



Etude numerique de la solidification d'un alliage a N composants

A. Bermudez, Ch. Saguez

► **To cite this version:**

A. Bermudez, Ch. Saguez. Etude numerique de la solidification d'un alliage a N composants. RR-0137, INRIA. 1982. inria-00076423

HAL Id: inria-00076423

<https://hal.inria.fr/inria-00076423>

Submitted on 24 May 2006

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

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

IRIA

CENTRE DE ROCQUENCOURT

Institut National
de Recherche
en Informatique
et en Automatique

Domaine de Voluceau
Rocquencourt
BP 105
78153 Le Chesnay Cedex
France
Tél. 954 90 20

Rapports de Recherche

N° 137

**ÉTUDE NUMÉRIQUE
DE LA SOLIDIFICATION
D'UN ALLIAGE
À N COMPOSANTS**

**Alfredo BERMUDEZ
Christian SAGUEZ**

Juin 1982

ETUDE NUMERIQUE DE LA SOLIDIFICATION

D'UN ALLIAGE A N COMPOSANTS

A. BERMUDEZ^{*}, C. SAGUEZ^{**}

RESUME

Nous étudions la solidification d'un alliage à N composants. Dans une première partie, une formulation mathématique, généralisant le cas des alliages binaires, est proposée. Dans une deuxième partie, nous considérons un problème discrétisé en temps. Nous démontrons, pour ce problème, l'existence d'une solution maximale et d'une solution minimale, en construisant par récurrence des suites alternées. Nous en déduisons un algorithme de résolution numérique dont nous prouvons la convergence. Des résultats numériques en dimension 2 pour un alliage ternaire sont présentés.

ABSTRACT

In this paper, the solidification of an alloy with N components is studied. In a first part, a general mathematical formulation is proposed. In a second part a problem semi-discretized in time is considered. For this problem, the existence of a maximal solution and a minimal solution is proved; the proof is based on the construction of alternating sequences. A numerical algorithm, the convergence of which is proved, is deduced. Finally numerical results, for a ternary alloy, in a two dimensional case, are presented.

* Université de Santiago de Compostela - Espagne

** INRIA, Domaine de Voluceau, 78153 Le Chesnay - France

INTRODUCTION.

Nous étudions dans cet article, d'un point de vue numérique, le problème de la solidification d'un alliage avec N composants ($N \geq 2$). La prise en compte de la composition physique du corps joue, en effet, un rôle important au niveau du processus de solidification ; en particulier la température de solidification, qui dépend de la composition, peut varier de façon significative (M. Flemings [9]).

Nous nous intéressons ici au cas général d'un alliage à N composants (une méthode spécifique pour un alliage binaire a été étudiée dans A. Bermudez-C. Saguez [2]). Nous nous sommes placés dans le cas du modèle considéré dans K.H. Tacke -A. Grill- K. Miyazawa -K. Schwerdtfeger [13].

Un tel système est caractérisé par :

- la dépendance de la température de solidification en fonction des différentes concentrations,
- N équations de diffusion couplées (équation thermique et évolution des concentrations de $N-1$ composants),
- la discontinuité des concentrations le long de l'interface solide-liquide.

Dans une première partie, nous proposons la généralisation de la formulation mathématique considérée pour des alliages binaires, en utilisant la notion de graphes maximaux monotones. La formulation générale introduite tient compte, en particulier, de la présence possible d'une zone pateuse à l'interface solide-liquide.

Dans une deuxième partie, nous considérons un système associé semi-discrétisé en temps. Nous montrons, par une méthode constructive, l'existence d'une solution minimale et d'une solution maximale pour ce système. Pour cela, nous construisons des suites (température et concentrations) alternées, dont les limites supérieures et inférieures sont solutions du système.

Dans une troisième partie, nous déduisons de l'étude précédente un algorithme numérique de résolution dont nous démontrons la convergence et nous étudions l'approximation du système par une méthode d'éléments finis. Des résultats numériques en dimension 2 pour le cas d'un alliage ternaire (Fe,C,Mn).

Le plan de l'article est le suivant :

1. - Problème physique et formulation mathématique
 - 1.1. - Cas sans zone pateuse
 - 1.2. - Cas avec zone pateuse
 - 1.3. - Formulation mathématique générale.
2. - Etude d'un problème semi-discrétisé en temps.
3. - Méthodes numériques
 - 3.1. - Algorithme de résolution
 - 3.2. - Approximation numérique
 - 3.3. - Résultats numériques

1. - PROBLEME PHYSIQUE ET FORMULATION MATHEMATIQUE

On étudie la solidification d'un alliage à (N+1) composants dans un domaine Ω de \mathbb{R}^n ($n \leq 3$) (Ω ouvert, borné, de frontière régulière). L'état physique de l'alliage est défini par les variables :

$\theta(x,t)$ température du corps
 $C_i(x,t)$ concentration du composant i.

On ne considère que N concentrations ($i=1, \dots, N$), C_{N+1} étant obtenu par la formule :

$$C_{N+1} = 1 - \sum_{i=1}^N C_i$$

(en pratique C_{N+1} est la concentration du composant le plus important F_e par exemple dans le cas d'un acier). Nous reprenons les hypothèses considérées dans K.H. Tacke - A. Grill - K. Miyazawa - K. Schwerdtfeger [13].

1.1. - Cas sans zone pateuse

Dans une première étape, on suppose que l'interface liquide-solide est constitué d'une surface $S(t)$. On note $\Omega_1(t)$ la zone liquide et $\Omega_2(t)$ la zone solide ($\Omega = \Omega_1 \cup S \cup \Omega_2$). On a les équations suivantes :

$$(1.1) \quad \rho k \frac{\partial \theta^j}{\partial t} - \text{div} (\alpha^j \text{grad } \theta^j) = 0 \quad \text{dans } \Omega_j(t), (j=1,2)$$

$$(1.2) \quad \frac{\partial C_i^j}{\partial t} - \text{div} (\beta_i^j \text{grad } C_i^j) = 0 \quad \text{dans } \Omega_j(t)$$

($j = 1,2 ; i = 1, \dots, N$).

(θ^j est la température dans $\Omega_j(t)$, C_i^j la concentration du composant i dans $\Omega_j(t)$)

avec :

- ρ densité du corps
- k capacité calorifique
- α^j conductivité thermique dans la phase j
- β_i^j coefficient de diffusion de masse dans la phase j pour le composant i.

Le long de l'interface S(t), on a les conditions :

$$\begin{aligned}
 (1.3) \quad & \left\{ \begin{aligned} & (\alpha^1 \operatorname{grad} \theta^1 - \alpha^2 \operatorname{grad} \theta^2) \cdot \vec{n} = -\rho L \vec{U} \cdot \vec{n} \\ & (\beta_i^1 \operatorname{grad} C_i^1 - \beta_i^2 \operatorname{grad} C_i^2) \cdot \vec{n} = -(C_i^1 - C_i^2) \vec{U} \cdot \vec{n} \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned} \right. \\
 (1.4) \quad & \\
 (1.5) \quad & \left\{ \begin{aligned} & \theta^1 = \theta^2 = \theta_d - \sum_{i=1}^N \delta_i C_i^1 \\ & C_i^2 = \xi_i C_i^1 \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned} \right. \\
 (1.6) \quad &
 \end{aligned}$$

avec :

- L chaleur latente de changement de phase
- \vec{U} vitesse de déplacement du front de solidification
- \vec{n} vecteur normal unité
- θ_d température de solidification du composant N+1 pur ($C_i = 0, i = 1, \dots, N$)
- δ_i, ξ_i constantes positives données.

On considère les conditions aux bords :

$$\begin{aligned}
 (1.7) \quad & \left\{ \begin{aligned} & \alpha \frac{\partial \theta}{\partial n} = q(t) \text{ sur } \Sigma = \partial \Omega \times]0, T[\\ & \frac{\partial C_i}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \Sigma \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned} \right. \\
 (1.8) \quad &
 \end{aligned}$$

et les conditions initiales :

$$(1.9) \quad \theta(x, 0) = \theta_0(x) ; C_i(x, 0) = C_{0,i}(x) \quad (i=1, \dots, N).$$

Remarque 1.1. :

Avec les notations précédentes, la surface du liquidus est donnée par l'hyperplan :

$$\theta = \theta_d - \sum_{i=1}^N \delta_i C_i$$

et la surface du solidus par l'hyperplan :

$$\theta = \theta_d - \sum_{i=1}^N \frac{\delta_i}{\xi_i} C_i$$

On pourrait considérer le cas où ces surfaces sont, de manière générale, déterminées par des fonctions non linéaires monotones par rapport à

chaque concentration C_i comme dans A. Bermudez- C. Saguez [2] pour le cas d'un alliage binaire. ■

Remarque 1.2. :

On se ramène, dans la suite, après une translation éventuelle, au cas $\theta_d = 0$. ■

Remarque 1.3. :

Les conditions aux bords (1.7), (1.8) sont considérées à titre d'exemple mais ne restreignent en rien la généralité de l'étude. D'autres conditions pourraient être utilisées. D'autre part, tout ce qui suit s'adapte immédiatement au cas où ρ et k dépendent de la température. ■

Comme dans le cas d'un alliage binaire (A.B. Crowley - J. Ockendon [5], G.J. Fix [8]), afin de traiter la discontinuité des concentrations le long de $S(t)$, on introduit les nouvelles variables $W_i(x,t)$ définies par :

$$(1.10) \quad \left\{ \begin{array}{l} W_i = -\delta_i C_i^1 \quad \text{dans } \Omega_1(t) \\ W_i = -\frac{\delta_i}{\xi_i} C_i^2 \quad \text{dans } \Omega_2(t) \quad (i = 1, \dots, N) \end{array} \right.$$

