		
	Note Technique DEN	Page 1/30

DIRECTION DE L'ENERGIE NUCLEAIRE
 DIRECTION DELEGUEE AUX ACTIVITES NUCLEAIRES DE SACLAY
 DEPARTEMENT DE MODELISATION DES SYSTEMES ET STRUCTURES
 SERVICE DE THERMOHYDRAULIQUE ET DE MECANIQUE DES FLUIDES

Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase
 pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine
 d'une substance pure 3D

Alain Cartalade


DEN/DANS/DM2S/STMF/LATF/NT/13-008/A

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
 Centre de Saclay - DEN/DANS/DM2S/STMF/LATF - BAT 454 - PC 47
 Tél. : 33 - 1 69 08 66 99 Fax : 33 - 1 69 08 82 29 Courriel : veronique.lechopied@cea.fr
 Établissement public à caractère industriel et commercial
 RCS PARIS B 775 685 019



Réf du formulaire : F1-DM2S/DIR/PR/003 classe L^AT_EX docDM2S version C

Document propriété du CEA - Reproduction et diffusion externe au CEA soumises à l'autorisation de l'émetteur

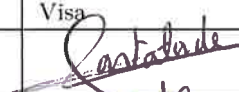



		Note Technique DEN	Page 2/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			


Niveau de confidentialité				
DO	DR	CCEA	CD	SD
X				

Partenaires/Clients	Accord	Type d'Action

Références internes CEA			
Direction d'objectifs	Domaine	Projet	EOTP
DISN	SIMU	SIVIT	A-SIVIT-01-04
Jalon	Intitulé du jalon	Délai contractuel de confidentialité	Cahiers de laboratoire

Suivi des versions			
Indice	Date	Nature de l'évolution	Pages et chapitres modifiés
A	15/3/2013	Document initial	

	Nom	Fonction	Visa	Date
Rédacteur	Alain Cartalade	Ingénieur-chercheur		15/03/2013
Vérificateur	Stéphane Dellacherie	Ingénieur-chercheur		21/03/2013
Approbateur	Danielle Gallo	Chef de Laboratoire		15/03/13
Autre visa				
Émetteur	Bernard Faydide	Chef de Service		02/04/2013


		Note Technique DEN	Page 3/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

Mots Clefs

Modèle à champ de phase, Limite à interface fine, Lattice Boltzmann Method, Cristallisation, Vittrification, Creuset froid, Auto-creuset, AUDRIC.

RESUME/CONCLUSIONS

Ce rapport présente une méthode numérique, basée sur l'équation de Boltzmann sur réseau, pour la résolution d'un modèle à champ de phase dédié à la simulation de la croissance cristalline. Il s'inscrit dans la thématique AUDRIC (cristallisation de l'auto-creuset) du projet SIVIT et fait suite à l'étude initiée dans [4]. Le modèle résolu dans ce travail est celui dit « avec limite à interface fine » de Karma et Rappel dans sa version 3D [12]. À ce jour, ce modèle est encore pris comme référence par de nombreux auteurs [7, 10, 17, 18, 20] pour la simulation de la cristallisation d'une substance pure. La méthode de Boltzmann proposée s'appuie sur des approximations BGK pour les équations cinétiques relatives au champ de phase et à la température. Pour l'équation du champ de phase, l'étape de collision et la fonction de distribution à l'équilibre font l'objet de modifications en comparaison à la méthode classique de l'équation du transport par advection-diffusion. La méthode est validée par comparaison avec deux schémas aux différences finies qui discrétisent le laplacien avec 6 et 18 points voisins respectivement. Sur cette base, plusieurs simulations de sensibilité ont été réalisées. Les effets d'anisotropie du maillage deviennent négligeables pour les réseaux D3Q15 et D3Q19 contrairement au réseau D3Q7. Enfin, plusieurs simulations de sensibilité aux paramètres physiques ont été réalisées qui montrent l'impact de chacun d'eux sur la morphologie et la vitesse de croissance.

		Note Technique DEN	Page 4/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

Diffusion initiale

(Diffusion par email si document en DO)

Diffusion interne CEA

DEN/DANS/DM2S/DIR
DISN/SIMU

DISN/Aval du cycle

DEN/DANS/DM2S/STMF

DEN/DANS/DM2S/STMF/LATF

DEN/DANS/DM2S/STMF/LMEC

DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF

DEN/MAR/DTCD

DEN/MAR/DTCD/SECM

DEN/MAR/DTCD/SECM/LDMC

DEN/MAR/DTCD/SCDV/LDPV

E. PROUST, Chef du DM2S

J.-P. DEFFAIN

D. CARUGE

B. BOULLIS

B. GILLET

B. FAYDIDE

J. SEGRÉ

D. GALLO

A. BECCANTINI

S. BENTEBOULA

N. COULON

F. DABBENE

M. FILIPPI

A. GENTY

S. KUDRIAKOV

J.-P. MAGNAUD

O. MARFAING

B. MARYSHEV

E. STUDER

A. YOUNSI

D. JAMET

S. DELLACHERIE

C. Le POTIER

O. ANTONI

S. GOUNAND

N. LETERRIER

C. GIROLD

I. RIBET

B. LORRAIN

D. GUILLANEUX

O. PINET

É. RÉGNIER

S. SCHULLER


O. DELATTRE

D. PERRET

H. NONNET

J. LACOMBE

É. SAUVAGE

		Note Technique DEN	Page 5/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

Diffusion externe

Diffusion électronique

CNRS-IMFT,
Allée du professeur Camille Soula
31400 Toulouse

M. QUINTARD
(Michel.Quintard@imft.fr)

BU Recyclage DIRP/RDP
Tour Areva, 1 place Jean Millier
92084 Paris - La Defense


N. CHOUARD
(nolwenn.chouard@areva.com)

BU Recyclage DIRP/RDP
Tour Areva, 1 place Jean Millier
92084 Paris - La Defense

I. HABLOT
(isabelle.hablot@areva.com)

Diffusion résumé

"sans objet"

		Note Technique DEN	Page 6/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
	Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D		

Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D

A. CARTALADE

CEA/Saclay, DEN-DANS-DM2S-STMF, Laboratoire des Applications de la Thermo-hydraulique et mécanique des Fluides, Bât 454, 91191 Gif-sur-Yvette cedex. Tél : +33 (0)1 69 08 40 67.*

(Dated: 15 mars 2013)

Ce rapport présente une méthode numérique, basée sur l'équation de Boltzmann sur réseau, pour la résolution d'un modèle à champ de phase dédié à la simulation de la croissance cristalline. Il s'inscrit dans la thématique AUDRIC (cristallisation de l'auto-creuset) du projet SIVIT et fait suite à l'étude initiée dans [4]. Le modèle résolu dans ce travail est celui dit « avec limite à interface fine » de KARMA ET RAPPEL dans sa version 3D [13]. À ce jour, ce modèle est encore pris comme référence par de nombreux auteurs [7, 11, 18, 19, 22] pour la simulation de la cristallisation d'une substance pure. La méthode de Boltzmann proposée s'appuie sur des approximations BGK pour les équations cinétiques relatives au champ de phase et à la température. Pour l'équation du champ de phase, l'étape de collision et la fonction de distribution à l'équilibre font l'objet de modifications en comparaison à la méthode classique de l'équation du transport par advection-diffusion. La méthode est validée par comparaison avec deux schémas aux différences finies qui discrétisent le laplacien avec 6 et 18 points voisins respectivement. Sur cette base, plusieurs simulations de sensibilité ont été réalisées. Les effets d'anisotropie du maillage deviennent négligeables pour les réseaux D3Q15 et D3Q19 contrairement au réseau D3Q7. Enfin, plusieurs simulations de sensibilité aux paramètres physiques ont été réalisées qui montrent l'impact de chacun d'eux sur la morphologie et la vitesse de croissance.

I. INTRODUCTION

Ce rapport présente une méthode numérique, basée sur les schémas de Boltzmann sur réseaux (Lattice Boltzmann - LB), pour la simulation de la croissance cristalline. Cette problématique de cristallisation s'inscrit dans la thématique AUDRIC (cristallisation de l'auto-creuset) du projet SIVIT [28] (SIMulation de la VITrification) relatif à la simulation du procédé de vitrification par la technique du creuset froid. Le principe général de la technique du creuset froid (problématique générale de thermo-magnéto-hydrodynamique, voir [10] par exemple) et la cristallisation qui s'y produit (essentiellement dans les zones à fort gradient thermique) ont déjà été présentés dans [4]. Parmi les deux échelles d'étude qui ont été présentées, c'est-à-dire (a) l'échelle du procédé et de la maquette expérimentale (de la dizaine de centimètres au mètre) et (b) l'échelle des cristaux (quelques dizaines de microns), ce rapport est consacré une nouvelle fois à la modélisation à l'échelle des cristaux (figure 1).

La modélisation à cette échelle permet (i) la compréhension des mécanismes liés à la croissance cristalline et (ii) de structurer l'acquisition des données de base qui viendront alimenter la thématique VERA du projet SIVIT par exemple. L'approche mise en œuvre à cette échelle permet également de donner des indications précises sur les paramètres pertinents du mécanisme de cristallisation dans le but de (I) « Décrire et prédire l'évolution de l'auto-creuset en terme de micro-structure (nature, nombre, taille, répartition des phases cristallisées), de composition chimique et épaisseur » [28]. Ces indications aideront à établir un modèle moyenné simplifié à l'échelle de l'auto-creuset qui permettra de (II) « Décrire l'impact de l'auto-creuset (phases cristallisées) sur le procédé ». Enfin, un dernier intérêt de la modélisation à cette échelle est de pouvoir établir des liens directs avec la thématique ELSIE de SIVIT qui s'intéresse à la réactivité de certaines espèces chimiques entre le calcinat et la fritte de verre au niveau de la couche d'élaboration du creuset froid [17, 29].

On rappelle qu'à l'échelle des cristaux, la thématique de la croissance cristalline d'une substance pure est un problème de changement de phase entre une phase liquide et une phase solide de même composition. D'un point de

*Electronic address: alain.cartalade@cea.fr



TAB. I: Principales notations utilisées (les vecteurs et les tenseurs sont notés en gras)

• **MODÈLES CONTINUS**

▷ **Équation de la chaleur**

u	Température adimensionnée : $u = C_p(T - T_m)/L$
T	Température
C_p	Chaleur spécifique à pression constante
κ	Diffusivité thermique
L	Chaleur latente
T_m	Température de fusion
T_0	Température initiale
Δ	Sous-refroidissement : $\Delta = C_p(T_m - T_0)/L$

▷ **Équation du champ de phase**

ϕ	Champ de phase
W_0	Épaisseur de l'interface diffuse
σ_0	Énergie interfaciale moyenne
λ	Constante de couplage entre ϕ et u
ε_s	Intensité d'anisotropie interfaciale
ε_c	Intensité d'anisotropie cinétique
\mathbf{n}	Vecteur normal à l'interface : $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^T$
$a_s(\mathbf{n})$	Fonction d'anisotropie de surface
$a_c(\mathbf{n})$	Fonction d'anisotropie cinétique
τ_0	Facteur d'échelle en temps
$\tau(\mathbf{n})$	Anisotropie cinétique
$W(\mathbf{n})$	Épaisseur de l'interface donnée par : $W(\mathbf{n}) = W_0 a_s(\mathbf{n})$

▷ **Modèle de Stefan**

u_I	Température de l'interface
$\beta(\mathbf{n})$	Coefficient cinétique
d_0	Longueur capillaire
V_n	Vitesse normale de l'interface
ξ	Indice des 2 dir. principales de l'interface : $\xi = 1, 2$
θ_ξ	Angles entre \mathbf{n} et les dir. de l'interface
R_ξ	Rayons de courbure de l'interface

• **LIENS AVEC LE MODÈLE DE STEFAN**

a_1	Premier paramètre issu de l'analyse asymptotique
a_2	Second paramètre issu de l'analyse asymptotique « à interface fine »

• **ÉQUATIONS DE BOLTZMANN SUR RÉSEAUX**

▷ **Réseaux de Boltzmann et discrétisation**

δx	Pas de discrétisation en espace
δt	Pas de discrétisation en temps
k	Indice des classes des vitesses de déplacement
k'	Indice de la direction opposée à k
\mathbf{e}_k	Directions de déplacements sur le réseau
w_k	Poids associés à chaque direction de déplacement
N_{pop}	Nombre de directions de déplacement
e^2	Coefficient du réseau associé au calcul du moment d'ordre 2 de la fonction à l'équilibre
$\bar{\mathbf{I}}$	Tenseur identité d'ordre 2
\mathbf{x}	Position : $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$
$N_{x,y,z}$	Nombre de nœuds en x, y et z respectivement
n	Indice du pas de temps
i, j, l	Indices des positions en x, y et z
m	Indice des six plus proches voisins du réseau cubique
mm	Indice des 12 proches voisins suivants du réseau
\mathcal{A}_g	Anisotropie de la grille

▷ **Équation cinétique pour la température**

h_k	Fonction de distribution pour u : $u = \sum_{k=0}^{N_{pop}} h_k$
$h_k^{(0)}$	Fonction de distribution à l'équilibre pour u
ζ_u	Temps de relaxation associé à κ

