

Simulation tri-dimensionnelle des procédés d'élaboration et de solidification

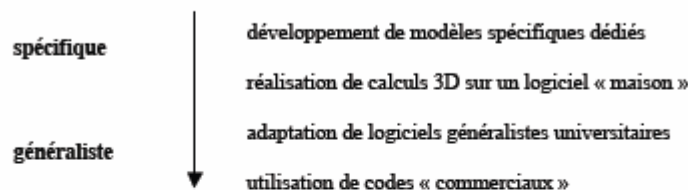
Alain JARDY

La recherche en modélisation et simulation des matériaux et procédés s'est développée depuis près de 30 ans à Nancy. Dans le domaine du traitement et de la purification des métaux liquides, ainsi que de leur solidification, les équipes développent régulièrement des modèles qui les placent dans les tout premiers rangs au niveau international. Or, la mise au point de modèles performants des procédés réels nécessite de plus en plus de prendre fortement en compte deux points de vue complémentaires :

- La physique mise en jeu est très complexe. Les métaux liquides en écoulement sont le siège de phénomènes de transport (matière, chaleur, quantité de mouvement) couplés. Par ailleurs, des phénomènes physiques variés (phases multiples, brassage électromagnétique, turbulence, évolution des surfaces libres) doivent être pris en compte dans la modélisation. L'aspect multi-échelle est présent presque systématiquement.

- Un procédé réel est généralement tridimensionnel, et une prédiction quantitative se doit de prendre en compte la géométrie réelle. Une simplification abusive peut même donner lieu à des prédictions très éloignées de la réalité, car les effets 3D sont souvent prépondérants.

Face à ces deux défis, on peut distinguer 4 attitudes qu'on peut représenter graphiquement en allant du « plus spécifique » au « plus généraliste ».



La première et la quatrième démarche sont historiquement les plus utilisées par les chercheurs. Le projet STRIPES correspond à la deuxième approche. Le but consiste à terme à effectuer des calculs CFD tridimensionnels sur un code « maison », que les chercheurs pourraient aisément modifier et adapter. Pour cela, une thèse de Doctorat a tout d'abord été lancée en novembre 2008 pour développer un modèle général qui ne visera pas une application particulière, mais servira par la suite de base commune pour un grand nombre de modélisations spécifiques. A la fin de la thèse, le modèle devra pouvoir simuler des écoulements monophasiques et diphasiques simples, ainsi que les principaux transferts associés et couplés. Différentes conditions aux limites seront implémentées et le modèle validé par comparaison avec des résultats de benchmarks issus de la littérature.

En parallèle à la dernière année de thèse, un stagiaire post-doctoral sera engagé pour une période de deux ans. Le stagiaire aura pour mission d'implémenter dans le code des modèles spécifiques et de finaliser le logiciel pour quelques applications « matériaux » qui serviront de test.

Pendant les huit premiers mois de sa thèse, le doctorant a mis en place le «squelette» du code qu'il est amené à développer (structures de données, sous-programmes de gestion des entrées-sorties, de discrétisation des équations, de gestion de l'instationnarité et de résolution numérique des systèmes linéaires, prise en compte de milieux et de conditions aux limites multiples, etc.). Cette étape était indispensable afin :

- de faciliter les ajouts et/ou modifications futurs (prise en compte de nouveaux paramètres, test de différents solveurs...),
- d'assurer une organisation modulaire sous forme de «briques» élémentaires,
- de permettre une future parallélisation du logiciel.

Ashish Malik a actuellement développé un premier modèle simple basé sur la résolution en régime transitoire de l'équation de la chaleur en conduction pure, dans un milieu mono-, bi- ou tridimensionnel. La comparaison des résultats obtenus, soit avec des solutions analytiques, soit avec des simulations effectuées à l'aide de logiciels commerciaux tels que FLUENT, a permis de valider cette étape préliminaire.