Alors les variables W_i vérifient le système (correspondant à (1.2), (1.4), (1.6)) :

$$(1.11) \quad \left\{ \begin{array}{l} \sigma_i^j \frac{\partial W_i^j}{\partial t} - \text{div} (\beta_i^j \sigma_i^j \text{grad } W_i^j) = 0 \quad \text{dans } \Omega_j(t) \end{array} \right.$$

$$(1.12) \quad \left\{ \begin{array}{l} W_i^1 = W_i^2 |_{S(t)} \end{array} \right.$$

$$(1.13) \quad \left\{ \begin{array}{l} (\beta_i^1 \sigma_i^1 \text{grad } W_i^1 - \beta_i^2 \sigma_i^2 \text{grad } W_i^2) \cdot \vec{n} |_{S(t)} = -(\sigma_i^1 - \sigma_i^2) W_i |_{S(t)} \vec{e} \cdot \vec{n} \\ (i = 1, \dots, N) \end{array} \right.$$

avec :

$$\sigma_i^1 = -\frac{1}{\delta_i} \quad ; \quad \sigma_i^2 = -\frac{\xi_i}{\delta_i}$$

Si on note :

$$\tilde{W} = \sum_{i=1}^N W_i, \quad W = (W_1, \dots, W_N),$$

la zone liquide est caractérisée par :

$$\Omega_1(t) = \{x \mid \theta(x,t) > \tilde{W}(x,t)\}$$

et la zone solide par :

$$\Omega_2(t) = \{x \mid \theta(x,t) < \tilde{W}(x,t)\}$$

En opérant comme dans A. Bermudez - C. Saguez [2], on obtient la formulation globale suivante :

$$(1.14) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div} (\alpha(\theta, \tilde{W}) \operatorname{grad} \theta) = 0 \quad \text{dans } Q = \Omega \times]0, T[\\ (1.15) \quad \frac{\partial v}{\partial t} - \operatorname{div} (\gamma(W, \tilde{\theta}) \operatorname{grad} W) = 0 \quad \text{dans } Q \\ (1.16) \quad u \in H_{\tilde{W}}(\theta) \quad ; \quad v \in G_{\tilde{\theta}}(W) \quad (v = (v_i); i=1, \dots, N) \end{array} \right.$$

avec :

$$\tilde{\theta} = (\tilde{\theta}_i, i=1, \dots, N) \quad ; \quad \tilde{\theta}_i = \theta - \sum_{l \neq i} W_l$$

$$\alpha(\theta, \tilde{W}) = \begin{cases} \alpha^1 & \text{si } \theta > \tilde{W} \\ \alpha^2 & \text{si } \theta < \tilde{W} \end{cases}$$

$$\gamma(W, \tilde{\theta}) = (\gamma_i(W_i, \tilde{\theta}_i)); i=1, \dots, N$$

$$\gamma_i(W_i, \tilde{\theta}_i) = \begin{cases} -\sigma_i^1 \beta_i^1 & \text{si } \tilde{\theta}_i > W_i \\ -\sigma_i^2 \beta_i^2 & \text{si } \tilde{\theta}_i < W_i \end{cases}$$

où $H_{\tilde{W}}(\theta)$ et $G_{\tilde{\theta}}(W) = (G_{\tilde{\theta}_i}^i(W_i)); i=1, \dots, N$ sont définis comme suit :

$$H_{\tilde{W}}(\theta) = \{u \in L^2(\Omega) \mid u(x) \in \mathcal{H}_{\tilde{W}(x)}(\theta(x))\}$$

$$G_{\tilde{\theta}_i}^i(W_i) = \{v_i \in L^2(\Omega) \mid v_i(x) \in \mathcal{G}_{\tilde{\theta}_i(x)}^i(W_i(x))\}$$

avec pour $\mathcal{H}_r(s)$ et $y_r^i(s)$ les graphes :

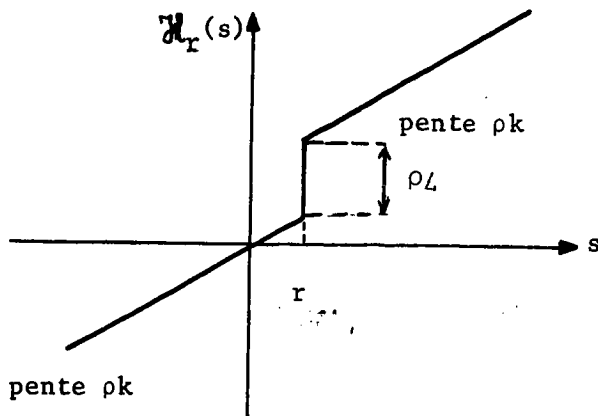


Figure 1.1

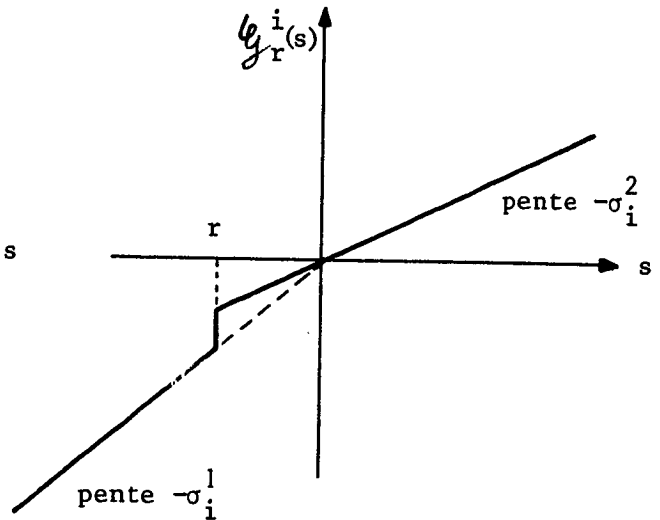


Figure 1.2

Remarque 1.4. :

La variable $v_i(x,t)$ correspond à l'opposée de la concentration du ième composant, soit $-C_i(x,t)$.

1.2. - Cas avec zone pateuse

Dans le cas de l'existence d'une zone pateuse, c'est-à-dire lorsque $\mathcal{M} \{(x,t) \mid \theta(x,t) = \hat{W}(x,t)\} > 0$, les équations (1.3), (1.6) ne peuvent plus être considérées telles quelles. Cependant, la formulation (1.14), (1.16) peut se généraliser comme suit.

Dans la zone pateuse, on suppose qu'un élément de volume contient une partie solide et une partie liquide en équilibre thermodynamique (c'est-à-dire $\frac{C_i^1}{\sigma_i^1} = \frac{C_i^2}{\sigma_i^2} = W_i$, $i=1, \dots, N$ et $\hat{W} = \theta$).

On introduit la fraction liquide f et la concentration moyenne de chaque composant, soit :

$$\bar{C}_i(x,t) = f(x,t)C_i^1(x,t) + (1-f(x,t))C_i^2(x,t) \quad i=1, \dots, N$$

En opérant comme dans A. Bermudez - C. Saguez [2], on obtient alors la formulation (1.14), (1.16) avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha(f) = f \alpha^1 + (1-f)\alpha^2 \\ \gamma_i(f) = -f \beta_i^1 \sigma_i^1 - (1-f)\beta_i^2 \sigma_i^2 \\ f = \frac{u - \rho k \theta}{\rho L} \end{array} \right.$$

1.3. - Formulation mathématique générale

Dans tous les cas, on obtient donc la formulation variationnelle suivante.

Soit $V = H^1(\Omega)$ et V' le dual de V . On introduit les opérateurs A et B_i définis par :

$$(A(\theta, f), z)_{V' - V} = \int_{\Omega} \alpha(f) \text{grad } \theta \text{ grad } z \, d\Omega$$

$$(B_i(W_i, f), z)_{V' - V} = \int_{\Omega} \gamma_i(f) \text{grad } W_i \text{ grad } z \, d\Omega$$

et $h \in L^2(0, T; V')$ par :

$$(h(t), z)_{V' - V} = \int_{\partial\Omega} q(t) z \, d\Gamma.$$

On obtient alors :

$$(1.17) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + A(\theta, f) = h \quad ; \quad u \in H_{\tilde{W}}(\theta) \end{array} \right.$$

$$(1.18) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v_i}{\partial t} + B_i(W_i, f) = 0 \quad ; \quad v_i \in G_{\tilde{\theta}_i}^i(W_i), \quad (i=1, \dots, N) \\ f = \frac{u - \rho k \theta}{\rho L} \end{array} \right.$$

$$(1.19) \quad \left\{ \begin{array}{l} u(x, 0) = u_0(x) \in H_{\tilde{W}_0}(\theta_0) \quad ; \quad v_i(x, 0) = v_{0,i}(x) \in G_{\tilde{\theta}_{0,i}}^i(W_{0,i}) \end{array} \right.$$

avec :

$$\tilde{W} = \sum_{i=1}^N W_i \quad ; \quad \tilde{\theta}_i = \theta - \sum_{\ell \neq i} W_{\ell}$$

et

$$v_{0,i}(x) = -C_{0,i}(x).$$

$$\Psi_y(z) = \int_{\Omega} \psi_{y(x)}(z(x)) dx.$$

$$\Phi_y^i(z) = \int_{\Omega} \phi_{y(x)}^i(z(x)) dx.$$

où $\psi_r(s)$ et $\phi_r^i(s)$ fonctions de \mathbb{R} dans \mathbb{R} sont définis par :

$$\partial \psi_r(s) = \frac{\mathcal{H}_r(s)}{\Delta t} \quad ; \quad \psi_r(0) = 0$$

$$\partial \phi_r^i(s) = \frac{\mathcal{G}_r^i(s)}{\Delta t} \quad ; \quad \phi_r^i(0) = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, N$$

(de telles fonctions existent car \mathcal{H}_r et \mathcal{G}_r^i sont des graphes maximaux monotones de \mathbb{R} dans \mathbb{R}).

Nous obtenons ici une formulation du type inéquation quasi-variationnelle (J.L. Lions [11], L. Tartar [14]) et non inéquation variationnelle comme dans le cas d'un problème de Stéfan classique.