▷ **Équation cinétique pour le champ de phase**

g_k	Fonction de distribution pour ϕ : $\phi = \sum_{k=0}^{N_{pop}} g_k$
$g_k^{(0)}$	Fonction de distribution à l'équilibre pour ϕ
ζ_ϕ	Temps de relaxation associé à $a_s^2(\mathbf{n})$
g_k^*	Fonction de distribution après l'étape de collision


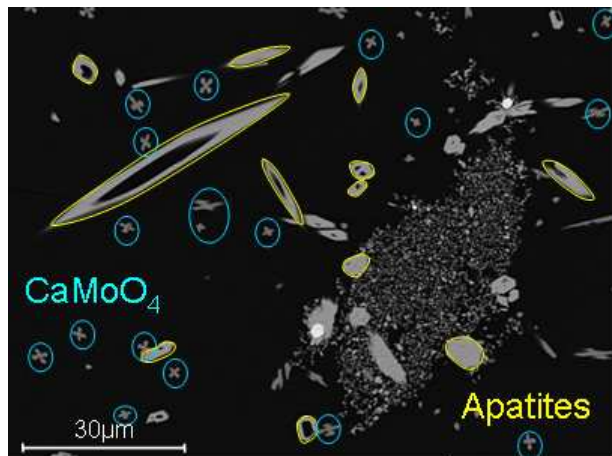
	Note Technique DEN		Page 8/30
	Réf : STMF/LATF/NT/13-008		
	Date : 15/3/2013		Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

FIG. 1: Cristaux de molybdates de calcium (CaMoO_4 en bleu) et d'apatites de type $\text{Ca}_2\text{Nd}_8(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$ (en jaune), d'après [8] (cas d'un verre UOx traité à 750°C pendant 120h) .



vue de la modélisation et de la simulation, il s'agit d'un problème dit de « surface libre » entre les deux phases dans lequel il s'agit de suivre l'évolution dans l'espace et le temps de l'interface solide/liquide. Parmi les différentes approches existantes sur cette thématique (séparées en deux catégories : interfaces raides et interfaces diffuses), l'approche déjà mise en œuvre dans [4] est celle des modèles établis par la « théorie du champ de phase » [9, 25] dans lesquels l'interface est décrite par une fonction phénoménologique $\phi(\mathbf{x}, t)$ comprise entre -1 et $+1$ ($-1 \leq \phi \leq +1$). Cette fonction joue le rôle d'une indicatrice de phase, par exemple $\phi = -1$ représente la phase liquide et $\phi = +1$ représente la phase solide, et $-1 < \phi < 1$ représente l'interface. Cette indicatrice varie continûment entre ces deux bornes, il s'agit d'une méthode à interface « diffuse ». On rappelle qu'un des principaux avantages de la théorie du champ de phase est d'établir des modèles mathématiques très cohérents avec la thermodynamique du système. Un autre avantage est lié à la généralisation aux systèmes multi-phases et multi-composants tels qu'ils apparaissent dans les verres. Un premier exemple est donné par la cristallisation de molybdates de calcium (CaMoO_4) (cristallisation dendritique pour les températures les plus basses) et d'apatites (cristallisation sous formes d'aiguilles hexagonales) dans certains verres d'intérêt nucléaire [8]. Un autre exemple est celui de la cristallisation de la néphéline ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$) issue de la réactivité chimique entre la fritte de verre et le calcinat [17].

Le modèle à champ de phase déjà testé dans [4] est celui présenté dans [34, 35]. Ce modèle, avec celui décrit

dans [15], est un des premiers modèles à reproduire la croissance dendritique anisotrope. Néanmoins, les simulations comparatives quantitatives réalisées dans [33] ont montré des différences avec des solutions de références, en particulier pour des valeurs du sous-refroidissement très inférieures à un ($\Delta \ll 1$). Le sous-refroidissement est défini par la relation $\Delta = C_p(T_m - T)/L$ où C_p est la chaleur spécifique, L est la chaleur latente, T la température et T_m la température de fusion. Dans la littérature, ce problème a été résolu tout en étant cohérent avec les solutions obtenues par d'autres théories (théorie de la « solvabilité » ou fonctions de Green), par le concept de modèle à champ de phase « avec limite à interface fine » [12, 13]. À ce jour, ce modèle est encore pris comme référence par plusieurs auteurs et équipes différents [7, 11, 18, 19, 22] pour la simulation de la croissance cristalline d'une substance pure. Les liens de ce modèle avec le modèle de Stefan sont établis par la méthode des développements asymptotiques en considérant que l'épaisseur de l'interface diffuse est finie et petite devant la taille de la structure cristalline. Dans la mise en œuvre classique des développements asymptotiques, on considère que l'épaisseur de l'interface tend vers zéro [3]. On en reparle dans la section suivante.

C'est ce modèle « avec limite à interface fine » qu'on propose de résoudre par méthode de Boltzmann sur réseaux. Bien qu'ayant déjà été résolu par plusieurs méthodes numériques (différences finies [13], éléments finis [22], volumes finis [7], avec ou sans raffinement automatique de maillage), à la connaissance de l'auteur, aucune méthode de Boltzmann sur réseaux n'a encore été proposée pour sa résolution. Des méthodes de Boltzmann existent déjà pour la simulation de la croissance cristalline d'une substance pure. Cependant le modèle résolu en 2D dans [6] est basé sur l'approche dite d'« enthalpie-porosités » [2, 31]. Le modèle à champ de phase résolu dans [26] est réalisé par une méthode de Boltzmann pour l'équation de la température et par une méthode de différences finies explicites pour l'équation du champ de phase. De même, dans [21], la méthode de Boltzmann n'est pas appliquée pour l'équation du champ de phase mais pour celles des écoulements et de la température.

Dans la suite de ce rapport, la section II rappellera le modèle à champ de phase avec limite à interface fine. La section III présentera les schémas de Boltzmann sur réseau pour sa résolution pour les réseaux D3Q7, D3Q15 et D3Q19. La section IV présentera des résultats de validations de la méthode avec deux schémas aux différences finies. Des simulations sur les effets d'anisotropie du maillage sont également présentées. La section V présentera quelques résultats de simulation de sensibilité aux



paramètres physiques du modèle. Enfin la section VI apportera quelques conclusions et perspectives à ce travail. Signalons pour terminer que ce rapport précède un second à venir sur la même thématique. Le modèle à champ de phase de ce présent rapport sera couplé aux équations de Navier-Stokes pour l'étude des effets des écoulements sur la croissance. Des résultats préliminaires ont déjà été présentés dans ce sens [5].

II. MODÈLE À CHAMP DE PHASE AVEC LIMITE À INTERFACE FINE

Les équations du modèle à champ de phase sont souvent introduites de façon générale dans les publications en faisant intervenir la dérivée variationnelle d'une fonctionnelle énergie libre (ou entropie) [1, 12, 13, 15, 22, 34]. Comme ce travail se positionne dans la façon de résoudre

les équations 3D présentées dans [13] par la méthode LB, et non sur la façon d'établir le modèle, on présente dans la section II A les équations effectivement résolues et on rappellera ensuite les hypothèses qui y sont relatives. Les liens avec le modèle de Stefan seront brièvement abordés et les mesures expérimentales nécessaires au modèle seront discutées dans la section II B.

A. Modèle mathématique

Le modèle à champ de phase résolu dans ce travail est composé de deux équations aux dérivées partielles : une première pour décrire l'évolution spatio-temporelle du champ de phase et une deuxième pour décrire celle de la température. En 3D, ces deux équations s'écrivent [13] :

$$\tau(\mathbf{n}) \frac{\partial \phi}{\partial t} = W_0^2 \nabla \cdot (a_s^2(\mathbf{n}) \nabla \phi) + W_0^2 \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(|\nabla \phi|^2 a_s(\mathbf{n}) \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial_\alpha \phi)} \right) + [\phi - \lambda u (1 - \phi^2)] (1 - \phi^2), \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \nabla^2 u + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (2)$$

Dans l'Éq. (2), la diffusivité thermique est notée κ et le champ de phase ϕ . u est la température sans dimension définie par $u = C_p(T - T_m)/L$, où T est la température, C_p est la chaleur spécifique à pression constante, T_m est la température de fusion, et L est la chaleur latente. On rappelle que cette définition de u est celle du nombre de Stefan, nombre sans dimension, qui apparaît dans l'étude du transfert thermique au cours d'un changement de phase solide-liquide. Il représente le rapport entre la chaleur sensible et la chaleur latente. Signalons que le sous-refroidissement Δ , introduit dans la section I, est défini comme l'opposé de cette température adimensionnée.

Le champ de phase ϕ est calculé par l'équation (1) dans laquelle W_0 est l'épaisseur de l'interface diffuse, λ est l'intensité du couplage avec la température et $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^T$ est le vecteur normal à l'interface défini par :

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}. \quad (3)$$

Dans ce modèle à champ de phase, l'énergie interfaciale $\sigma(\mathbf{n})$ et le coefficient cinétique $\beta(\mathbf{n})$ sont de la forme :

$$\frac{\sigma(\mathbf{n})}{\sigma_0} \equiv a_s(\mathbf{n}) = 1 - 3\varepsilon_s + 4\varepsilon_s \sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha^4, \quad (4)$$

$$\frac{\beta(\mathbf{n})}{\beta_0} \equiv a_c(\mathbf{n}) = 1 + 3\varepsilon_c - 4\varepsilon_c \sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha^4, \quad (5)$$

où σ_0 est l'énergie interfaciale moyenne et β_0 est le coefficient cinétique moyen. L'énergie interfaciale est définie par $\sigma(\mathbf{n}) = \sigma_0 a_s(\mathbf{n})$, où une petite variation de l'énergie interfaciale avec l'orientation \mathbf{n} est prise en compte dans une fonction sans dimension $a_s(\mathbf{n})$ définie par (4). De même pour le coefficient cinétique, sa variation avec l'orientation \mathbf{n} est prise en compte par la fonction $a_c(\mathbf{n})$. Les paramètres ε_s et ε_c sont les intensités de l'anisotropie de surface et de l'anisotropie cinétique respectivement, et les n_α (pour $\alpha = x, y, z$) sont les composantes du vecteur normal \mathbf{n} défini dans (3). Les définitions (4) et (5) sont cohérentes avec la symétrie du matériau cristallin avec une symétrie cubique sous-jacente. Des valeurs positives



de ε_s et ε_c favorisent la croissance le long des directions [100].

Dans (1), la fonction responsable de l'anisotropie cinétique est notée $\tau(\mathbf{n})$ qui s'exprime par :

$$\tau(\mathbf{n}) = \begin{cases} \tau_1(\mathbf{n}) = \tau_0 a_s^2(\mathbf{n}), \\ \tau_2(\mathbf{n}) = \tau_0 a_s(\mathbf{n}) a_c(\mathbf{n}) \left(1 + a_2 \frac{\lambda d_0}{\kappa \beta_0} \frac{a_s(\mathbf{n})}{a_c(\mathbf{n})} \right), \end{cases} \quad (6)$$

où d_0 est la longueur capillaire microscopique et $\tau_0 = \frac{\lambda^2 \beta_0 d_0}{a_1^2}$ est le facteur d'échelle en temps. Le paramètre a_1 est un premier coefficient relatif aux modèles à champ de phase. Ce coefficient établit le lien entre la longueur capillaire d_0 et les paramètres W_0 et λ du modèle à champ de phase (voir sous-section suivante). Le second coefficient a_2 est un coefficient spécifique au modèle à champ de phase *avec limite à interface fine*. Il provient d'une analyse asymptotique réalisée en considérant que l'épaisseur de l'interface ne tend pas vers zéro (voir sous-section suivante). La première fonction $\tau_1(\mathbf{n})$ est celle présentée originellement dans [13]. La seconde, $\tau_2(\mathbf{n})$, est reprise de [1, 22].

