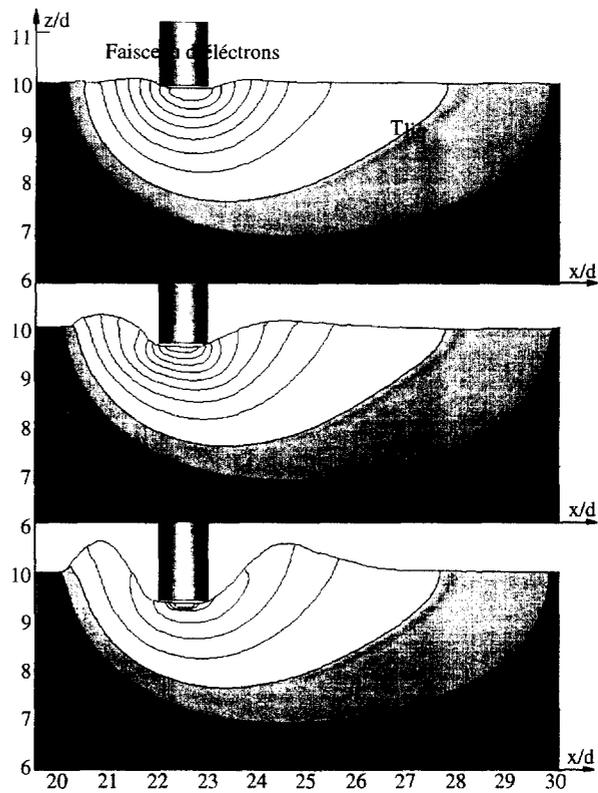


Figure 4. Isothermes dans la région du bain liquide : a) $t = 1,2$ s ; b) $t = 2,4$ s ; c) $t = 7,2$ s.

Figure 4. Isotherms in the molten pool region: a) $t = 1.2$ s ; b) $t = 2.4$ s ; c) $t = 7.2$ s.

mais le rouleau convectif situé à l'arrière du faisceau est déplacé vers le centre du bain liquide. Cet effet peut être imputé à la force de tension capillaire qui est maintenant dirigée de bas en haut au voisinage du *key hole*.

L'influence sur le champ de température est moins flagrante sur la figure 4, en raison de la faible valeur du nombre de Prandtl du matériau considéré. Lorsque la surface libre est encore plane (figure 4a), les isothermes se répartissent de façon relativement régulière depuis le point d'impact du faisceau, où la température atteint son maximum, de l'ordre de 2040 °C. L'influence du défilement de la plaque se traduit par une elongation des isothermes dans cette direction, avec un resserrement en amont du faisceau et étalement en aval. En fin de creusement (figure 4c), cette répartition des isothermes est quelque peu perturbée par les bourrelets qui se sont formés au voisinage du *key hole*. De plus, durant la phase de creusement (figure 4b), la température maximale (au point d'impact du faisceau) augmente (2100 °C à $t = 2,4$ s), pour retomber à environ 1927 °C en fin de creusement.

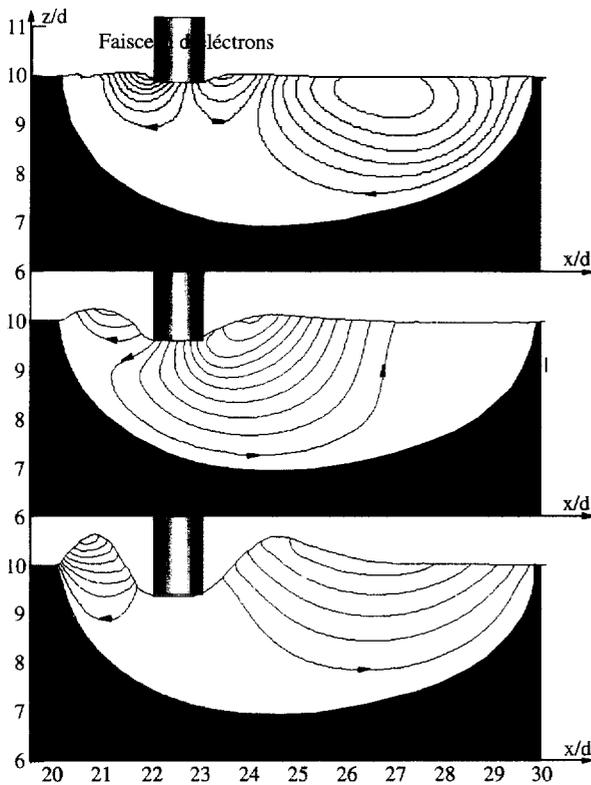


Figure 5. Lignes de courant dans la région du bain liquide : a) $t = 1,2$ s ; b) $t = 2,4$ s ; c) $t = 7,2$ s.

Figure 5. Stream lines in the molten pool region: a) $t = 1.2$ s ; b) $t = 2.4$ s ; c) $t = 7.2$ s.