On démontre un résultat d'existence pour le problème (2.4), (2.5) sous les hypothèses générales suivantes qui sont vérifiées dans le cas du problème (2.1), (2.3) :

$$\text{H1) Si } y^1 \leq y^2 \text{ (} y^l \in L^2(\Omega) \text{) alors } \Psi_{y^2}(z) \leq \Psi_{y^1}(z) \text{ et } \Phi_{y^2}^i(z) \leq \Phi_{y^1}^i(z) \\ \forall i = 1, \dots, N, \forall z \in L^2(\Omega).$$

H2) Il existe des constantes positives m_1 et m_2^i telles que :

$$\forall p^1 \in H_y(z^1), \forall p^2 \in H_y(z^2) \quad (p^1 - p^2, (z^1 - z^2)^+) \geq m_1 \| (z^1 - z^2)^+ \|_{L^2(\Omega)}^2$$

$$\forall q^1 \in G_y^i(z^1), \forall q^2 \in G_y^i(z^2) \quad (q^1 - q^2, (z^1 - z^2)^+) \geq m_2^i \| (z^1 - z^2)^+ \|_{L^2(\Omega)}^2$$

H3) Il existe des constantes positives K_1 et K_2^i telles que :

$$a(z, z) + \Psi_y(z) \geq K_1 \|z\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad \forall z \in H^1(\Omega), \forall y \in H^1(\Omega)$$

$$b^i(z, z) + \Phi_y^i(z) \geq K_2^i \|z\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad \forall z \in H^1(\Omega), \forall i = 1, \dots, N \\ \forall y \in H^1(\Omega)$$

H4) Si $y^1 \leq y^2$ ($y^i \in L^2(\Omega)$ et $z \in L^2(\Omega)$), $\forall p^1 \in H_{y^1}(z)$, $\exists p^2 \in H_{y^2}(z)$
 tel que $p^1 \geq p^2$ et $\forall q^1 \in G_{y^1}^i(z)$, $\exists q^2 \in G_{y^2}^i(z)$ tel que $q^1 \geq q^2$.

H5) $H_y(\cdot)$ et $G_y(\cdot)$ transforment les bornés de $L^2(\Omega)$ en bornés de $L^2(\Omega)$.

H6) Il existe des opérateurs maximaux monotones \underline{G} et \bar{H}^i de $L^2(\Omega)$
 dans $L^2(\Omega)$ tels que :

$$\forall p \in H_y(z), \underline{H}(z) \leq p$$

$$\forall q^i \in G_y^i(z), q^i \leq \bar{G}^i(z), \quad \forall y, z \in L^2(\Omega)$$

avec :

$$(\underline{H}(z), z) + a(z, z) \geq \hat{K}_1 \|z\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad \forall z \in H^1(\Omega)$$

$$(\bar{G}^i(z), z) + b^i(z, z) \geq \hat{K}_2^i \|z\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad \forall z \in H^1(\Omega)$$

(\hat{K}_1, \hat{K}_2^i constantes positives)

H7) $\forall z \in H^1(\Omega) \quad a(z, z^+) = a(z^+, z^+)$

$$b_i(z, z^+) = b_i(z^+, z^+) \quad i=1, \dots, N$$

On a alors le résultat :

Proposition 2.1. Sous les hypothèses (H1), (H7), le problème (2.4), (2.5) admet une solution minimale et une solution maximale.

Démonstration

1) En reprenant les lemmes 2.1, 2.3 de A. Bermudez - C. Saguez [2], on a les résultats suivants :

. pour \hat{W} fixé, l'inéquation variationnelle (2.4) admet une solution unique $\theta \in H^1(\Omega)$ et l'application T_1 qui à \hat{W} associe θ vérifie :

$$(2.6) \quad \hat{W}_1 \leq \hat{W}_2 \Rightarrow T_1 \hat{W}_1 \leq T_1 \hat{W}_2$$

. pour $\hat{\theta}_i$ fixé, l'inéquation variationnelle (2.5)_i admet une solution unique W_i et l'application T_2^i qui à $\hat{\theta}_i$ associe W_i vérifie :

$$(2.7) \quad \forall \theta_i^1 \leq \theta_i^2 \Rightarrow T_2^i \theta_i^1 \leq T_2^i \theta_i^2 \quad \forall i = 1, \dots, N$$

. il existe des fonctions \underline{W}_i ($i=1, \dots, N$) et $\bar{\theta}$ telles que :

$$(2.8) \quad \forall \theta_i^1 \in L^2(\Omega) \quad \underline{W}_i \leq T_2^i \theta_i^1 \quad \text{p.p.}$$

$$(2.9) \quad \forall \hat{W} \in L^2(\Omega) \quad T_1 \hat{W} \leq \bar{\theta} \quad \text{p.p.}$$

2) On définit les suites $\{\underline{W}_i^j\}$ ($i=1, \dots, N$) et $\{\theta^j\}$ comme suit. :

$$\theta^0 = \bar{\theta} \text{ et } \underline{W}_i^0 = \underline{W}_i \quad (i=1, \dots, N)$$

$$\begin{cases} \theta^{j+1} = T_1 \hat{W}^j & \text{avec } \hat{W}^j = \sum_{i=1}^N \underline{W}_i^j \\ \underline{W}_i^{j+1} = T_2^i \theta_i^j & \text{avec } \theta_i^j = \theta^j - \sum_{\ell \neq i} \underline{W}_\ell^j, \quad i=1, \dots, N. \end{cases}$$

On a alors les inégalités suivantes :

$$(2.10) \quad \theta^1 \leq \theta^3 \leq \dots \leq \theta^{2j-1} \leq \dots \leq \theta^{2j} \leq \dots \leq \theta^2 \leq \theta^0 = \bar{\theta}$$

$$(2.11) \quad \underline{W}_i^1 = \underline{W}_i^0 \leq \underline{W}_i^2 \leq \dots \leq \underline{W}_i^{2j} \leq \dots \leq \underline{W}_i^{2j-1} \leq \dots \leq \underline{W}_i^3 \leq \underline{W}_i^1, \quad i=1, \dots, N.$$

Démontrons ce résultat par récurrence. On a :

$$\theta^1 \leq \theta^0 \text{ et } \underline{W}_i^0 \leq \underline{W}_i^1 \quad \text{d'après (2.8), (2.9).}$$

Donc :

$$\underline{W}^0 \leq \underline{W}^1 \text{ et } \theta_i^1 \leq \theta_i^0, \quad i=1, \dots, N$$

et d'après (2.6), (2.9) :

$$\theta^1 \leq \theta^2 \leq \theta^0 \text{ et } \underline{W}_i^2 \leq \underline{W}_i^1 \leq \underline{W}_i^0 \quad i=1, \dots, N$$

ce qui démontre le résultat pour $j = 1$.

Supposons le résultat vrai pour j , on a donc (2.10), (2.11) et en particulier :

$$\theta^{2j-1} \leq \theta^{2j} \leq \theta^{2j-2}$$

$$W_i^{2j-2} \leq W_i^{2j} \leq W_i^{2j-1}, \quad i=1, \dots, N$$

alors :

$$\tilde{W}_i^{2j-2} \leq \tilde{W}_i^{2j} \leq \tilde{W}_i^{2j-1} \quad \text{et} \quad \tilde{\theta}_i^{2j-1} \leq \tilde{\theta}_i^{2j} \leq \tilde{\theta}_i^{2j-2} \quad (i=1, \dots, N).$$

Donc d'après (2.6) et (2.7)

$$\theta^{2j-1} \leq \theta^{2j+1} \leq \theta^{2j} \quad \text{et} \quad W_i^{2j} \leq W_i^{2j+1} \leq W_i^{2j-1} \quad (i=1, \dots, N)$$

et en réitérant le même raisonnement, on obtient :

$$\begin{aligned} \theta^{2j+1} &\leq \theta^{2j+2} \leq \theta^{2j} \\ W_i^{2j} &\leq W_i^{2j+2} \leq W_i^{2j+1} \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned}$$

ce qui démontre (2.10), (2.11).

3) D'après H3) on obtient que $\{\theta^j\}$ et $\{W_i^j\}$ sont des suites bornées dans $H^1(\Omega)$, soit :

$$(2.12) \quad \|\theta^j\|_{H^1(\Omega)} \leq C, \quad \|W_i^j\|_{H^1(\Omega)} \leq C \quad i=1, \dots, N$$

(constante indépendante de j)

4) De (2.10), (2.11), (2.12), on déduit qu'il existe $\theta^*, \theta^{**}, W_i^*, W_i^{**}$ éléments de $H^1(\Omega)$, tels que :

$$\begin{aligned} \theta^{2j+1} &\rightharpoonup \theta^* && \text{dans } H^1(\Omega) \text{ faible, } L^2(\Omega) \text{ fort et p.p.x} \\ \theta^{2j} &\rightharpoonup \theta^{**} && \text{dans } H^1(\Omega) \text{ faible, } L^2(\Omega) \text{ fort et p.p.x} \\ W_i^{2j+1} &\rightharpoonup W_i^{**} && \text{dans } (H^1(\Omega))^N \text{ faible, } (L^2(\Omega))^N \text{ fort et p.p.x} \\ W_i^{2j} &\rightharpoonup W_i^* && \text{dans } (H^1(\Omega))^N \text{ faible, } (L^2(\Omega))^N \text{ fort et p.p.x} \end{aligned}$$

En passant à la limite comme dans A. Bermudez - C. Saguez [2], dans les inéquations :

$$(2.13) \quad \left\{ \begin{array}{l} a(\theta^{2j}, z-\theta^{2j}) + \Psi_{\tilde{W}^{2j-1}}(z) - \Psi_{\tilde{W}^{2j-1}}(\theta^{2j}) \geq (g^1, z-\theta^{2j}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right.$$

$$(2.14) \quad \left\{ \begin{array}{l} b_i(W_i^{2j}, z-W_i^{2j}) + \Phi_{\tilde{\theta}_i^{2j-1}}^i(z) - \Phi_{\tilde{\theta}_i^{2j-1}}^i(W_i^{2j}) \geq (g_i^2, z-W_i^{2j}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right.$$

$$(2.15) \quad \left\{ \begin{array}{l} a(\theta^{2j+1}, z-\theta^{2j+1}) + \Psi_{\tilde{W}^{2j}}(z) - \Psi_{\tilde{W}^{2j}}(\theta^{2j+1}) \geq (g^1, z-\theta^{2j+1}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right.$$

$$(2.16) \quad \left\{ \begin{array}{l} b_i(W_i^{2j+1}, z-W_i^{2j+1}) + \Phi_{\tilde{\theta}_i^{2j}}^i(z) - \Phi_{\tilde{\theta}_i^{2j}}^i(W_i^{2j+1}) \geq (g_i^2, z-W_i^{2j+1}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right.$$

on obtient avec (2.14) et (2.15) :

$$(2.17) \quad \left\{ \begin{array}{l} a(\theta^*, z-\theta^*) + \Psi_{\tilde{W}^*}(z) - \Psi_{\tilde{W}^*}(\theta^*) \geq (g^1, z-\theta^*) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \\ b_i(W_i^*, z-W_i^*) + \Phi_{\tilde{\theta}_i^*}^i(z) - \Phi_{\tilde{\theta}_i^*}^i(W_i^*) \geq (g_i^2, z-W_i^*) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right. \quad i=1, \dots, N$$

et avec (2.13), (2.16) :

$$(2.18) \quad \left\{ \begin{array}{l} a(\theta^{**}, z-\theta^{**}) + \Psi_{\tilde{W}^{**}}(z) - \Psi_{\tilde{W}^{**}}(\theta^{**}) \geq (g^1, z-\theta^{**}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \\ b_i(W_i^{**}, z-W_i^{**}) + \Phi_{\tilde{\theta}_i^{**}}^i(z) - \Phi_{\tilde{\theta}_i^{**}}^i(W_i^{**}) \geq (g_i^2, z-W_i^{**}) \quad \forall z \in H^1(\Omega) \end{array} \right. \quad i=1, \dots, N$$

Donc (θ^*, W^*) et (θ^{**}, W^{**}) sont solutions de (2.4), (2.5).