On rappelle que la forme du modèle à champ de phase est issue d'un calcul variationnel d'une fonctionnelle énergie libre (ou entropie) $\mathcal{F} = \int dV \left[\frac{W^2(\mathbf{n})}{2} |\nabla \phi|^2 + f(\phi, u) \right]$. Cette fonctionnelle est définie par une densité d'énergie libre $f(\phi, u)$ à laquelle s'ajoute un terme de gradient du champ de phase. La forme précise des équations du modèle, en particulier le terme de couplage, vient de la séparation de la fonction $f(\phi, u)$ en une combinaison de fonctions d'une seule variable : $f(\phi, u) = \mathcal{G}(\phi) + \lambda u \mathcal{P}(\phi)$. La première, notée $\mathcal{G}(\phi)$, est une fonction de potentiel qui apparaît en manipulant les relations thermodynamiques (intégration à u constant). Cette fonction est choisie de type double-puits, ici $\mathcal{G}(\phi) = -\frac{1}{2}\phi^2 + \frac{1}{4}\phi^4$ et pour cette fonction les positions de ses deux puits sont en $\phi = \pm 1$: si $\phi = +1$ la phase est solide et si $\phi = -1$ la phase est liquide. La seconde fonction, notée $\mathcal{P}(\phi)$, est une fonction d'interpolation introduite pour la séparation de l'énergie interne, initialement fonction des deux variables u et ϕ , en deux fonctions indépendantes, l'énergie interne qui ne dépend plus que de u et la fonction d'interpolation qui ne dépend que de ϕ . Dans ce travail, $\mathcal{P}(\phi) = \phi - \frac{2}{3}\phi^3 + \frac{1}{5}\phi^5$. Enfin, la forme du terme $\frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t}$ dans l'Éq. (2) est obtenue en faisant l'hypothèse qu'une autre fonction d'interpolation, responsable de la libération de chaleur latente L au cours du changement de phase, est prise égale à $\mathcal{L}(\phi) = \phi$. Une autre forme de cette fonction d'interpolation existe (présentée également

dans [13]) : $\mathcal{L}(\phi) = 15(\phi - \frac{2}{3}\phi^3 + \frac{1}{5}\phi^5)/8$. La méthode de Boltzmann présentée dans la section suivante peut s'adapter facilement à ce cas, mais aucune simulation n'a été réalisée dans ce travail avec cette fonction. Enfin, l'énergie interfaciale du modèle à champ de phase est donnée par $\sigma(\mathbf{n}) = W(\mathbf{n}) \int_{-1}^{+1} \sqrt{2[f(\phi) - f(\pm 1)]} d\phi$. Elle ne dépend que de la forme de la fonction énergie libre et elle est proportionnelle à l'épaisseur W . Les effets d'anisotropie sont reproduits correctement dans le modèle à champ de phase en faisant dépendre l'épaisseur de la même fonction d'anisotropie que l'énergie interfaciale (Éq. (4)) :

$$W(\mathbf{n}) = W_0 a_s(\mathbf{n}). \quad (7)$$

C'est sous cette forme qu'apparaît $W(\mathbf{n})$ dans l'équation du champ de phase (1).

Signalons pour terminer que cette équation (1) est très non-linéaire à cause (i) de la présence du terme de couplage qui fait apparaître le carré du champ de phase mais aussi (ii) par la présence des fonctions $\tau(\mathbf{n})$ et $a_s(\mathbf{n})$ qui dépendent de $\nabla \phi$ par l'intermédiaire de \mathbf{n} . Dans cette équation, le dernier terme du membre de droite est responsable de la solidification et l'avant dernier de l'anisotropie.

B. Liens avec le modèle de Stefan et les mesures expérimentales

Modèle de Stefan

L'appellation « avec limite à interface fine » de ce modèle à champ de phase, vient de ce que l'analyse (basée sur des développements asymptotiques) pour établir les liens entre le modèle à champ de phase avec le problème de Stefan, est faite en considérant une épaisseur d'interface diffuse W_0 petite, mais non nulle. On rappelle que le problème de Stefan pour la modélisation de la croissance d'une substance pure s'écrit (en considérant le changement de variable u) [1] :

$$\partial_t u = \kappa \nabla^2 u, \quad (8a)$$

$$V_n = \kappa \mathbf{n} \cdot (\nabla u|_{sol} - \nabla u|_{liq}), \quad (8b)$$

$$u_I = -d_0 \sum_{\xi=1,2} \left[a_s(\mathbf{n}) + \frac{\partial^2 a_s(\mathbf{n})}{\partial \theta_\xi^2} \right] \frac{1}{R_\xi} - \beta(\mathbf{n}) V_n. \quad (8c)$$



Dans (8a)-(8c), V_n est la vitesse normale de l'interface, \mathbf{n} est le vecteur normal de l'interface dirigée vers le liquide, $\mathbf{n} \cdot \nabla u|_{sol, liq}$ est le gradient normal de la température du côté solide et liquide respectivement. Dans (8c), d_0 est la longueur capillaire définie par $d_0 \equiv \sigma_0 T_m C_p / L^2$, θ_ξ sont les angles locaux entre la direction normale \mathbf{n} et les deux directions principales de l'interface, R_ξ sont les principaux rayons de courbure. La relation (8c) n'est autre que la condition de Gibbs-Thomson dans laquelle l'énergie interfaciale est équivalente à $\sigma(\mathbf{n}) \equiv \sigma_0 a_s(\mathbf{n})$ et le coefficient cinétique est $\beta(\mathbf{n})$. Les développements asymptotiques du modèle à champ de phase, réalisés classiquement en considérant $W \rightarrow 0$, conduisent aux relations [3] :

$$d_0 = a_1 \frac{W_0}{\lambda}, \quad (9a)$$

$$\beta(\mathbf{n}) = a_1 \frac{\tau(\mathbf{n})}{\lambda W(\mathbf{n})}. \quad (9b)$$

Ces relations relient les paramètres du modèle à champ de phase $W(\mathbf{n})$, λ et $\tau(\mathbf{n})$ à la longueur capillaire d_0 et au coefficient cinétique $\beta(\mathbf{n})$ qui sont des quantités mesurables. Le paramètre a_1 est une constante positive et dépend du choix des fonctions qui définissent la fonctionnelle énergie libre. Dans ce travail $a_1 = 5\sqrt{2}/8 = 0,8839$ [13].

La nouvelle analyse asymptotique « avec limite à interface fine », réalisée en supposant que l'épaisseur de l'interface W_0 est petite mais non nulle, apporte une correction au coefficient cinétique [13] :

$$\beta(\mathbf{n}) = a_1 \left[\frac{\tau(\mathbf{n})}{\lambda W(\mathbf{n})} - a_2 \frac{W(\mathbf{n})}{\kappa} \right]. \quad (10)$$

Cette correction fait apparaître un nouveau coefficient, a_2 , qui dépend (comme a_1) du choix de la fonction responsable de la libération de la chaleur latente dans (2). Dans ce travail on a pris $\mathcal{L}(\phi) = \phi$ et pour cette fonction $a_2 = 0,6267$ [13]. Plusieurs avantages découlent de cette correction. Le lecteur pourra se référer à l'introduction de [13] pour tous les détails. On se contente ici de reprendre un des principaux arguments indiqués dans cette référence : l'apparition de ce second terme permet d'annuler le coefficient cinétique β en posant :

$$\tau^*(\mathbf{n}) = \tau_0 a_s^2(\mathbf{n}), \quad (11)$$

$$\lambda^* = \frac{1}{a_2} \frac{\kappa \tau_0}{W_0^2}, \quad (12)$$

hypothèse qui a été reprise dans les simulations présentées dans [7].

Signalons pour terminer qu'une étude de la croissance dendritique avec la prise en compte d'un bruit thermique a été réalisée dans [14]. Par ailleurs, une analyse asymptotique avec « interface fine » a été réalisée pour un modèle à champ de phase avec des conductivités thermiques inégales dans [20]. Plus récemment cette approche a été appliquée pour la solidification non-isotherme dans les alliages dilués avec des diffusivités arbitraires [23].

Données expérimentales

Les données expérimentales nécessaires à ce modèle sont indiquées dans le tableau V de l'annexe A. Ce tableau est repris de [22] pour les données relatives au nickel. Une synthèse bibliographique est actuellement en cours au LDMC [27] pour l'acquisition de ces paramètres pour une substance congruente (substance pure) représentative des verres élaborés au CEA/Marcoule. Signalons que dans ce tableau, certaines valeurs, par exemple la force de l'énergie interfaciale ε_s n'est pas mesurée expérimentalement mais est issue de simulations de dynamique moléculaire [1]. Les valeurs de ce tableau permettent ensuite de déduire d'autres paramètres utiles, tels que la longueur capillaire d_0 , le coefficient cinétique β_0 et l'intensité de l'anisotropie cinétique ε_c à l'aide des relations indiquées dans le tableau VI.

III. MÉTHODES DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU

On présente dans cette section la méthode de Boltzmann pour la résolution du modèle à champ de phase introduit dans la section II. Pour établir la fonction de distribution à l'équilibre relative à l'équation du champ de phase, la présentation de cette section est basée sur une analogie avec le schéma LB classique pour la résolution de l'équation du transport par advection-diffusion (Advection-Diffusion Equation - ADE). Une présentation plus rigoureuse, basée sur les développements de Chapman-Enskog, est présentée en annexe B.

On rappelle donc que pour résoudre l'ADE suivante :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi) - \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) + Q, \quad (13)$$

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion, \mathbf{u} la vitesse et Q le terme source (ou puits), par une méthode de Boltzmann



sur un réseau, on définit un réseau, par exemple avec trois dimensions d'espace et sept directions de déplacement (réseau D3Q7, figure 2a.). Pour ce réseau, les directions de déplacement sont définies par $\mathbf{e}_0 = (0, 0, 0)^T$, $\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0)^T$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0)^T$, $\mathbf{e}_3 = (-1, 0, 0)^T$, $\mathbf{e}_4 = (0, -1, 0)^T$, $\mathbf{e}_5 = (0, 0, 1)^T$ et $\mathbf{e}_6 = (0, 0, -1)^T$ où T indique la transposée, et on applique l'algorithme suivant ([32] par exemple) :

$$g_k^{\text{Tr}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t + \delta t) = g_k^{\text{Tr}}(\mathbf{x}, t) + w_k Q(\mathbf{x}, t) \delta t - \frac{1}{\zeta} \left[g_k^{\text{Tr}}(\mathbf{x}, t) - g_k^{(0)\text{Tr}}(\mathbf{x}, t) \right], \quad (14)$$

où $g_k^{\text{Tr}}(\mathbf{x}, t)$ est la fonction de distribution (l'indice Tr indique qu'il s'agit de l'algorithme pour la résolution du Transport ADE), l'indice k identifie les sept directions de déplacement ($k = 0, \dots, 6$), δx est le pas de discrétisation en espace, δt est le pas de temps, $Q(\mathbf{x}, t)$ est un terme source (ou puits) qui apparaît dans (13). Les poids w_k sont donnés par $w_0 = 1/4$ et $w_{k=1, \dots, 6} = 1/8$ pour un réseau D3Q7 et $g_k^{(0)\text{Tr}}(\mathbf{x}, t)$ est la fonction de distribution à l'équilibre définie par :

$$g_k^{(0)\text{Tr}}(\mathbf{x}, t) = w_k \phi(\mathbf{x}, t) \left(1 + 4\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \frac{\delta t}{\delta x} \right). \quad (15)$$

Les moments d'ordre 0, 1 et 2 de cette fonction à l'équilibre sont respectivement $\sum_{k=0}^6 g_k^{(0)\text{Tr}} = \phi$, $\sum_{k=0}^6 g_k^{(0)\text{Tr}} \mathbf{e}_k = \mathbf{u} \phi \frac{\delta t}{\delta x}$, et $\sum_{k=0}^6 g_k^{(0)\text{Tr}} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k = \frac{1}{4} \phi \bar{\mathbf{I}}$ où

$\bar{\mathbf{I}}$ est le tenseur identité d'ordre 2. Le temps de relaxation ζ est relié au coefficient de diffusion par :

$$\zeta = \frac{4\delta t}{\delta x^2} \mathcal{D} + \frac{1}{2}. \quad (16)$$

Dans ce schéma, le terme diffusif de l'équation ADE, $\nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi)$, est pris en compte par le premier terme entre parenthèses du membre de droite de (15) alors que le terme advectif, $-\nabla \cdot (\mathbf{u} \phi)$, est pris en compte par le second terme. La présence de la fonction ϕ dans le terme diffusif et le terme advectif explique sa présence en facteur de (15). Le coefficient de diffusion \mathcal{D} est quant à lui pris en compte par le temps de relaxation ζ .

A. Schémas LB du modèle à champ de phase de Karma-Rappel

1. Équation du champ de phase

L'équation du champ de phase (1) présente quelques similitudes avec l'équation ADE (13). Dans (1), le premier terme du membre de droite est de type « diffusif », le second peut être assimilé au terme « advectif » mais sans la présence explicite de ϕ dans la divergence, et le dernier, responsable du couplage entre ϕ et u , est comparable au terme « source ».