La figure 6 donne l'évolution de la longueur (distance entre les points culminants des deux bourrelets) et de la profondeur (différence d'altitude moyenne entre le fond et les points culminants des deux bourrelets) du *key hole*.

5. CONCLUSION

Nous avons présenté un modèle aux éléments finis bidimensionnel, qui permet d'aborder la simulation des transferts thermiques au sein d'un bain liquide, avec prise en compte simultanée du front de solidification et de la déformation de la surface libre. Pour démontrer la validité de cette approche, nous avons appliqué le modèle à l'analyse thermohydraulique d'un procédé de soudage par faisceau d'électrons. Bien entendu, les résultats de ce calcul bidimensionnel ne peuvent être que qualitatifs, étant donné le caractère tridimensionnel de ce type de problème. Notons à ce sujet que l'erreur croît avec la profondeur du *key hole*. C'est pour cette

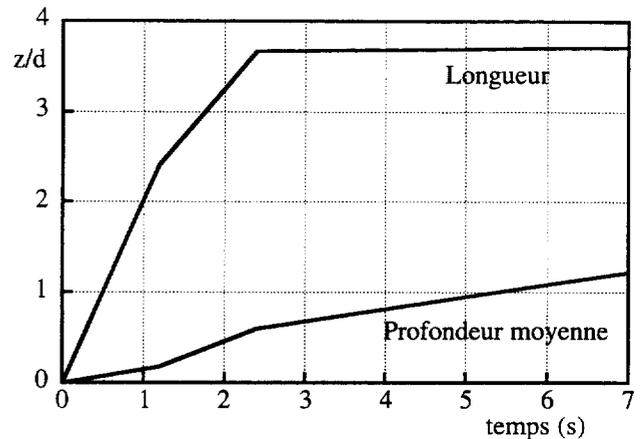


Figure 6. Évolution des paramètres caractéristiques de la géométrie du *key hole*.

Figure 6. Evolution of the 'key hole' size (deph and length).

raison que l'amplitude de creusement considérée dans cette étude reste très faible en comparaison des valeurs communément rencontrées. Cependant, l'extension du modèle à l'analyse tridimensionnelle ne pose aucune difficulté de principe. De plus, la technique de suivi d'interface utilisée possède le potentiel nécessaire pour traiter des *key holes* plus prononcés.

RÉFÉRENCES

- [1] Crank J., Free and Moving Boundary Problems, Oxford Science Publications, 1984.
- [2] Flemings M.C., Solidification Processing, Materials Science and Engineering Series, McGraw-Hill, 1974.
- [3] Gau C., Viskanta R., Melting and solidification of a pure metal on a vertical wall, J. Heat Trans.-T. ASME 108 (1986) 174-181.
- [4] Lacroix M., Computation of heat transfer during melting of pure substance from an isothermal wall, Numer. Heat Tr. B-Fund. 15 (1989) 191-210.
- [5] Chérel J.-M., Étude expérimentale et numérique de l'écoulement convectif dû à la cristallisation d'un sel en milieu confiné, Thèse, université de Provence, Marseille, 1985.
- [6] Benard C., Benard D., Bennacer R., Gobin D., Fusion d'un matériau pur dans un mélange binaire : étude expérimentale et numérique des écoulements de convection thermosolutale, in : Journée SFT, 17 mars 1994, Nantes.
- [7] Liu A., Voth T.E., Bergman T.L., Pure material melting and solidification with liquid phase buoyancy and surface tension forces, Int. J. Heat Mass Tran. 36 (2) (1993) 411-422.
- [8] Carslaw H.S., Jaeger J.C., Conduction of Heat in Solids, Clarendon Press, Oxford, 1959.
- [9] Tsiveriotis K., Brown R.A., Solution of free-boundary problems using finite-element/Newton methods and locally

refined grids: application to analysis of solidification microstructure, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 16 (1993) 827-843.

[10] Péneau S., Contrôle optimal et optimisation de forme des problèmes à frontière libre. Application à un système thermique avec changement de phase, Thèse, École centrale de Nantes, 1995.

[11] Gobin D., Rôle de la convection thermique dans les processus de fusion-solidification, École d'été GUT-CET «Modélisation numérique en thermique», 29 juin-4 juillet 1992, Cargèse.

[12] Voller V.R., Swaminathan C.R., Thomas B.G., Fixed grid techniques for phase change problems: a review, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 30 (1990) 875-898.

[13] Bennon W.D., Incropera F.P., A continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems. 1. Model formulation, 2. Application to solidification in a rectangular cavity, *Int. J. Heat Mass Tran.* 30 (10) (1987) 2161-2187.

[14] Harlow F.H., Welch J.E., Numerical study of large amplitude free surface motion, *Phys. Fluids* 9 (1965) 842-851.

[15] Hirt C.W., Nichols B.D., Volume of fluid (VOF) methode for the dynamics of free boundaries, *J. Comput. Phys.* 39 (1981) 201-225.

[16] Brackbill J.U., Kothe D.B., Zemach C., A continuum method for modeling surface tension, *J. Comput. Phys.* 100 (1992) 335-352.