5) Enfin toute solution (θ, W) de (2.4), (2.5) vérifie :

$$\begin{aligned} \theta^* &\leq \theta \leq \theta^{**} \\ W_i^* &\leq W_i \leq W_i^{**} \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned}$$

On a en effet :

$$W_i^0 = \underline{W}_i \leq W_i \quad \text{et} \quad \theta \leq \bar{\theta} = \theta^0$$

Comme $T_1 \tilde{W} = \theta$ et $T_2 \tilde{\theta}_i = W_i$, on en déduit :

$$\theta^1 \leq \theta \leq \theta^0 \quad ; \quad W_i^0 \leq W_i \leq W_i^1 \quad (i=1, \dots, N)$$

Supposons que $\theta^{2j+1} \leq \theta \leq \theta^{2j}$ et $W_i^{2j} \leq W_i \leq W_i^{2j+1}$. Grâce aux propriétés de monotonie des applications T_1 et T_2 , on obtient :

$$\theta^{2j+1} \leq \theta \leq \theta^{2j+2} ; W_i^{2j+2} \leq W_i \leq W_i^{2j+1}$$

et en renouvelant le processus :

$$\theta^{2j+3} \leq \theta \leq \theta^{2j+2} ; W_i^{2j+2} \leq W_i \leq W_i^{2j+3}$$

Donc par récurrence, on a :

$$\theta^{2j+1} \leq \theta \leq \theta^{2j} ; W_i^{2j} \leq W_i \leq W_i^{2j+1} \quad \forall j, i=1, \dots, N$$

et à la limite, on obtient :

$$\theta^* \leq \theta \leq \theta^{**} ; W_i^* \leq W_i \leq W_i^{**} \quad i=1, \dots, N$$

Par récurrence, on déduit :

Proposition 2.2. Le problème semi-discrétisé (2.1), (2.3) admet une solution maximale et une solution minimale.

3. - METHODES NUMERIQUES

3.1. - Algorithme de résolution

A chaque pas de temps, nous avons à résoudre un problème (2.1), (2.3). Pour cela, nous utilisons la méthode constructive introduite pour la démonstration de la proposition 2.1. Soit à chaque pas de temps :

1) Calcul de \underline{W}^{n+1} et $\bar{\theta}^{n+1}$ solutions de :

$$\left(\frac{\partial k \bar{\theta}^{n+1}}{\Delta t}, z \right) + a^n(\bar{\theta}^{n+1}, z) = \left(\frac{u^n}{\Delta t}, z \right) + (h^{n+1}, z) \quad \forall z \in H^1(\Omega)$$

$$\left(\frac{\sigma_i^2 \underline{W}_i^{n+1}}{\Delta t}, z \right) + b_i^n(\underline{W}_i^{n+1}, z) = \left(\frac{v_i^n}{\Delta t}, z \right) \quad \forall z \in H^1(\Omega)$$

2) $j = 0, \theta^{n+1,0} = \bar{\theta}^{n+1}, W_i^{n+1,0} = \underline{W}_i^{n+1}$

3) Calcul de $\theta^{n+1,j+1}$ solution de :

$$a^n(\theta^{n+1,j+1}, z - \theta^{n+1,j+1}) + \Psi_{W^{n+1,j}}^{n+1,j}(z) - \Psi_{W^{n+1,j}}^{n+1,j}(\theta^{n+1,j+1}) \geq (h^{n+1} + \frac{u^n}{\Delta t}, z - \theta^{n+1,j+1}), \forall z \in H^1(\Omega)$$

4) Calcul de $W_i^{n+1,j+1}$ ($i=1, \dots, N$) solution de :

$$b_i^n(W_i^{n+1,j+1}, z - W_i^{n+1,j+1}) + \Phi_{\theta_i^{n+1,j}}^i(z) - \Phi_{\theta_i^{n+1,j}}^i(W_i^{n+1,j+1}) \geq (\frac{v_i^n}{\Delta t}, z - W_i^{n+1,j+1}), \forall z \in H^1(\Omega)$$

5) Test de convergence :

si vérifié \rightarrow FIN,

sinon, $j = j+1$, retour en 3)

D'après la démonstration de la proposition 2.1, on déduit :

Proposition 3.1. La suite $(\theta^{2j+1}, W_i^{2j})$ converge vers la solution minimale dans $H^1(\Omega)$ faible et la suite $(\theta^{2j}, W_i^{2j+1})$ converge vers la solution maximale dans $H^1(\Omega)$ faible.

Remarque 3.1. :

La convergence des suites est monotone. Si les suites convergent vers la même limite, on a unicité de la solution. A chaque itération, on connaît une estimation de l'erreur sur une solution. En effet, toute solution (θ, W) vérifie :

$$\theta^{2j+1} \leq \theta \leq \theta^{2j} ; W_i^{2j} \leq W_i \leq W_i^{2j+1} \quad i=1, \dots, N \quad \blacksquare$$

Remarque 3.2. :

A chaque itération, aux étapes 3 et 4, nous avons à résoudre une inéquation variationnelle du type :

$$C y - f \in F(y).$$

Pour cela, nous utilisons une méthode itérative, fondée sur l'approximation de Yosida du graphe maximal monotone $F(y)$, étudiée dans A. Bermudez, C. Moreno [1], C. Saguez [12].

3.2.- Approximation numérique

Nous avons à résoudre à chaque itération de l'algorithme, N inéquations variationnelles (cf. points 3 et 4 de l'algorithme) de la forme :

$$(3.1) \quad F_y(z) + C z \ni g + f$$

où $F_y(\cdot)$ et C vérifient les hypothèses faites respectivement sur $H_y(\cdot)$, $G_y^i(\cdot)$ et A, B^i et avec $g \in L^2(\Omega)$, $f \in (H^1(\Omega))'$.

L'inéquation (3.1) s'écrit :

(ξ ne dépend pas de z)

$$(3.2) \quad \begin{cases} (u, \xi) + c(z, \xi) = (g, \xi) + (f, \xi)_{V', -V} \quad \forall \xi \in H^1(\Omega) \\ u \in F_y(z) \end{cases}$$

où c est la forme bilinéaire associée à \tilde{U} .

On approche ce problème par une méthode d'éléments finis P_1 .

On considère une triangulation \mathcal{T}_h du domaine Ω_h , constituée des triangles T (h représente le plus grand diamètre des triangles).

Si P_i désigne un noeud de la triangulation ($i=1, \dots, N$), on note \mathcal{T}_h^i l'ensemble des triangles ayant i comme sommet.

On approche (3.2) par le problème suivant :

Trouver $z_h \in V_h$ solution de :

$$(3.3) \quad \begin{cases} (u_h, \xi_h) + C(z_h, \xi_h) = (g, \xi_h) + (f, \xi_h)_{V', -V} \quad \forall \xi_h \in V_h \\ u_h \in F_{y_h}(z_h) \end{cases}$$

où $V_h = \{ \xi_h \in C^0(\Omega_h) \mid \xi_h|_T \in P_1 \quad \forall T \in \mathcal{T}_h \} \subset V$

Pour résoudre (3.3), on utilise l'approximation numérique suivante :

On approche le produit scalaire $(u_h, \xi_h)_{L^2(\Omega)}$ par :

$$(u_h, \xi_h)_h = \sum_{i=1}^{NN} M_i u_h(P_i) \xi_h(P_i)$$

avec

$$M_i = \frac{1}{3} \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \text{Aire}(T).$$

On obtient alors le problème :

Trouver $\tilde{z}_h \in V_h$, solution de :

$$(3.4) \quad \begin{cases} (\tilde{u}_h, \xi_h)_h + c(\tilde{z}_h, \xi_h) = (g, \xi_h)_h + (f, \xi_h)_{V', -V} \quad \forall \xi_h \in V_h \\ \tilde{u}_h(P_i) \in F_{y_h(P_i)}(\tilde{z}_h(P_i)) \quad i=1, \dots, NN \end{cases}$$

Ce type d'approximation a été étudié pour un problème de Stéfan ($y = c^{te}$) par C.M. Elliott [7] qui obtient une estimation d'erreur dans $H^1(\Omega)$ d'ordre h .

Cette approximation numérique permet de conserver les propriétés de monotonie du problème semi-discrétisé en temps, ce qui fournira la convergence de l'algorithme décrit en 3.1 pour le problème discrétisé. On a, en particulier :

Proposition 3.2. Sous les hypothèses H1-H7, si $y_h^1 \leq y_h^2$ alors les solutions correspondantes \tilde{z}_h^1 et \tilde{z}_h^2 de (3.4) vérifient $\tilde{z}_h^1 \leq \tilde{z}_h^2$.