En effectuant cette analogie, l'équation cinétique de Boltzmann proposée pour la résolution de l'équation du champ de phase est la suivante :

$$\tau(\mathbf{n}) g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t + \delta t) = g_k(\mathbf{x}, t) - (1 - \tau(\mathbf{n})) g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t) - \frac{1}{\zeta_\phi(\mathbf{x}, t)} \left[g_k(\mathbf{x}, t) - g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right] + w_k Q(\mathbf{x}, t) \delta t, \quad (17)$$

avec la fonction de distribution à l'équilibre :

$$g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) = w_k \left(\phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{e^2} \mathbf{e}_k \cdot \vec{\mathcal{N}}(\mathbf{x}, t) \frac{\delta t}{\delta x} \right). \quad (18)$$

Les fonctions $Q(\mathbf{x}, t)$ et $\vec{\mathcal{N}}(\mathbf{x}, t)$ qui apparaissent dans (17) et (18) sont définies comme suit. La première, scalaire, est assimilée au terme source (pour plus de concision les dépendances en \mathbf{x} et t sont omises dans le membre de droite) :

$$Q(\mathbf{x}, t) = [\phi - \lambda u(1 - \phi^2)] (1 - \phi^2). \quad (19)$$

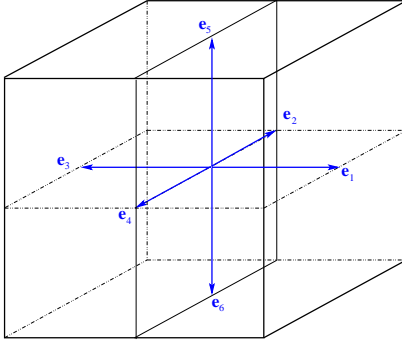
La seconde, de nature vectorielle, est définie par :

$$\vec{\mathcal{N}}(\mathbf{x}, t) = W_0^2 |\nabla \phi|^2 a_s(\mathbf{n}) \left(\frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial_x \phi)}, \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial_y \phi)}, \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial_z \phi)} \right)^T. \quad (20)$$

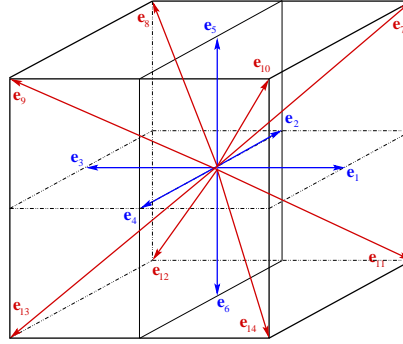
Le champ de phase est calculé après les étapes de déplacement et de mise à jour des conditions aux limites

FIG. 2: Réseaux du schéma LB.

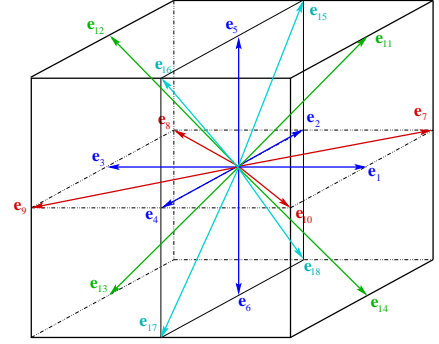
a. Réseau D3Q7



b. Réseau D3Q15



c. Réseau D3Q19



par :

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^{N_{pop}} g_k(\mathbf{x}, t). \quad (21)$$

L'algorithme de Boltzmann sur réseau pour la résolution de l'équation du champ de phase diffère de l'algorithme classique LB pour la résolution de l'équation du transport sur deux aspects. Le premier est l'apparition du second terme du membre de droite de (17) : $(1 - \tau(\mathbf{n}))g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t)$ qui est un terme non local en espace. Ce terme est qualifié de « non local » au sens où il intervient dans l'étape de collision au temps t (qui est généralement locale) et nécessite la connaissance de g_i aux nœuds voisins, c'est-à-dire en $\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x$. La présence de ce terme supplémentaire et du facteur $\tau(\mathbf{n})$ devant $g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t + \Delta t)$ dans le membre de gauche de (17), s'expliquent pour la prise en compte du facteur $\tau(\mathbf{n})$ devant la dérivée en temps $\partial\phi/\partial t$ de l'équation (1). On le voit immédiatement en faisant l'étape des développements en série de Taylor des fonctions $g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t + \delta t)$ et $(1 - \tau(\mathbf{n}))g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t)$ au cours du développement de Chapman-Enskog (voir annexe B 1). La méthode est inspirée de [32].

Le second point de différenciation avec l'algorithme de résolution de l'équation du transport est la formulation de la fonction de distribution à l'équilibre (18). Dans cette fonction, le vecteur $\vec{N}(\mathbf{x}, t)$ est assimilé au vecteur $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. L'absence du champ de phase $\phi(\mathbf{x}, t)$ dans le terme de divergence de (1) explique sa présence dans le premier terme entre parenthèses de (18) et non pas en facteur comme c'est le cas pour la fonction à l'équilibre

relative au transport par ADE $g_k^{(0)}\text{Tr}(\mathbf{x}, t)$. On notera par ailleurs le changement de signe devant le produit scalaire dans (18) qui correspond au changement de signe du terme $-\nabla \cdot (\mathbf{u}\phi)$ pour l'ADE à $+\nabla \cdot \vec{N}$ pour l'équation du champ de phase. On peut vérifier que les moments d'ordre 0, 1 et 2 de la fonction de distribution à l'équilibre ainsi définie (Éq. (18)) sont respectivement (voir annexe B 2) :

$$\sum_{k=0}^{N_{pop}} g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t), \quad (22a)$$

$$\sum_{k=0}^{N_{pop}} g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t)\mathbf{e}_k = -\vec{N}(\mathbf{x}, t)\frac{\delta t}{\delta x}, \quad (22b)$$

$$\sum_{k=0}^{N_{pop}} g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t)\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k = e^2\phi(\mathbf{x}, t)\bar{\mathbf{I}}. \quad (22c)$$

Dans (22c), $\bar{\mathbf{I}}$ est le tenseur identité d'ordre 2 et $e^2 = 1/4$ pour un réseau D3Q7. Toujours en procédant par analogie avec l'ADE où le temps de relaxation est relié à la diffusion, le terme $a_s^2(\mathbf{n})$ joue le rôle dans l'équation (1) de coefficient de « diffusion ». Ce coefficient dépend de la normale \mathbf{n} à l'interface définie comme le rapport du gradient de ϕ divisé par sa norme (Éq. (3)). Le vecteur \mathbf{n} est une fonction de la position et du temps (par l'intermédiaire de ϕ) tout comme $a_s^2(\mathbf{n})$. Le temps de relaxation $\zeta_\phi(\mathbf{x}, t)$ est une fonction de la position et du temps et doit être remis à jour à chaque pas de temps par la relation suivante :



$$\zeta_\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta t}{e^2 \delta x^2} W_0^2 a_s^2(\mathbf{n}) + \frac{1}{2}. \quad (23)$$

On notera que le schéma est complètement explicite : tous les termes du membre de droite de (17) sont en effet définis en t . Il en est de même pour le facteur $\tau(\mathbf{n})$ du membre de gauche qui est traité explicitement. Le calcul du champ de phase ϕ au premier pas de temps s'appuie sur la connaissance des conditions initiales $\phi(\mathbf{x}, 0)$ et $u(\mathbf{x}, 0)$ pour le calcul de $Q(\mathbf{x}, 0)$.

2. Équation de la température

Une fois le champ de phase ϕ connu au temps $t + \delta t$, celui-ci est utilisé pour le calcul du champ de température u . L'algorithme LB pour la résolution de l'équation de la chaleur (2) est une équation de diffusion standard au terme de couplage près. Le schéma LB s'écrit [24] :

$$h_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t + \delta t) = h_k(\mathbf{x}, t) + w_k S(\mathbf{x}, t) \delta t - \frac{1}{\zeta_u} [h_k(\mathbf{x}, t) - h_k^{(0)}(\mathbf{x}, t)] \quad (24)$$

et la fonction de distribution à l'équilibre est :

$$h_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) = w_k u(\mathbf{x}, t). \quad (25)$$

Par analogie avec l'ADE, on remarque qu'à cause de l'absence du terme advectif dans l'équation de la température (2), la fonction de distribution à l'équilibre $h_k^{(0)}$ ne fait pas intervenir le second terme, celui avec le produit scalaire, contenu entre parenthèses dans (15). Cette remarque se démontre formellement en effectuant les développements de Chapman-Enskog. On rappelle que les moments de cette fonction de distribution sont $\sum_{k=0}^6 h_k^{(0)} = u$, $\sum_{k=0}^6 h_k^{(0)} \mathbf{e}_k = \mathbf{0}$ et $\sum_{i=0}^6 h_i^{(0)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_k = (1/4) u \bar{\mathbf{I}}$. Le terme de couplage avec le champ de phase est donné par :

$$S(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t). \quad (26)$$

Dans ce travail, la dérivée temporelle est approchée par différences finies centrées : $\frac{\partial \phi}{\partial t} \simeq \frac{\phi(t+\delta t) - \phi(t-\delta t)}{2\delta t}$. Au premier pas de temps, un schéma d'Euler explicite est utilisé. Comme pour le champ de phase, la température est calculée après l'étape de déplacement (et la mise à jour des conditions aux limites) par :

$$u(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^{N_{pop}} h_k(\mathbf{x}, t). \quad (27)$$

La diffusivité thermique est considérée constante et identique pour chaque phase solide et liquide. Le temps de relaxation ζ_u est constant au cours des itérations en temps. Il est évalué lors de l'initialisation par la relation :

$$\zeta_u = \frac{\delta t}{e^2 \delta x^2} \kappa + \frac{1}{2}. \quad (28)$$

B. Quelques précisions sur la mise en œuvre de l'algorithme

On détaille ici les principales étapes de l'algorithme et on apporte quelques précisions sur la mise en œuvre de la méthode LB relative au champ de phase. L'algorithme est séquentiel : après la résolution de l'équation du champ de phase ϕ , ce dernier est utilisé pour la résolution de l'équation du champ de température u . Pour la résolution de chacune de ces deux équations, les étapes classiques d'un schéma LB sont appliquées, c'est-à-dire :

1. Calcul de la fonction à l'équilibre (Éq. (17) pour ϕ et (25) pour u).
2. Collision (membres de droite de (17) et (24)).
3. Déplacement (membres de gauche de (17) et (24)).
4. Mise à jour des conditions aux limites.
5. Calcul du moment d'ordre 0 (Éq. (21) et (27)).

Conformément aux étapes 2 et 3 de l'algorithme, l'équation cinétique (17) est séparée en une étape de collision suivie d'une étape de déplacement de la fonction de distribution g_i . L'étape de collision s'écrit :

$$g_k^*(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau(\mathbf{n})} \left\{ g_k(\mathbf{x}, t) - (1 - \tau(\mathbf{n})) g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t) - \frac{1}{\zeta_\phi(\mathbf{x}, t)} [g_k(\mathbf{x}, t) - g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t)] + w_k Q(\mathbf{x}, t) \delta t \right\}, \quad (29)$$

où le symbole \star indique la fonction de distribution après l'étape de collision. Comme on l'a dit, cette étape n'est plus locale à cause de la prise en compte du terme $(1 -$



$\tau(\mathbf{n})g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t)$. Elle est réalisée sur tous les nœuds $(i, j, l) \in [1, N_x] \times [1, N_y] \times [1, N_z]$. Sur l'ensemble des nœuds situés sur les limites du domaine (0 et $N_\alpha + 1$, pour $\alpha = x, y, z$) l'étape de collision standard est réalisée, sans tenir compte du terme en $(1 - \tau(\mathbf{n}))g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t)$:

$$g_k^*(\mathbf{x}, t) = g_k(\mathbf{x}, t) + w_k Q(\mathbf{x}, t) \delta t - \frac{1}{\zeta_\phi(\mathbf{x}, t)} \left[g_k(\mathbf{x}, t) - g_k^{(0)}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (30)$$

Cette façon de procéder permet de maintenir des valeurs minimales et maximales du champ de phase $\phi(\mathbf{x}, t)$ à -1 et $+1$ respectivement. L'étape de déplacement est classique et s'écrit :

$$g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k\delta x, t + \delta t) = g_k^*(\mathbf{x}, t). \quad (31)$$

La mise à jour des conditions aux limites s'effectue par la règle du « bounce back » classique $g_k(\mathbf{x}, t) = g_{k'}(\mathbf{x}, t)$ où k' est la direction opposée à k . Par exemple pour un nœud $(0, j, l)$, la composante g_1 , inconnue après l'étape de déplacement, est mise à jour par la relation $g_1(0, j, l) = g_3(0, j, l)$. La méthode du bounce back est appliquée pour l'équation du champ de phase et l'équation de la température. Elle correspond à une condition de flux nul pour chaque équation.

Le calcul du gradient $\nabla\phi$ pour l'évaluation du vecteur normal \mathbf{n} est fait par différences finies centrées. Enfin, le calcul à chaque pas de temps du vecteur $\vec{N}(\mathbf{x}, t)$ (Éq. (20)) nécessite l'évaluation des dérivées $\partial a_s(\mathbf{n})/\partial(\partial_\alpha\phi)$ qui s'expriment pour $\alpha = x, y, z$ de la façon suivante :

$$\frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial(\partial_\alpha\phi)} = -\frac{16\varepsilon_s}{|\nabla\phi|^6} \times \alpha \left[(\partial_\beta\phi)^4 - (\partial_\alpha\phi)^2(\partial_\beta\phi)^2 - (\partial_\alpha\phi)^2(\partial_\gamma\phi)^2 + (\partial_\gamma\phi)^4 \right]. \quad (32)$$

Dans cette expression, pour $\alpha = x$ on a $\beta = y$ et $\gamma = z$. Lorsque $\alpha = y$, on a $\beta = x$ et $\gamma = z$. Enfin pour $\alpha = z$, $\beta = x$ et $\gamma = y$.