[17] Unverdi S.O., Tryggvason G., A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows, *J. Comput. Phys.* 100 (1992) 25-37.

[18] Lock N., Jaeger M., Médale M., Occelli R., Local mesh adaptation technique for front tracking problems, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 28 (1998) 719-736.

[19] Ni J., Incropera F.P., Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification. 1. The conservation equations. 2. Microscopic considerations, *Int. J. Heat Mass Tran.*, 38 (7) (1995) 1271-1296.

[20] Voller V.R., Prakash C., A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase change problems, *Int. J. Heat Mass Tran.* 24 (1987) 1709-1718.

[21] Rappaz M., Modelling of microstructure formation in solidification processes, *Int. Mater. Rev.* 34 (1989) 93-123.

[22] Reddy M.P., Reddy J.N., Numerical simulation of forming processes using a coupled fluid flow and heat transfer model, *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 35 (1992) 807-833.

[23] Thomson E., Use of pseudo-concentrations to follow creeping viscous flows during transient analysis, *Int. J. Numer. Meth. Fl.* 6 (1986) 749-761.

[24] Carey G.F., Oden J.T., *The Texas Finite Element Series*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1986.

ANNEXE

La méthode des résidus pondérés, appliquée au système d'équations de Navier-Stokes (1)-(2), conduit à rechercher l'annulation de la forme intégrale :

$$\int_D \left(\rho \delta \mathbf{u} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] + p \nabla \cdot \delta \mathbf{u} + \mu \left[(\nabla \otimes \delta \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \delta \mathbf{u})^T \right] \cdot [(\nabla \otimes \mathbf{u}) + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T] - \delta \mathbf{u} \cdot (\mathbf{f}^v + \mathbf{S}^u) \right) dS + \int_D \delta p \left(\nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{p}{\lambda} \right) dS - \int_{\partial D} \delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{T} dl$$

sur le domaine d'étude D , de frontière ∂D , quelles que soient les fonctions test admissibles $\delta \mathbf{u}$ et δp .

La méthode des résidus pondérés, appliquée à l'équation de la chaleur (14) conduit à rechercher l'annulation de la forme intégrale :

$$\int_D \left(\rho C_P \delta T \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right) + k (\nabla \cdot \delta T) (\nabla \cdot T) - \delta T S^T \right) dS - \int_{\partial D} k \delta T \frac{\partial T}{\partial n} dl$$

sur le domaine d'étude D , de frontière ∂D , quelle que soit la fonction test admissible δT .

La méthode des résidus pondérés, appliquée à l'équation de transport (17), conduit à rechercher l'annulation de la forme intégrale :

$$\int_D \delta F \left(\frac{\partial F}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F \right) dS$$

sur le domaine d'étude D , de frontière ∂D , quelle que soit la fonction test admissible δF .

Abridged English Version

A finite element thermal analysis of flows with free and moving boundaries

This paper aims to present a numerical model able to deal with thermal fluid flow problems in which two different kinds of moving interfaces coexist. The first type to be considered is a non-isothermal solid-liquid phase change front, whereas the second one is a non-miscible fluid-fluid interface. Each one has separately led to a considerable amount of research and publications; nevertheless very few numerical models are able to deal with both kinds of interface in the same problem. The main reason is that they have different features. Indeed, we consider on the one hand an alloy-type solid-liquid phase change where a mushy region spreads over the solidus-liquidus temperature range, and on the other hand the interface between two non-miscible fluids which remains at the macroscopic scale very steep.

So the Eulerian finite element model we have designed combines two approaches in order to deal with such problems. In the first one an enthalpy formulation of the heat transfer problem is used to account for the non-isothermal phase change. In the second one, a local mesh adaptation is performed to accurately fit the mesh to the moving fluid-fluid interface. It consists in dividing crossed interface elements such that at least one of the generated element boundaries lies along the interface. This temporary mesh is then used to compute the flow field, taking into account the material discontinuity across the interface together with possible surface tension mechanism.

The originality of the finite element model we present stems from two main points. First, the whole physical problem is splitted up into a thermal problem, a fluid flow problem and a front tracking one. Then, specific finite element models are built corresponding to this segregation. Second, a solution algorithm proceeds in a sequential way so as to computationally recover the physical couplings.

This bidimensional model could address applications in which the heat transfer problem features a non-isothermal solid-liquid phase change together with a fluid flow problem where a moving free surface or fluid-fluid interface has to be considered. We have in mind many examples of application of metallic transformation processes such as mould filling, welding, coating, etc. where solid and liquid phases coexist.

In this paper, we present as example a numerical study of an electron beam welding process. The real problem is actually three-dimensional owing to the relative movement of the metallic pieces toward the electron beam and the formation of a 'key hole'. Nevertheless we have simulated this problem with our bidimensional model in the case where the 'key hole' depth remains small relative to the molten pool extension. Whenever the results can only yield to qualitative interpretation, they demonstrate the validity of the approach. Moreover the model can be extended to three-dimensional analysis without theoretical difficulties.