Démonstration

On a :

$$\begin{cases} (\tilde{u}_h^1 - \tilde{u}_h^2, \xi_h)_h + c(\tilde{z}_h^1 - \tilde{z}_h^2, \xi_h) = 0 \\ \tilde{u}_h^\ell(P_i) \in F_{y_h^\ell(P_i)}(\tilde{z}_h^\ell(P_i)) \quad i=1, \dots, NN ; \ell = 1, 2 \end{cases}$$

En prenant $\xi_h = (z_h^1 - z_h^2)^+$, on obtient :

$$\sum_{i=1}^{NN} M_i (u_h^1(P_i) - u_h^2(P_i)) (z_h^1(P_i) - z_h^2(P_i))^+ + c ((z_h^1 - z_h^2)^+, (z_h^1 - z_h^2)^+) = 0$$

Ce qui peut s'écrire :

$$\sum_{i=1}^{NN} M_i (u_h^1(P_i) - v_i) (z_h^1(P_i) - z_h^2(P_i))^+ + \sum_{i=1}^{NN} M_i (v_i - u_h^2(P_i)) (z_h^1(P_i) - z_h^2(P_i))^+ + c ((z_h^1 - z_h^2)^+, (z_h^1 - z_h^2)^+) = 0 \quad \forall v_i \in \mathbb{R}.$$

D'après l'hypothèse H4, on peut choisir $v_i \in F_{y_h^2(P_i)}^2$ tel que $v_i \leq u_h^1(P_i)$ et d'après H2, on en déduit que :

$$c ((z_h^1 - z_h^2)^+, (z_h^1 - z_h^2)^+) \leq 0$$

et donc que :

$$z_h^1(P_i) \leq z_h^2(P_i) \quad i=1, \dots, NN$$

3.3. - Résultats numériques

Nous avons appliqué la méthode présentée ci-dessus au cas d'un alliage ternaire (Fe, C, Mn) avec les données suivantes (H.K. Tacke - A. Grill - K. Miyazawa - K. Schwerdtfeger [13]).

Domaine d'intégration

Carré de 10 cm de côté, discrétisé de manière régulière en 200 éléments finis (121 degrés de liberté) suivant le schéma ci-dessous:

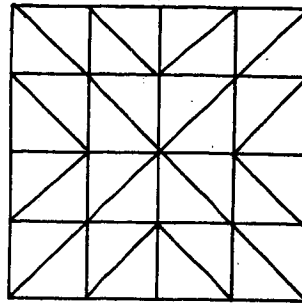


Figure 3.1 : Type de triangulation utilisé

Flux thermique aux bords

Le flux thermique $q(t)$ est donné sur la figure 3.2 ci-dessous :

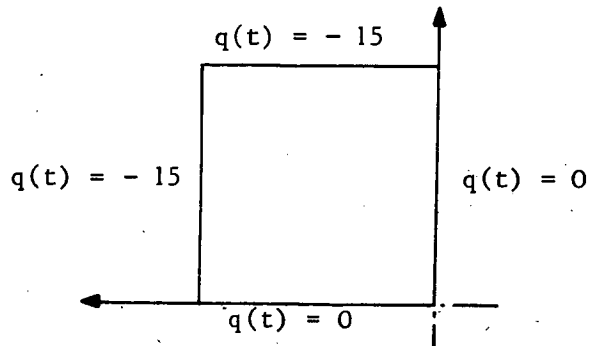


Figure 3.2: Flux thermique aux bords

Données physiques

Densité $\rho = 7,4$

- Données thermiques

Capacité calorifique. $k = 0,166$

Chaleur latente $L = 65,28$

Conductivité thermique $\alpha^1 = \alpha^2 = 0,0816$

$T_o(x) = T_{sol.Fe\ pur} = 1536^\circ C.$

- Equations de concentration

. pour le Carbone

$\beta^1 = 10^{-4}$; $\beta^2 = 10^{-7}$

$\sigma^1 = -0,0128$; $\sigma^2 = -0,00448$

$C_o(x) = 0,6$

. pour le Manganèse

$$\begin{aligned} \beta^1 &= 0,5 \times 10^{-4} & ; & \beta^2 = 10^{-7} \\ \sigma^1 &= -0,204 & ; & \sigma^2 = -0,153 \\ C_0(x) &= 0,6 \end{aligned}$$

- paramètres liés à l'algorithme

Pas de discrétisation en temps $\Delta t = 10$ s.

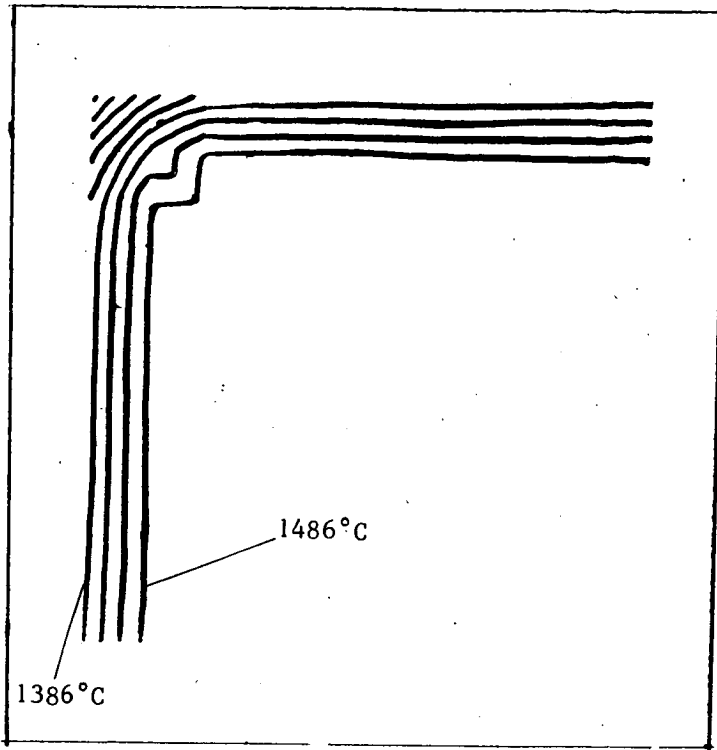
Pour l'I.V. associée à la température :

$$\lambda = 0,01 ; \omega = \frac{1}{2\lambda} ; \text{coefficient de relaxation} = 0,8$$

Pour les I.V. associées aux concentrations :

$$\lambda = 10 ; \omega = \frac{1}{2\lambda} ; \text{coefficient de relaxation} = 0,5$$

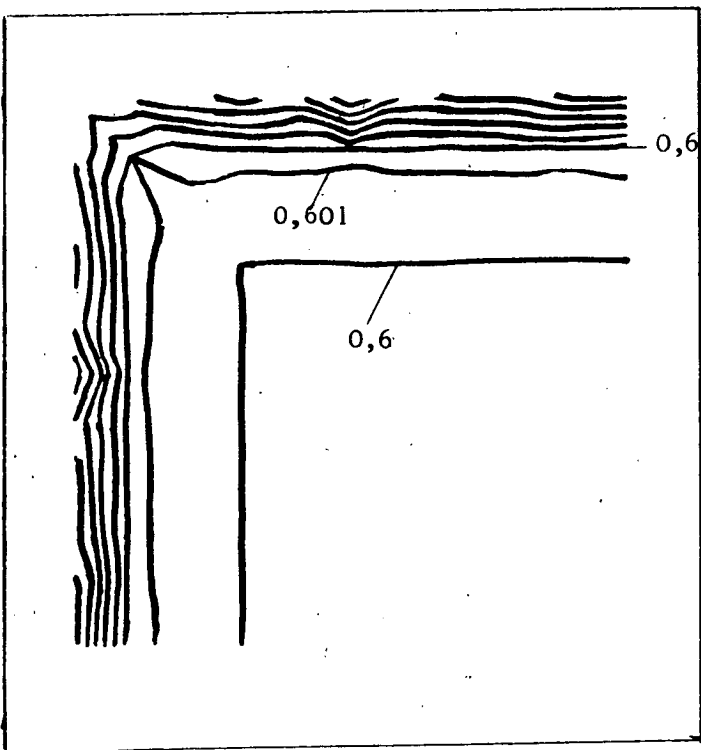
Les résultats sont donnés figures 3.3 - 3.10. Les courbes d'équitempérature varient avec un pas de 50°C et les courbes d'équiconcentration avec un pas de 0,001.