Pour l'équation du champ de phase, les cinq étapes de l'algorithme doivent être précédées des étapes suivantes, nécessaires pour le calcul de la fonction à l'équilibre et la mise à jour du temps de relaxation :

- Calculs de $\nabla\phi$ par différences finies centrées et de sa norme pour l'évaluation de la normale \mathbf{n} à l'interface (Éq. (3)).
- Calcul des fonctions $\tau(\mathbf{n})$ avec (6), $a_c(\mathbf{n})$ et $a_s(\mathbf{n})$ avec (4) et ses dérivées avec (32) pour l'évaluation des composantes de \vec{N} (Éq. (20)).
- Calcul du terme de couplage Q en utilisant (19).
- Mise à jour du temps de relaxation ζ_ϕ (Éq. (23)).

C. Réseaux D3Q15 et D3Q19

Certains auteurs [1, 13, 22] ont mentionné l'apparition de solutions non physiques liées aux effets de la discrétisation de l'équation relative au champ de phase. Ce problème a été qualifié d'« effet d'anisotropie de grille ». Plus précisément, si on pose $\varepsilon_s = 0$ dans (4) et $\varepsilon_c = 0$ dans (5), les termes responsables de l'anisotropie s'annulent (avant dernier terme de (1)) et la solution doit également être une sphère. Ainsi, dans [1], les auteurs utilisent une formule aux différences finies qui tient compte des 18 points voisins pour l'évaluation du laplacien dans l'équation du champ de phase (voir section IV). La solution obtenue par cette méthode correspond bien à une sphère contrairement à celle obtenue par une méthode où le laplacien est discrétisé en n'utilisant que les 6 plus proches voisins. Dans [22], les auteurs réalisent quant à eux une étude approfondie sur l'effet de la taille du rayon initial et concluent que l'anisotropie de grille a un effet non négligeable sur la forme du cristal pour de petite graine initiale ou pour une croissance cristalline à faible sous-refroidissement.

Afin d'étudier les effets d'anisotropie provenant du maillage, deux autres réseaux (classiques dans les méthodes LB), le D3Q15 et le D3Q19 (figures 2b. et 2c.), ont été testés en plus du réseau D3Q7. Pour ces deux nouveaux réseaux, l'algorithme reste identique à celui décrit dans la sous-section III A. En plus de l'ajout des directions de déplacements supplémentaires : $N_{pop} = 6$ pour le réseau D3Q7, $N_{pop} = 14$ pour le réseau D3Q15 et $N_{pop} = 18$ pour le réseau D3Q19 (figures 2a., 2b. et 2c.), les modifications sont les valeurs des poids $w_{k=0,\dots,N_{pop}}$ ainsi que la valeur du coefficient du réseau e^2 qui apparaît au cours du calcul du moment d'ordre deux de la fonction de distribution à l'équilibre. Les valeurs des paramètres qui font l'objet d'une modification au passage d'un réseau à l'autre sont résumées dans le tableau II. Pour le réseau D3Q15, en plus des six directions de déplacement qui correspondent à celles du réseau D3Q7, s'ajoutent les direc-



TAB. II: Valeurs des poids et de la constante pour chaque réseau.

Réseau	N_{pop}	w_0	$w_{1,...,6}$	$w_{7,...,14}$	$w_{15,...,18}$	e^2
D3Q7	6	1/4	1/8	—	—	1/4
D3Q15	14	2/9	1/9	1/72	—	1/3
D3Q19	18	1/3	1/18	—	1/36	1/3

tions supplémentaires suivantes : $\mathbf{e}_7 = (1, 1, 1)^T$, $\mathbf{e}_8 = (-1, 1, 1)^T$, $\mathbf{e}_9 = (-1, -1, 1)^T$, $\mathbf{e}_{10} = (1, -1, 1)^T$, $\mathbf{e}_{11} = (1, 1, -1)^T$, $\mathbf{e}_{12} = (-1, 1, -1)^T$, $\mathbf{e}_{13} = (-1, -1, -1)^T$, $\mathbf{e}_{14} = (1, -1, -1)^T$ qui correspondent aux huit diagonales du cube. Celles du réseau D3Q19 sont définies par $\mathbf{e}_{7,8} = (\pm 1, 1, 0)^T$, $\mathbf{e}_{9,10} = (\pm 1, -1, 0)^T$, $\mathbf{e}_{11,12} = (\pm 1, 0, 1)^T$, $\mathbf{e}_{13,14} = (\pm 1, 0, -1)^T$, $\mathbf{e}_{15,16} = (0, \pm 1, 1)^T$, $\mathbf{e}_{17,18} = (0, \pm 1, -1)^T$.

Rappelons qu'un dernier réseau existe, le D3Q27, composé des directions de déplacement du D3Q19 auxquelles s'ajoutent les 8 directions diagonales du cube prises en compte dans le D3Q15. Ce dernier réseau n'a pas été testé dans ce travail compte tenu des bons résultats obtenus par les D3Q15 et D3Q19 et de l'augmentation importante des temps CPU qu'engendrent ces derniers (voir section suivante).

IV. MISE EN ŒUVRE DES SIMULATIONS ET VALIDATIONS DE LA MÉTHODE

On détaille dans cette section la mise en œuvre des simulations c'est-à-dire les conditions aux limites, les conditions initiales, les valeurs des paramètres qui sont restées inchangées dans tout ce travail et les tests de convergence en maillage (sous-section IV A). Sont également présentés dans la sous-section IV B des résultats de comparaison entre le schéma LB avec deux schémas aux différences finies qui permettent de valider la méthode de Boltzmann. Les effets d'anisotropie de grille sont également présentés dans cette sous-section.

A. Mise en œuvre des simulations

1. Conditions initiales et conditions aux limites

Pour l'ensemble des simulations qui suivent, le domaine de calcul est cubique et les conditions aux limites sont de type flux nul sur les six faces du cube. Des conditions aux limites identiques sont appliquées pour l'équation du

champ de phase et celle de la température. Pour les deux équations, les conditions initiales sont des sphères « diffuses » à l'intérieur du domaine de calcul.

Pour l'équation du champ de phase, la condition initiale est de la forme suivante :

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \tanh\left(\frac{R_s - d_s}{\sqrt{l_s}}\right), \quad (33)$$

où R_s est le rayon de la sphère, $d_s = \sqrt{(x - x_s)^2 + (y - y_s)^2 + (z - z_s)^2}$ avec $\mathbf{x}_s = (x_s, y_s, z_s)^T$ la position de son centre. La condition initiale est qualifiée de « diffuse » par la présence de la fonction tangente hyperbolique qui « régularise » l'interface entre les phases liquide et solide. Avec cette condition initiale, $\phi = +1$ à l'intérieur de la sphère (solide) et $\phi = -1$ à l'extérieur (liquide). Le coefficient l_s permet de diminuer ou d'augmenter la pente du profil de ϕ entre ces deux valeurs extrêmes. Dans ce travail $l_s = 2$ comme dans [18].

Pour l'équation de la température la condition initiale est construite comme suit :

$$u(\mathbf{x}, 0) = \frac{u_0}{2} \left[\tanh\left(\frac{R_s - d_s}{\sqrt{l_s}}\right) - 1 \right], \quad (34)$$

qui permet d'assurer une valeur $u = 0$ à l'intérieur de la sphère (équivalente à une température égale à la température de fusion $T = T_m$) et $u = -u_0$ à l'extérieur qui correspond à l'opposé du sous-refroidissement Δ . Des simulations de sensibilité à la valeur de la température initiale u_0 seront présentées dans la sous-section suivante.

2. Valeurs des paramètres

Dans ce travail, les valeurs des paramètres sont sans dimension et ont été choisis *a priori*. On n'a pas cherché à appliquer le modèle sur des données expérimentales réelles. Une synthèse bibliographique de la valeur de ces paramètres sur des substances représentatives des éléments qui cristallisent dans les verres nucléaires de Marcoule est en cours [27]. L'application de ce modèle sur les données issues de cette synthèse fera l'objet d'une nouvelle note technique.

Par ailleurs, certains paramètres n'ont pas fait l'objet d'une étude de sensibilité et sont restés fixés. Ces paramètres pourront faire l'objet d'une étude ultérieure, en particulier lorsqu'on cherchera à appliquer le modèle sur les données représentatives des verres nucléaires. Il

s'agit de l'épaisseur de l'interface $W_0 = 0,01$, du facteur d'échelle de temps $\tau_0 = 10^{-4}$ et du coefficient $A = a_2 \frac{\lambda d_0}{\kappa \beta_0} = 0,1$ dans la fonction cinétique $\tau_2(\mathbf{n})$.

3. Convergence en maillage

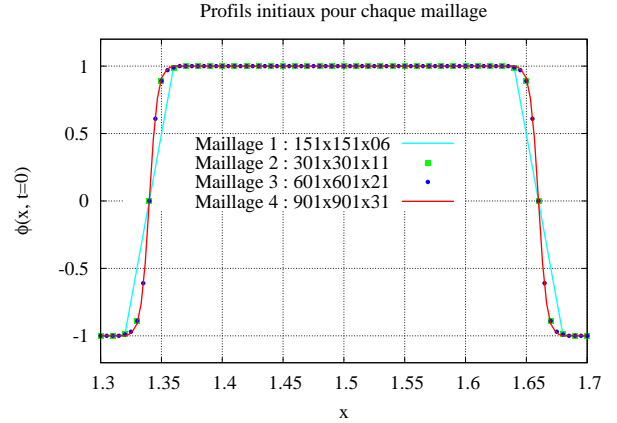
Pour le choix de la taille du maillage, on réalise quelques simulations de sensibilité au pas de temps et au pas d'espace. Afin de diminuer le temps de calcul pour les maillages contenant le plus de nœuds, les simulations de convergence sont réalisées en « quasi-2D » c'est-à-dire qu'une des longueurs, celle en z , est prise beaucoup plus petite que les deux autres. On prend $L_x = 3$, $L_y = 3$ et $L_z = 0,1$ c'est-à-dire que pour ce test, $L_x = L_y = 30L_z$. Par ailleurs, on a $\delta x = \delta y = \delta z$.

Quatre maillages M_1 , M_2 , M_3 et M_4 sont ainsi testés. Le premier est composé de $151 \times 151 \times 6$ nœuds. Le second est composé de $301 \times 301 \times 11$ nœuds, le troisième de $601 \times 601 \times 21$ nœuds et le dernier de $901 \times 901 \times 31$ nœuds. Pour chacun de ces maillages les pas d'espace sont respectivement $\delta x_{M_1} = 2 \times 10^{-2}$, $\delta x_{M_2} = 1 \times 10^{-2}$, $\delta x_{M_3} = 5 \times 10^{-3}$ et $\delta x_{M_4} = 3,3333 \times 10^{-3}$ (les pas d'espace sont divisés par 2 du maillage le plus grossier au maillage le plus fin, sauf pour le dernier). Les pas de temps sont respectivement $\delta t_{M_1} = 4 \times 10^{-5}$, $\delta t_{M_2} = 1 \times 10^{-5}$ (facteur 4), $\delta t_{M_3} = 5 \times 10^{-6}$ (facteur 2) et $\delta t_{M_4} = 2 \times 10^{-6}$ (facteur 2,5). L'ensemble de ces valeurs est récapitulé dans le tableau IIIA. Pour chaque maillage le rayon de la sphère initiale R_s est augmenté en proportion de $R_s = 8$ u.r. (unité de réseau) pour le premier, jusqu'à $R_s = 48$ u.r. pour le dernier. Signalons que pour cette étude en quasi-2D, la condition initiale n'est pas à proprement parler une sphère, mais ressemble à un cylindre puisque les rayons choisis sont plus grands que le nombre de nœuds en z .

Les comparaisons s'effectuent sur des profils du champ de phase ϕ recueillis le long de l'axe des x et passant par le centre de chaque cylindre (coordonnées indiquées dans le tableau IIIB). La figure 3 permet de vérifier que les profils initiaux de ϕ se superposent bien à l'instant initial pour chaque maillage.

Les graphes de la figure 4 présentent les profils du champ de phase le long de x . Ces profils sont présentés aux mêmes temps, c'est-à-dire aux itérations 750 pour M_1 , 3000 pour M_2 , 6000 pour M_3 et 15000 pour M_4 (ce qui correspond au temps $t = 0,03$). Pour plus de précision, un agrandissement est indiqué sur le graphe de droite de la figure. On constate que ce sont principalement les triangles cyans du maillage M_1 qui s'écartent de la courbe de référence en rouge du maillage M_4 . Cette

FIG. 3: Profils initiaux du champ de phase ϕ pour l'étude de convergence en maillage.



constatation est confirmée par le calcul de l'erreur relative en norme L^2 définie par :

$$\text{Err}_{L^2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=0}^{N_x+1} (\phi_{M_4}(i) - \phi_{M_{1,2,3}}(i))^2}{\sum_{i=0}^{N_x+1} \phi_{M_4}^2(i)}} \times 100 \quad (35)$$

Pour le calcul des erreurs relatives, les valeurs du champ de phase du maillage M_4 , ϕ_{M_4} pour $t = 5000\delta t_4$ et $t = 15000\delta t_4$, sont prises comme valeurs de référence. Les erreurs sont calculées pour le champ de phase des trois autres maillages aux mêmes temps, c'est-à-dire à $t = 250\delta t_1$ et $t = 750\delta t_1$ pour M_1 , à $t = 1000\delta t_2$ et $t = 3000\delta t_2$ pour M_2 et à $t = 2000\delta t_3$ et $t = 6000\delta t_3$ pour M_3 . Les erreurs ainsi calculées sont indiquées dans le tableau IV. L'erreur étant inférieure au pourcent, on choisit d'effectuer toutes les simulations qui suivent avec un maillage composé de $301 \times 301 \times 11$ nœuds pour les simulations en quasi-2D et un autre composé de $301 \times 301 \times 301$ nœuds pour les simulations en 3D.