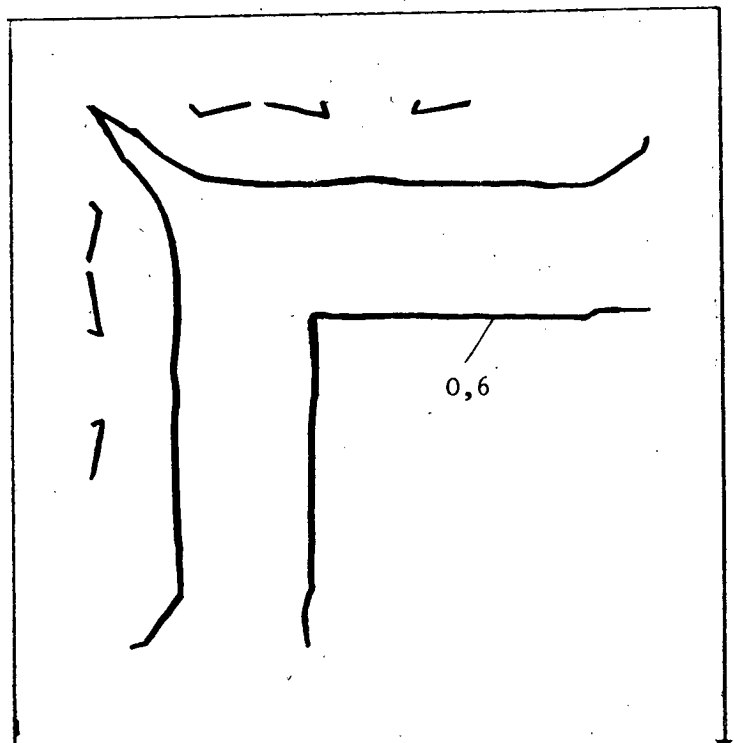
Température

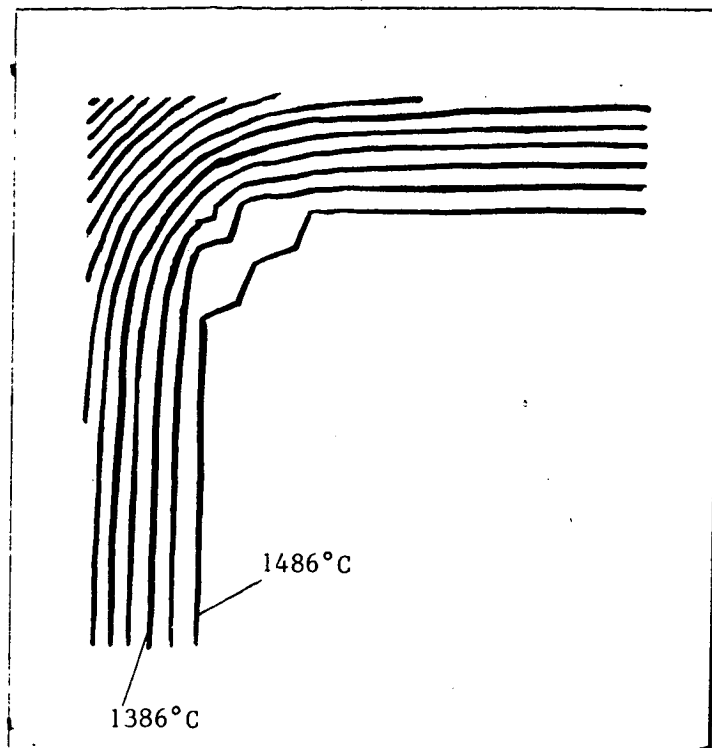
Figure 3.3 : $t = 50$ s

Concentration Carbone



Concentration Manganèse



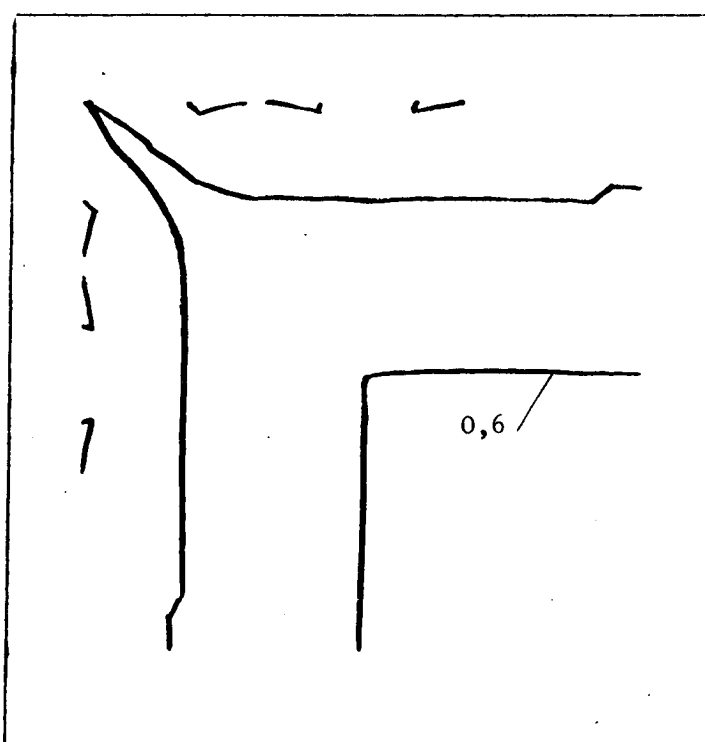
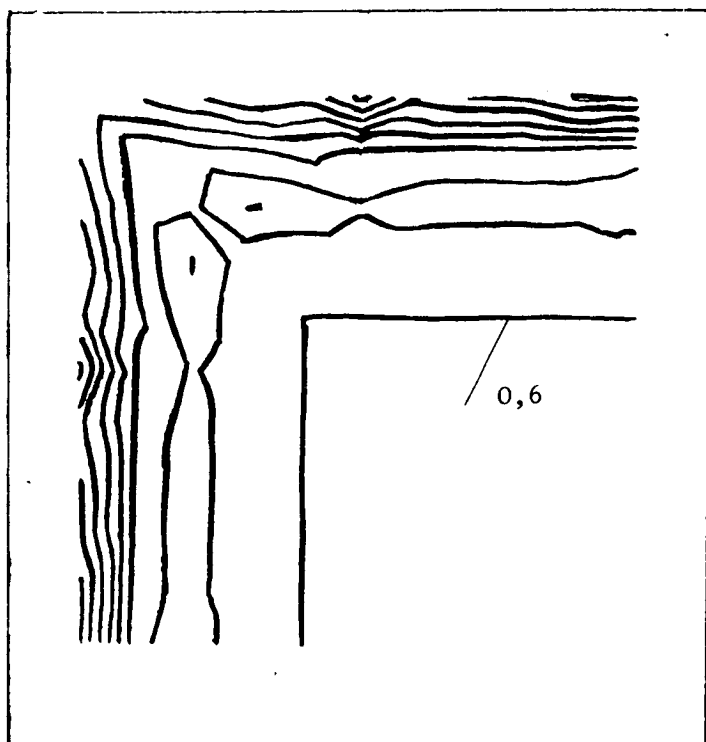


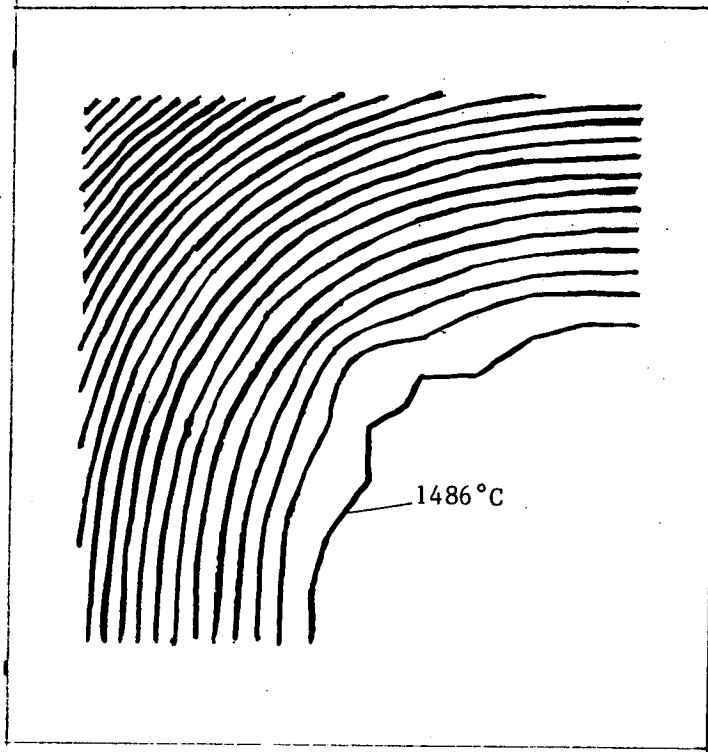
Température

Figure 3.4 : $t = 100$ s

Concentration Carbone

Concentration Manganèse



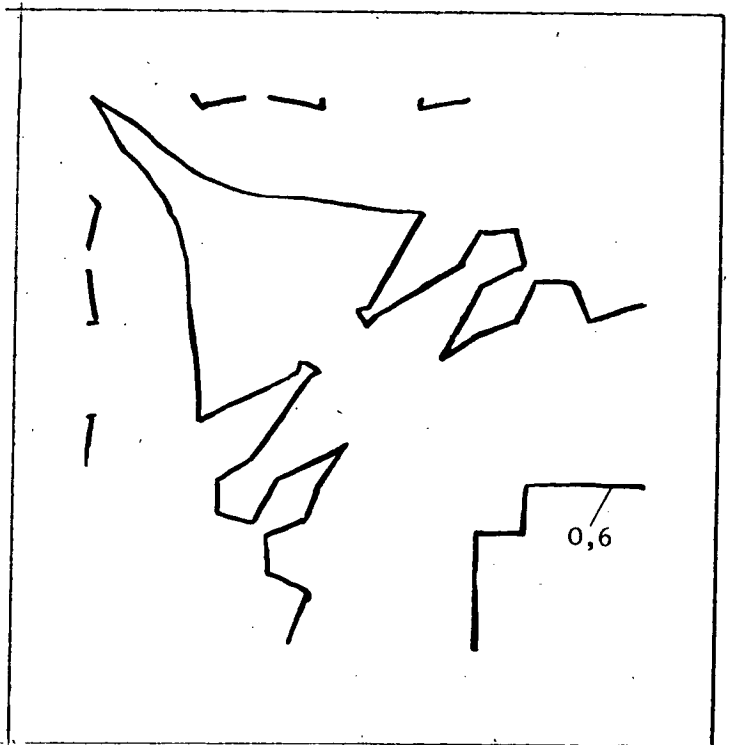
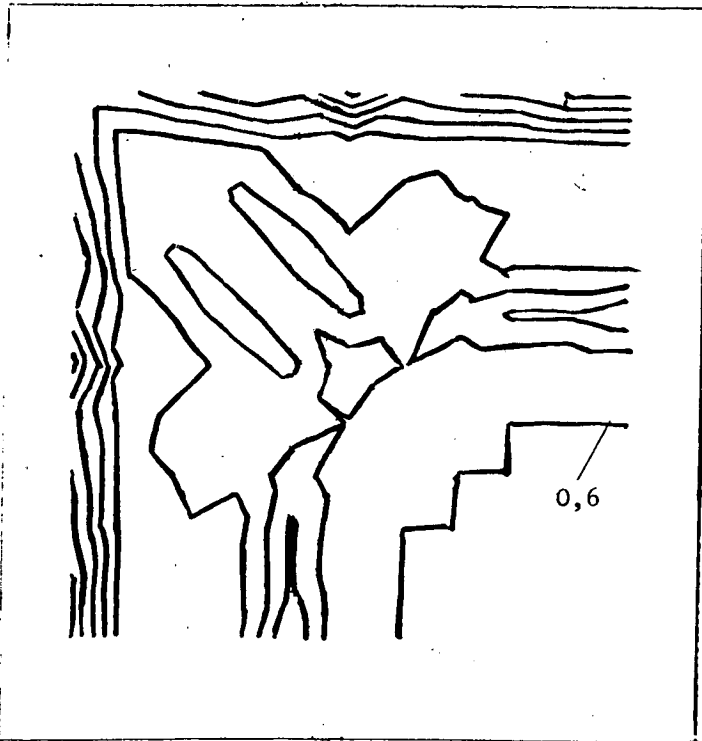


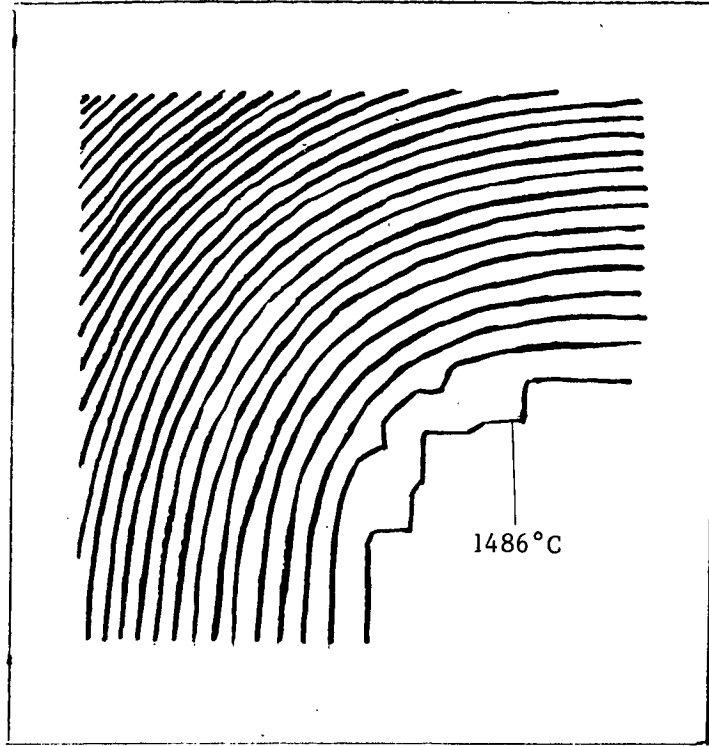
Température

Figure 3.5 : t = 250 s

Concentration Carbone

Concentration Manganèse



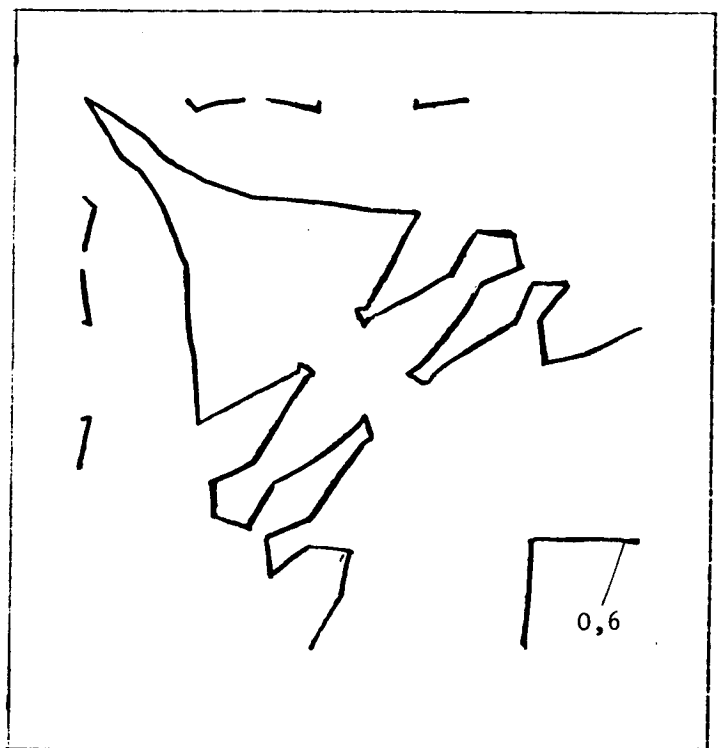
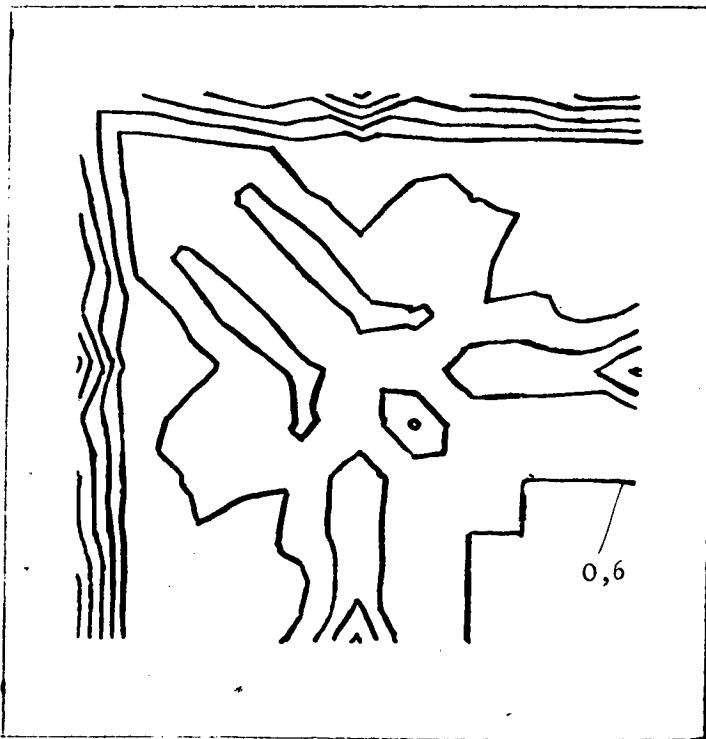


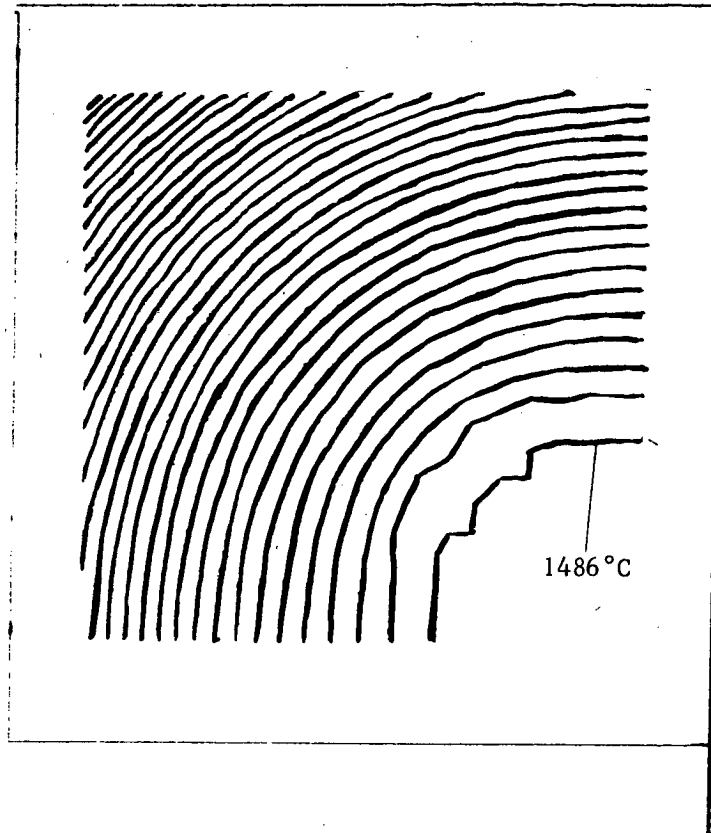
Température

Figure 3.6 : t = 300 s

Concentration Carbone

Concentration Manganèse



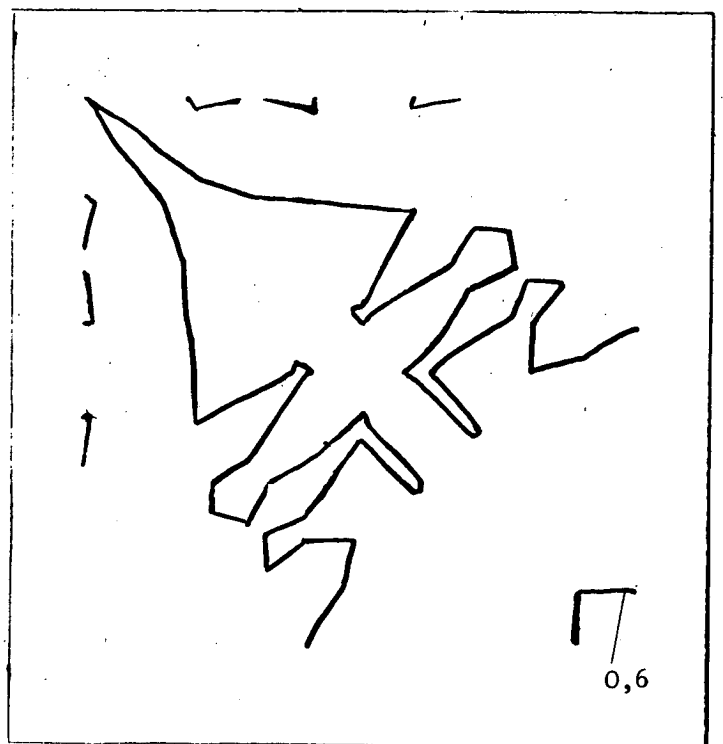
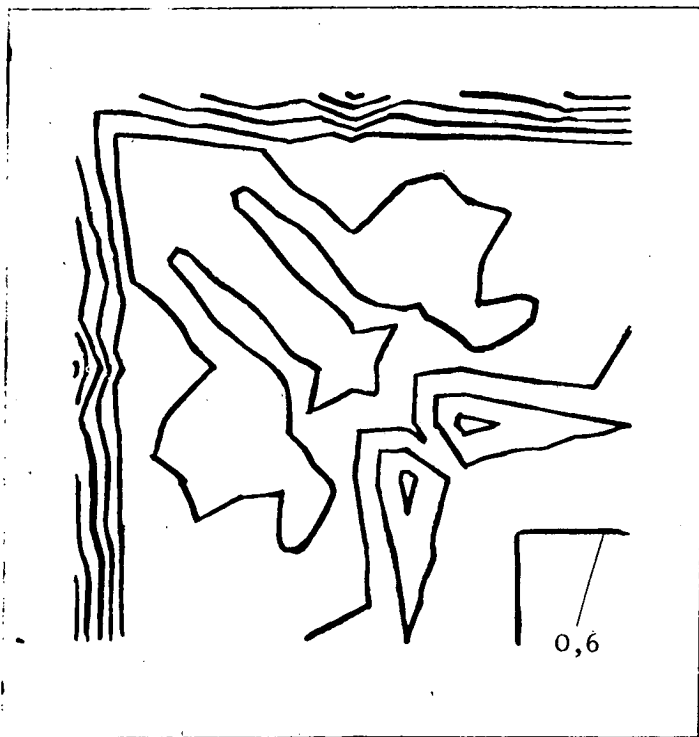