B. Validations avec deux schémas aux différences finies

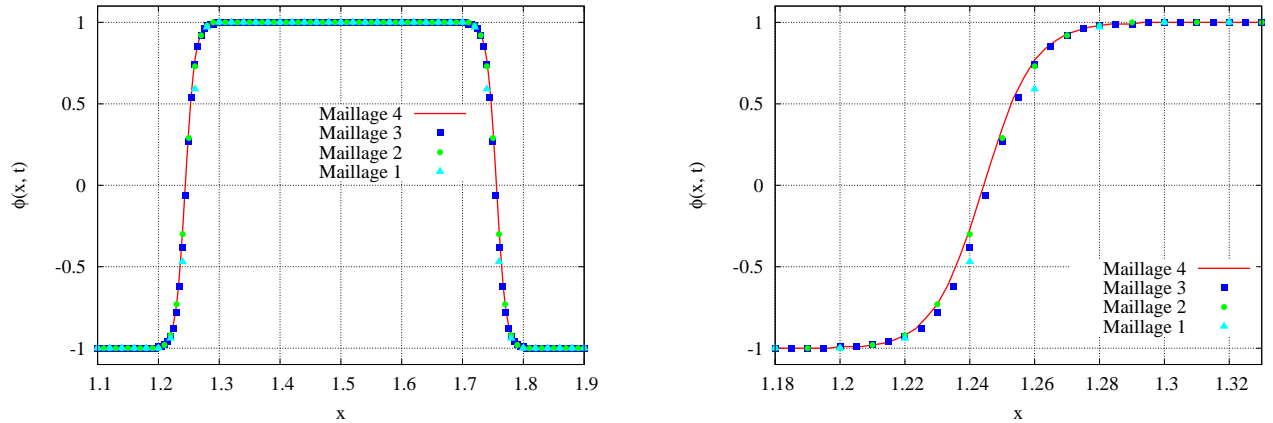
La méthode de Boltzmann, présentée dans la section précédente, est validée par comparaison avec deux schémas aux Différences Finies (DF). L'objet de cette sous-section est de les détailler brièvement. Les deux schémas se différencient dans la façon de discrétiser le laplacien dans l'équation du champ de phase. La première méthode utilise un schéma à 6 nœuds voisins (DF6) alors que la seconde en considère 18 (DF18). Dans toutes les simulations de ce rapport, seule la méthode LB avec un réseau

TAB. III: A. Caractéristiques des maillages pour l'étude de convergence. B. Caractéristiques de la graine initiale.

		A.			
		Maillage 1	Maillage 2	Maillage 3	Maillage 4
Grandeurs	Symb	M_1	M_2	M_3	M_4
Nombre de nœuds en x	N_x	151	301	601	901
Nombre de nœuds en y	N_y	151	301	601	901
Nombre de nœuds en z	N_z	6	11	21	31
Pas de discrétisation	δx	2×10^{-2}	1×10^{-2}	5×10^{-3}	$3,3333 \times 10^{-3}$
Pas de temps	δt	4×10^{-5}	1×10^{-5}	5×10^{-6}	2×10^{-6}

B.			
Rayon	Position centre	Dimension	
R_s	(x_s, y_s, z_s)	Unité de réseau	
Maillage 1	8	(75, 75, 3)	—
Maillage 2	16	(150, 150, 5)	—
Maillage 3	32	(300, 300, 10)	—
Maillage 4	48	(450, 450, 15)	—

FIG. 4: Profils du champ de phase au temps $t = 0,03$ pour les quatre maillages M_1 , M_2 , M_3 et M_4 (gauche) et agrandissement (droite) au voisinage de $x = 1,25$.



TAB. IV: Erreurs L^2 pour les maillages M_1 , M_2 et M_3 avec ϕ_{M_4} à $5000\delta t_4$ et $15000\delta t_4$

	$\phi_{M_4}(x, t = 0,01)$	$\phi_{M_4}(x, t = 0,03)$
$\text{Err}_{L^2}(\phi_{M_1})$	2,503	3,142
$\text{Err}_{L^2}(\phi_{M_2})$	0,368	0,659
$\text{Err}_{L^2}(\phi_{M_3})$	0,600	1,224

D3Q7 est utilisée pour la résolution de l'équation relative à la température.

1. Validations dans le cas isotrope

L'équation du champ de phase est discrétisée avec un schéma d'Euler explicite pour la partie temporelle (ordre 1) :

$$\phi_{i,j,l}^{n+1} = \phi_{i,j,l}^n + \left(W_0^2 \nabla^2 \phi^n|_{i,j,l} + Q_{i,j,l}^n \right) \frac{\delta t}{\tau_0}, \quad (36)$$

où n est l'indice du pas de temps de calcul, les indices i , j et l sont les indices des positions en x , y et



z respectivement et Q est le terme de couplage donné par (19). Dans (36), on a posé $\varepsilon_s = 0$, ce qui fait que $a_s(\mathbf{n}) = 1$. Le laplacien est d'abord discrétisé par la formule standard où chaque terme est approché par $\partial_{xx}\phi \simeq \frac{1}{\delta x^2}(\phi_{i+1,j,l} - 2\phi_{i,j,l} + \phi_{i-1,j,l})$. En 3D pour $\delta x = \delta y = \delta z$, le laplacien est donc donné par :

$$\nabla^2 \phi^n|_{i,j,l} \simeq \frac{1}{\delta x^2} \left(\sum_{m=1}^6 \phi_m^n - 6\phi_{i,j,l}^n \right), \quad (37)$$

où le symbole \sum_m représente la somme des six plus proches voisins au nœud (i, j, l) du réseau cubique. Les six plus proches voisins du réseau correspondent aux sites de déplacement du réseau D3Q7 (voir figure 2a.).

La seconde formule utilisée dans ce travail est la suivante [1] :

$$\nabla^2 \phi^n|_{i,j,l} \simeq \frac{1}{3\delta x^2} \left[\sum_{m=1}^6 \phi_m^n + \frac{1}{2} \sum_{mm=1}^{12} \phi_{mm}^n - 12\phi_{i,j,l}^n \right], \quad (38)$$

où \sum_m a la même signification que dans (37), et \sum_{mm} est la somme des 12 proches voisins suivants. C'est donc une approximation du laplacien qui tient compte des 18 voisins du nœud courant, sur lequel on cherche à calculer le laplacien. L'ensemble des 18 nœuds voisins correspondent aux 18 sites de déplacement du réseau D3Q19 du schéma LB.

Une première comparaison est réalisée sur le maillage quasi-2D composé de $301 \times 301 \times 11$ nœuds. Sur ce maillage, cinq simulations sont réalisées : trois avec la méthode LB (réseaux D3Q19, D3Q15 et D3Q7) et deux avec les différences finies (DF6 et DF18). Pour ces simulations $\lambda = 10$, $\tau = \tau_1$, $\varepsilon_s = 0$, $\kappa = 0,7$. Le pas de temps est pris égal $\delta t = 1,5 \times 10^{-5}$. Les résultats sont présentés sur la figure 5 au temps $t = 10^4 \delta t$. Les isovaleurs $\phi = 0$ sont présentées sur le graphe de gauche et les profils sur celui de droite. Sur ce dernier, seule la zone interfaciale est représentée. Les isovaleurs sont issues d'une coupe réalisée selon un plan de normale $(0, 0, 1)$ passant par le point de coordonnées $(150, 150, 5)$ qui correspond au centre de la condition initiale. Les profils sont quant à eux recueillis le long de l'axe des X à partir du même point central. On constate que les résultats sont bons entre les schémas DF et LB malgré de très légers écarts sur les profils entre les positions $R = 31$ et $R = 34$.

2. Effets d'anisotropie du maillage 3D

On réalise maintenant des simulations comparatives entre les schémas LB et DF sur un maillage 3D, composé de $301 \times 301 \times 301$ nœuds. Les simulations sont encore réalisées dans le cas isotrope c'est-à-dire $\varepsilon_s = 0$. Le rayon de la sphère initiale est maintenant prise égale à $R_s = 8$ u.r.

Le champ de température est présenté sur la figure 6. Les isosurfaces $\phi = 0$ du champ de phase sont présentées sur la figure 7 pour chacun des trois réseaux à $t = 10^4 \delta t$. On constate que la forme du contour est bien sphérique pour les réseaux D3Q15 et D3Q19 contrairement à celui obtenu par avec le réseau D3Q7. Cette impression visuelle est confirmée quantitativement par les coupes réalisées selon deux plans différents, le premier de normale $(0, 0, 1)$ et le second de normale $(1, 0, -1)$ (figure 8). Sur ces figures, les résultats issus des calculs par DF6 et DF18 ont été ajoutés pour la comparaison. La condition initiale est représentée en cyan, les isocontours au temps $t = 10^4 \delta t$ sont représentés en bleu pour le réseau D3Q7, en vert pour le réseau D3Q15, en rouge pour le réseau D3Q19, en noir pour le DF18 et en magenta pour le DF6. On constate que les solutions obtenues par les méthodes LB-D3Q15, D3Q19 et DF18 forment bien des cercles qui se superposent pour les deux plans de coupe, alors que celles obtenues par LB-D3Q7 et DF6 s'en écartent comme le montrent plus précisément les profils recueillis le long des directions $(1, 0, 0)$ et $(1, 1, 0)$ (figure 9).

Cette différence de valeurs des rayons selon différentes directions est qualifiée d'« anisotropie de grille » (ou du maillage). Celle-ci est qualifiée en introduisant un coefficient \mathcal{A}_g défini en 3D par [22] :

$$\mathcal{A}_g = \left| \frac{R_{100} - R_{110}}{R_{100} + R_{110}} \right|,$$

où R_{100} est le rayon mesuré le long de l'axe x dans la direction $\mathbf{n}_1 = (1, 0, 0)$ et R_{110} est le rayon mesuré à 45° entre l'axe des x et l'axe des y dans la direction $\mathbf{n}_2 = (1, 1, 0)$. Pour les réseaux D3Q15 et D3Q19 cette valeur de \mathcal{A}_g est très inférieure au pourcent puisqu'elle est de 0,073% pour le réseau D3Q15 et de 0,116% pour le D3Q19 alors qu'elle s'élève à 3,095% pour le réseau D3Q7. Pour les deux schémas aux différences finies, l'anisotropie de grille vaut 4,365% pour le DF6 et 0,575% pour le DF18.

Le choix du réseau D3Q15 ou D3Q19 améliore donc nettement la précision des résultats en comparaison à ceux obtenus avec le réseau D3Q7. En contrepartie cette précision a un coût car, pour les 10^4 itérations, le temps

FIG. 5: Validation de la méthode LB avec la méthode des différences finies à 6 et 18 points voisins sur un maillage composé de $301 \times 301 \times 11$ nœuds. À gauche : coupe dans le plan de normale $(0, 0, 1)$ des isovaleurs $\phi = 0$. À droite : profils parallèles à la direction $(1, 0, 0)$ du champ de phase. L'origine correspond au point de coordonnées $(150, 150, 150)$. Seule la zone interfaciale a été représentée.