Température

Figure 3.7 : $t = 350$ s

Concentration Carbone

Concentration Manganèse



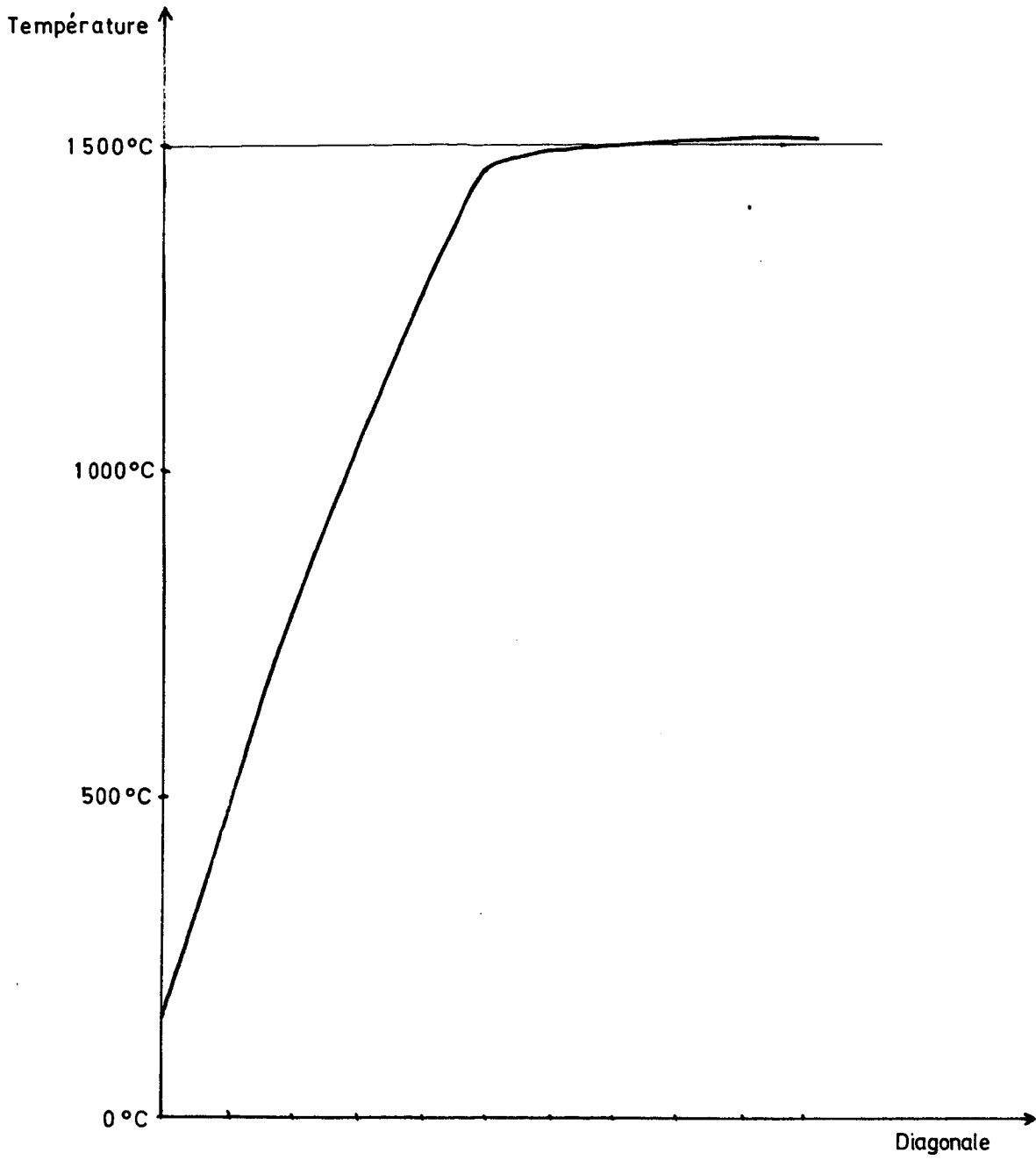
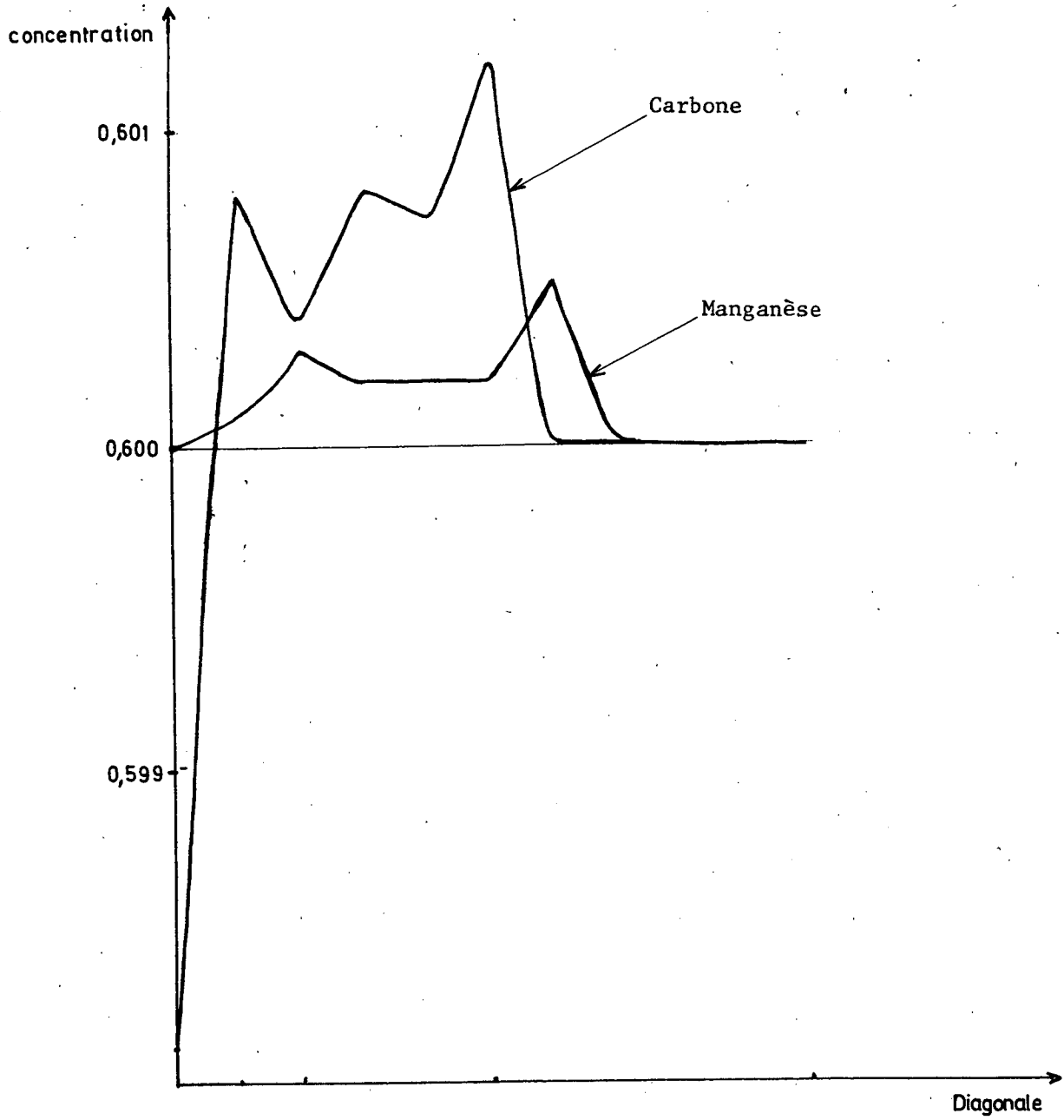


Figure 3.9 : Température sur la diagonale au temps $t = 250$ s



- Figure 3.10 : Concentrations de Carbone et de Manganèse sur la diagonale au temps $t = 250$ s

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. BERMUDEZ, C. MORENO. Duality methods for solving variational inequalities (Comp. and Math. with Appl., Vol. 7, pp. 43-58, 1981).
- [2] A. BERMUDEZ, C. SAGUEZ. Etude numérique d'un problème de solidification d'un alliage (Rapport INRIA 104, 1981).
- [3] H. BREZIS. Opérateurs maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert (North-Holland, 1973).
- [4] B. CHALMERS. Principles of Solidification (John Wiley, 1964).
- [5] A.B. CROWLEY, J.R. OCKENDON. On the numerical solution of an alloy solidification problem (Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 22, pp. 941-947, 1979).
- [6] J.D.P. DONNELLY. A model for non equilibrium thermodynamic processes involving phase changes (J. Inst. Math. Appl. 24, pp. 425-438, 1979).
- [7] C.M. ELLIOTT. On the finite element approximation of an elliptic variational inequality arising from an implicit time discretization. of the Stefan Problem (I.M.A. Journal of Numerical Analysis, pp. 115-125, 1981).
- [8] G.J. FIX. Numerical methods for alloy solidification problems (in Moving Boundary problems. D. Wilson, A.D. Solomon, P.S. Boggs Ed. Academic Press , 1978).
- [9] M. FLEMINGS. Solidification Processing (Mac Graw Hill, 1974).
- [10] J.L. LIONS. Quelques méthodes de résolution de problèmes aux limites non linéaires (Dunod, 1969).

- [11] J.L. LIONS. Cours Collège de France, 1974.
- [12] C. SAGUEZ. Contrôle de systèmes à frontière libre (Thèse d'état Université Technologique de Compiègne, 1980).
- [13] K.H. TACKE, A. GRILL, K. MIYAZAWA, K.SCHWERTFERGER. Macrosegregation in strand cast steel. Computation of concentration profiles with a diffusion model (Arch. Eisenhüttenwes, 52, 1981, Jan.).
- [14] L. TARTAR. Inéquations quasi-variationnelles abstraites (CRAS Paris, Tome 278, pp; 1193-1196, 1974).

Imprimé en France

par

l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique