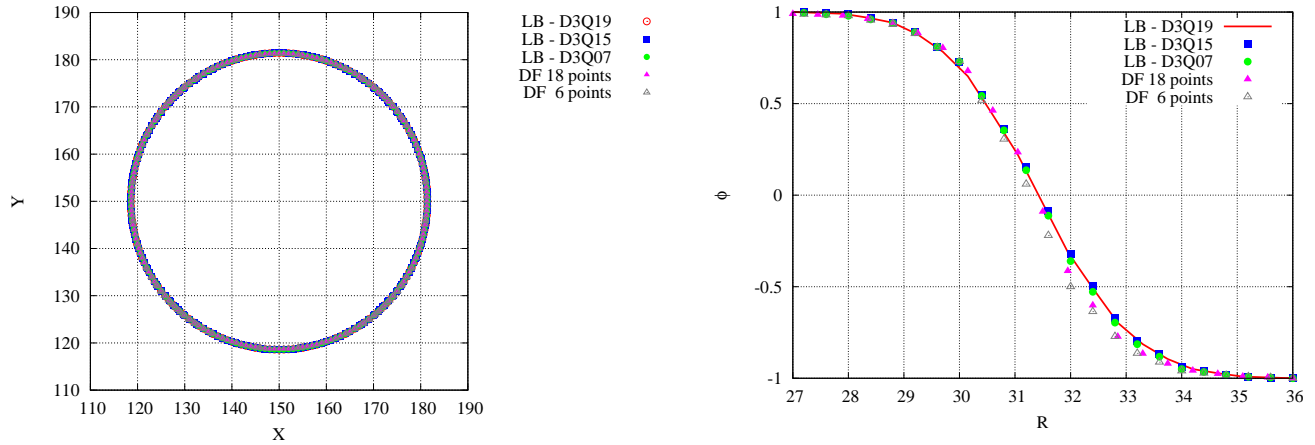
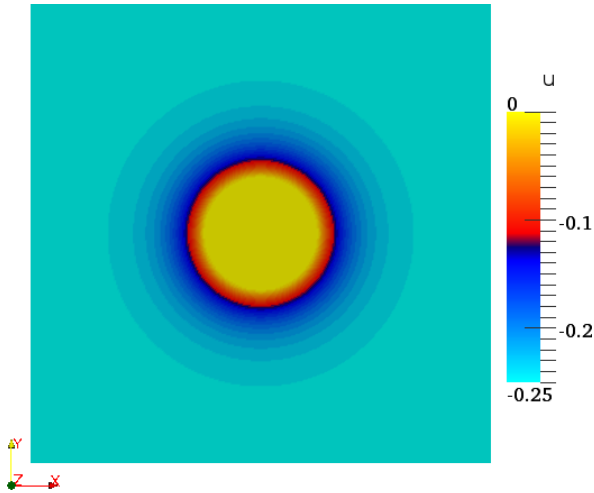


FIG. 6: Champ de température. Coupe dans le plan de normale $(0, 0, 1)$ passant par le point de coordonnées $(150, 150, 150)$.



fectuent les opérations les plus coûteuses de l'algorithme (mis en évidence par *valgrind*), c'est-à-dire l'étape du calcul de la fonction à l'équilibre et celle du calcul de la collision.

3. Validations dans le cas anisotrope

Sur la base de ces résultats, on ne conserve dans la suite de cette section IV que les schémas LB-D3Q15, LB-D3Q19 et DF18 pour la réalisation des simulations comparatives dans le cas anisotrope. De plus, dans toutes les simulations qui ont été réalisées, aucune différence significative n'a été trouvée entre les méthodes LB-D3Q15 et LB-D3Q19. Par conséquent, seuls les résultats issus des méthodes LB-D3Q15 et DF18 sont présentés. Le choix du réseau D3Q15 plutôt que du réseau D3Q19 s'explique par un (léger) gain en temps calcul lié à un nombre de composantes N_{pop} plus petit.

La méthode DF dans le cas anisotrope est reprise de [1] :

$$\phi_{i,j,l}^{n+1} = \phi_{i,j,l}^n + \left\{ W_0^2 \nabla^2 \phi^n + W_0^2 \nabla \cdot [(a_s^2(\mathbf{n}) - 1) \nabla \phi^n] + W_0^2 \nabla \cdot \tilde{\mathcal{N}}^n + Q_{i,j,l}^n \right\} \frac{\delta t}{\tau(\mathbf{n})}$$

où on a ajouté et soustrait le terme $W_0^2 \nabla^2 \phi^n$ dans le membre de droite de l'équation du champ de phase. Comme dans cette référence, le premier terme du membre

de calcul passe de 25h pour le réseau D3Q7 à 45h pour le réseau D3Q15 et à 52h pour le réseau D3Q19. Les temps de calcul correspondent aux temps CPU pour une version non parallèle du code exécuté en « batch » sur le serveur de calcul **Eris** du STMF. Cette augmentation du temps calcul est liée à l'augmentation du nombre de composantes $k = 0, \dots, N_{pop}$ qui est plus grand pour les réseaux D3Q15 et D3Q19. Cette augmentation a un impact direct sur les temps de calcul des *subroutines* dans lesquelles s'ef-


		Note Technique DEN	Page 21/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

FIG. 7: Isosurfaces $\phi = 0$ du champ de phase en $t = 10^4 \delta t$ pour le réseau D3Q7 (gauche), le réseau D3Q15 (centre) et le réseau D3Q19 (droite). La forme sphérique n'est pas conservée pour le réseau D3Q7.

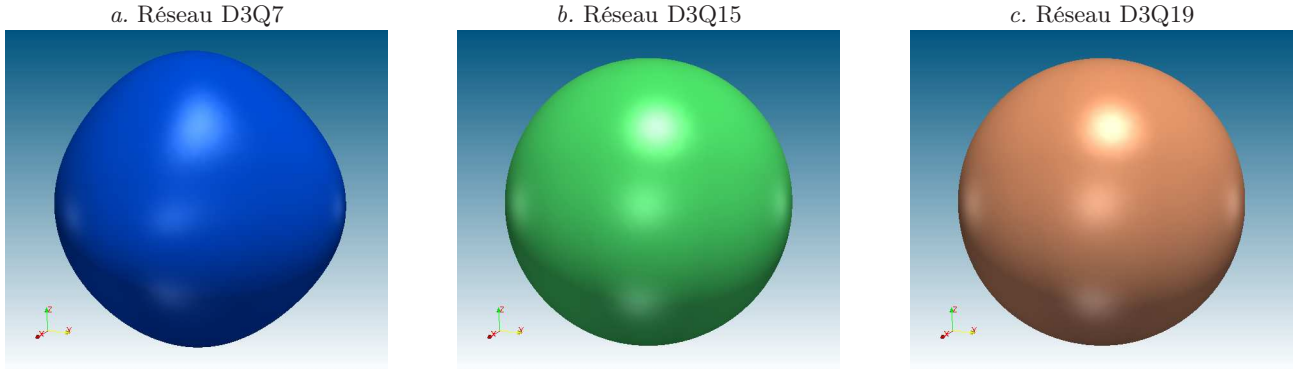
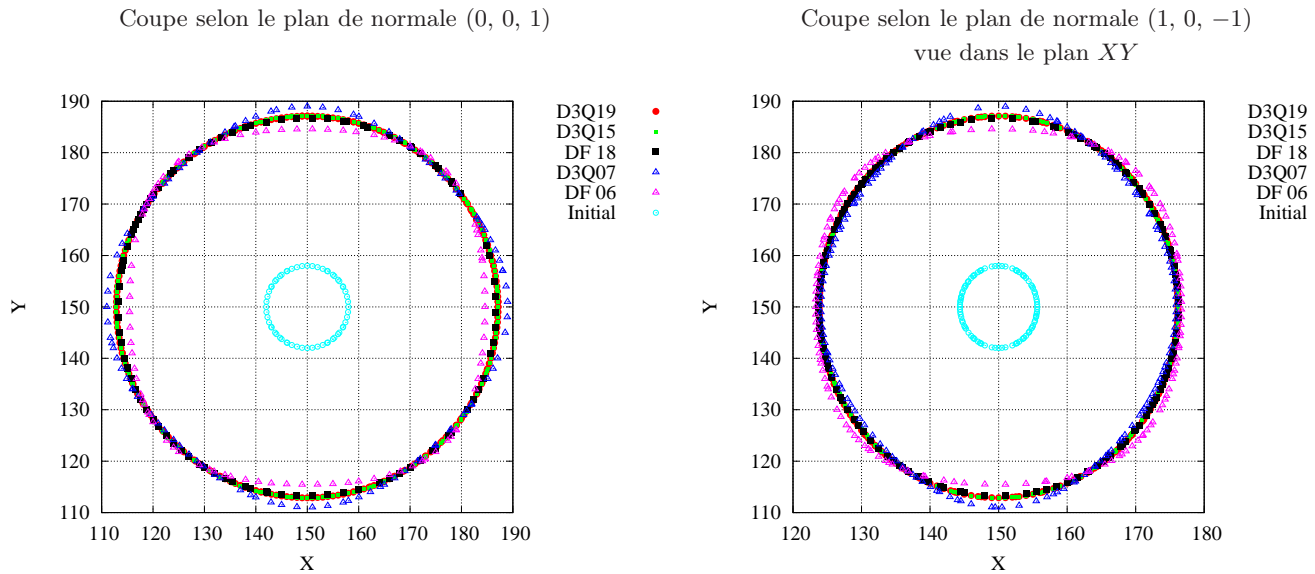


FIG. 8: Coupes des isovaleurs $\phi = 0$ du champ de phase selon deux plans passant par le point (150, 150, 150). La condition initiale est représentée en cyan et les solutions LB en bleu (D3Q7), en vert (D3Q15) et en rouge (D3Q19) au temps $t = 10^4 \delta t$. Les solutions en Différences Finies sont représentées en noir (DF18) et en magenta (DF6) au même temps. Les isovaleurs issues des schémas LB-D3Q15, LB-D3Q19 et DF18 forment bien des cercles qui se superposent, ce qui n'est pas le cas pour les schémas LB-D3Q7 et DF6.

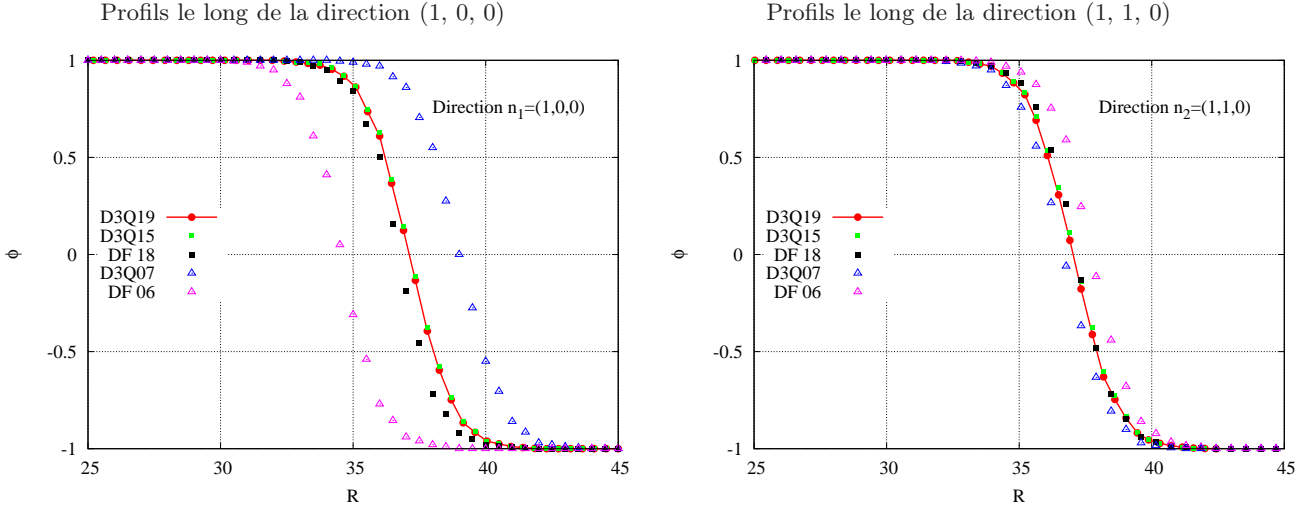


de gauche est discrétisé par la formule à 18 points (38), le second par la formule à 6 points en tenant compte de la variation du facteur $\mathcal{D} \equiv a_s^2(\mathbf{n}) - 1$ à chaque pas de temps de la façon suivante :

$$\partial_x(\mathcal{D}\partial_x\phi) \simeq \frac{1}{\delta x^2} \left[\mathcal{D}_{i+1/2,j,l}^n (\phi_{i+1,j,l}^n - \phi_{i,j,l}^n) - \mathcal{D}_{i-1/2,j,l}^n (\phi_{i,j,l}^n - \phi_{i-1,j,l}^n) \right],$$

avec $\mathcal{D}_{i+1/2,j,l} = (\mathcal{D}_{i+1,j,l} + \mathcal{D}_{i,j,l})/2$ et $\mathcal{D}_{i-1/2,j,l} = (\mathcal{D}_{i,j,l} + \mathcal{D}_{i-1,j,l})/2$. Les trois dérivées du troisième terme sont discrétisés par une méthode de DF centrée.

FIG. 9: Profils du champ de phase selon les directions $\mathbf{n}_1 = (1, 0, 0)$ (à gauche) et $\mathbf{n}_2 = (1, 1, 0)$ (à droite). Les courbes issues des schémas LB-D3Q15, LB-D3Q19 et DF18 se superposent bien pour les deux directions contrairement aux schémas LB-D3Q7 et DF6.



Des résultats de simulations comparatives réalisées en quasi-2D sont présentés sur la figure 10. Le graphe de gauche présente l'évolution du contour $\phi = 0$ du champ de phase aux temps $t = 10^3\delta t$, $3 \times 10^3\delta t$ et $5 \times 10^3\delta t$ (avec $\delta t = 1,5 \times 10^{-5}$) pour une condition initiale de rayon $R_s = 8$ u.r. Celui de droite représente les contours aux mêmes temps pour $R_s = 16$ u.r. Sur ces figures, les résultats obtenus par DF18 sont présentés en symboles noirs et ceux obtenus par LB-D3Q15 en symboles verts tandis que la condition initiale est représentée en cyan.

La superposition des points verts et noirs de cette figure 10 valide les étapes suivantes de la méthode LB : (i) prise en compte du terme $\nabla \cdot \vec{N}$ dans la fonction de distribution à l'équilibre, (ii) prise en compte du coefficient cinétique $\tau(\mathbf{n})$ par la modification l'étape de collision, et enfin (iii) la mise à jour du temps de relaxation $\zeta_\phi(\mathbf{x}, t)$ à chaque pas de temps du calcul.

V. SIMULATIONS DE SENSIBILITÉ AUX PARAMÈTRES

On présente dans cette section quelques résultats de simulations de sensibilité aux paramètres du modèle. Pour les résultats présentés ici, seule la méthode LB-D3Q15 est utilisée pour l'équation du champ de phase, associée à la méthode LB sur un réseau D3Q7 pour l'équation de la température. Parmi les nombreuses simulations qui ont été réalisées durant cette étude, on a choisi de montrer les effets du sous-refroidissement $\Delta = -u_0$, de la diffu-

sivité thermique κ , et de l'intensité de l'anisotropie de surface ε_s . Dans toutes les simulations qui suivent le pas de temps est fixé égal à $\delta t = 1,5 \times 10^{-5}$.

Sensibilité à la température initiale u_0

Dans ces premières simulations de sensibilité, on choisit un rayon de la sphère diffuse initiale égal à $R_s = 8$ u.r. La fonction d'anisotropie cinétique est prise de la forme $\tau = \tau_1$ (Éq. (6)) avec un coefficient d'anisotropie de surface égal à $\varepsilon_s = 0,05$. Les autres valeurs des paramètres sont $\lambda = 10$ et $\kappa = 0,7$. La figure 11 présente une comparaison des résultats de trois simulations réalisées en faisant varier la valeur du sous-refroidissement initial pour $u_0 = -0,20$ (Fig. 11a), $u_0 = -0,25$ (Fig. 11b) et $u_0 = -0,30$ (Fig. 11c). Les figures présentent l'isosurface du champ de phase $\phi = 0$ au temps $t = 5000\delta t$. On constate que plus la température initiale est inférieure à la température de fusion, plus la croissance de la structure cristalline est rapide.

On abaisse maintenant le sous-refroidissement à $u_0 = -0,32$ et on choisit la seconde forme de l'anisotropie cinétique $\tau = \tau_2$ dans l'Éq. (6). Pour cette fonction, on choisit une anisotropie de surface égale à $\varepsilon_s = 0,018$, une anisotropie cinétique égale à $\varepsilon_c = 0,1$, un facteur d'échelle en temps $\tau_0 = 10^{-4}$ et un coefficient $A = 0,1$. Le rayon de la sphère initiale est inchangé ($R_s = 8$ u.r.) au même titre que la diffusivité thermique ($\kappa = 0,7$) et on augmente la valeur du coefficient de couplage à $\lambda = 30$. La figure 12

FIG. 10: Contours $\phi = 0$ à $t = 10^3 \delta t$, $t = 3 \times 10^3 \delta t$ et $t = 5 \times 10^3 \delta t$ pour le champ de phase calculé par LBM-D3Q15 (symboles verts) et DF18 (symboles noirs). À gauche le rayon initial vaut $R_s = 8$ u.r. et à droite $R_s = 16$ u.r. Coupe dans le plan de normale $(0, 0, 1)$.

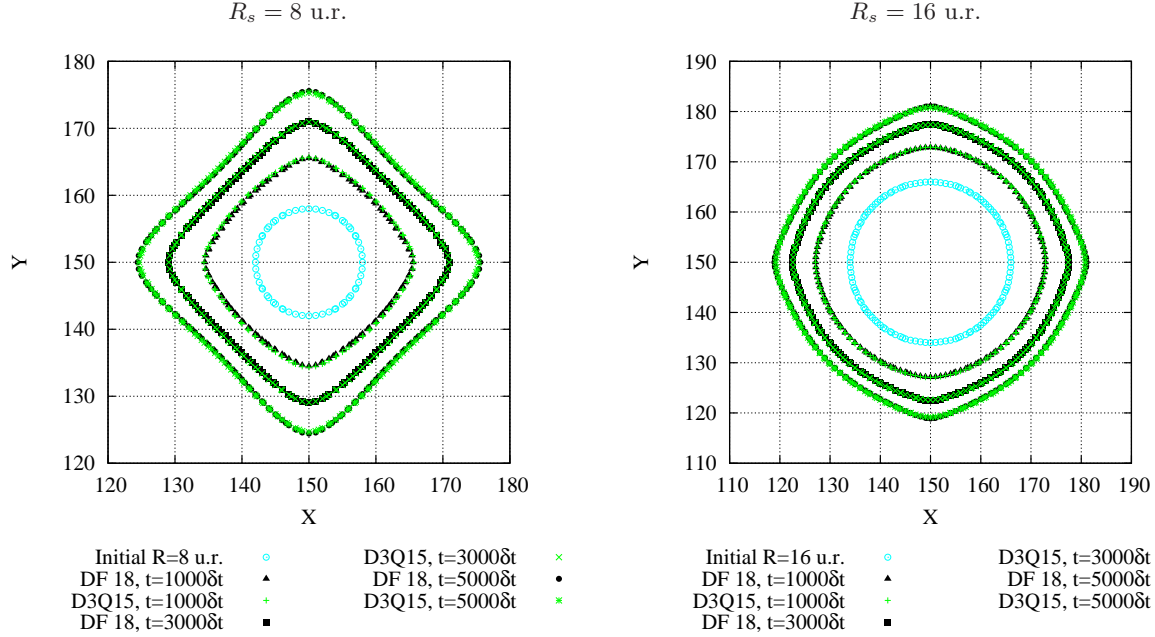
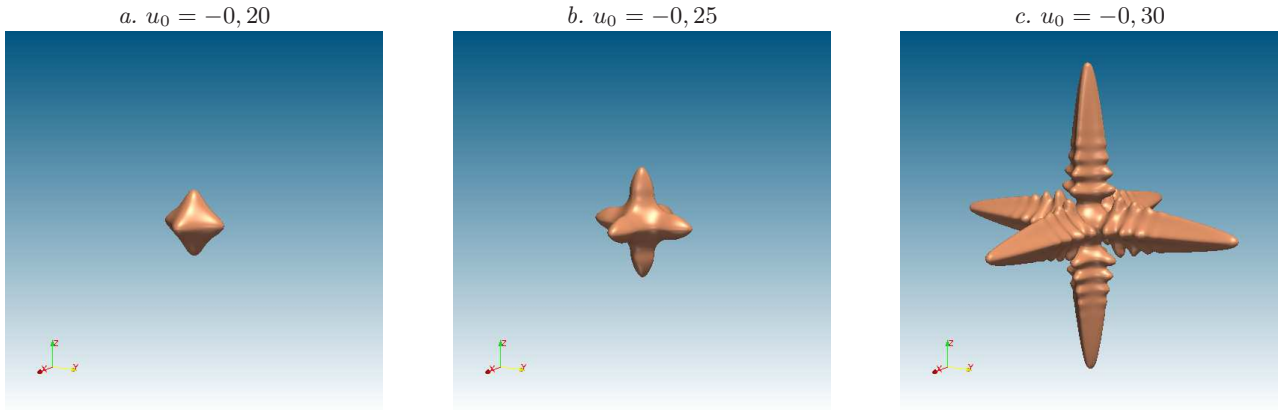



FIG. 11: Sensibilité à l'écart de température initiale u_0 . Contour du champ de phase $\phi = 0$ à $t = 5000\delta t$ avec $R_s = 8$ u.r. pour trois valeurs différentes de u_0 . $\lambda = 10$; $(\tilde{E}q. (6))\tau = \tau_1$; $\varepsilon_s = 0,05$; $\kappa = 0,7$.



présente l'évolution du contour du champ de phase $\phi = 0$ du temps initial $t = 0$ jusqu'au temps final $t = 5000\delta t$. On constate de petites branches secondaires, déjà visibles sur la figure 11c, se sont développées plus rapidement perpendiculairement aux directions principales de croissance. La figure 13 présente quant à elle les champs de phase et de température au temps $t = 5000\delta t$. Les coupes

sont réalisées selon un plan de normale $(1, 0, 0)$ passant par le point $(150, 150, 150)$. Sur la figure 13a, la zone en rouge est la partie solide ($\phi = 1$), la zone en bleue la partie liquide ($\phi = -1$) et la zone interfaciale diffuse est représentée par le dégradé de couleur. Sur la figure 13b, la zone en jaune signifie que la température est égale à la température de fusion (c'est-à-dire $u = 0$) et la zone

		Note Technique DEN	Page 24/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
	Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D		

colorée en cyan signifie que la température est celle du sous-refroidissement initial u_0 .

Sensibilité à la diffusivité thermique κ et à l'anisotropie de surface ε_s

On conserve les valeurs de la dernière simulation identiques et on réalise deux simulations en abaissant la diffusivité thermique de la valeur $\kappa = 0,7$ à $\kappa = 0,6$ puis à $\kappa = 0,5$. Les résultats sont présentés sur la figure 14 sur laquelle on constate que l'augmentation de ce coefficient de diffusivité thermique a pour effet d'augmenter la vitesse de croissance de la structure cristalline. La superposition des contours de la figure 15 le montre plus précisément. Sur cette figure, les isovalues $\phi = 0$ pour $\kappa = 0,7$ sont représentées en bleu, celles pour $\kappa = 0,6$ sont symbolisées en vert et celles pour $\kappa = 0,5$ en rouge.

Enfin, on reprend toutes les valeurs numériques de la figure 12 et on augmente l'anisotropie de surface de la valeur $\varepsilon_s = 0,018$ à $\varepsilon_s = 0,03$ puis à $\varepsilon_s = 0,04$. Les résultats des isovalues sont présentés sur la figure 16 au temps $t = 3000\delta t$. Comme attendu, une augmentation de ce paramètre a pour effet d'augmenter la vitesse de croissance des branches principales et des branches secondaires.

VI. CONCLUSION - PERSPECTIVES

Dans ce rapport, une méthode de Boltzmann sur réseau a été développée pour la simulation du modèle à champ de phase avec limite à interface fine. Ce modèle est bien adapté à la simulation de la croissance cristalline d'une substance pure. Les simulations comparatives avec deux schémas aux différences finies ont permis de valider la méthode proposée. Des simulations comparatives dans le cas isotrope ont ensuite montré la nécessité d'utiliser des réseaux D3Q15 ou D3Q19 plutôt qu'un réseau D3Q7 pour réduire les effets d'anisotropie dus à la grille. Plusieurs simulations de sensibilité aux paramètres du modèle ont ensuite été réalisées qui ont montré leur impact sur la structure cristalline obtenue.

Les perspectives de ce travail sont l'étude de l'effet des écoulements sur la croissance (couplage des équations de Navier-Stokes avec le modèle à champ de phase). Cette thématique a déjà été initiée et des résultats préliminaires ont été présentés dans [5]. Dans la continuité, il s'agira d'appliquer ce modèle sur les données expérimentales du LDMC [27]. Enfin, la modélisation et la simulation de la croissance cristalline pour les mélanges binaires est en

cours dans la thèse d'A. Younsi (début de thèse novembre 2012).

Annexe A: Liste des paramètres du modèle

Cette annexe donne quelques précisions sur les données expérimentales qui sont nécessaires pour l'application du modèle à champ de phase. La liste des paramètres est présentée dans le tableau V qui est repris de [22]. Les valeurs numériques sont représentatives du nickel. Comme on l'a dit dans la section IIB, certaines valeurs de ce tableau ne sont pas des données mesurées expérimentalement mais proviennent de simulations de dynamique moléculaire. On se référera aux références bibliographiques indiquées dans [22] pour connaître l'origine de chaque valeurs numériques de ce tableau.

La donnée de ces paramètres permet ensuite de déduire les valeurs du tableau VI utiles pour le modèle à champ de phase. Ce tableau indique également les relations mathématiques qui permettent de les calculer.

Annexe B: Développements de Chapman-Enskog de l'équation du champ de phase

Dans cette annexe, on décrit les étapes du développements de Chapman-Enskog pour la méthode de Boltzmann décrite dans la section III. La présentation dans la section III s'est faite sur une analogie avec le schéma classique de l'équation du transport. Dans cette annexe, on effectue la démonstration de façon plus formelle. Les développements de Chapman-Enskog ne sont réalisés que sur l'équation du champ de phase. Pour l'équation de la température, la démarche reste identique.

Les calculs sont regroupés en deux parties distinctes. L'objectif de la première partie est d'appliquer les développements de Taylor et les développements asymptotiques sur le schéma numérique (17) afin de retrouver l'équation continue à laquelle obéissent les moments de la fonction de distribution à l'équilibre $g_k^{(0)}$. L'objectif de la seconde partie est d'établir la forme précise de cette fonction $g_k^{(0)}$, étant connues les moments de cette fonction.


		Note Technique DEN	Page 25/30
		Réf : STMF/LATF/NT/13-008	
		Date : 15/3/2013	Indice : A
Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D			

FIG. 12: Évolution du contour $\phi = 0$ du champ de phase en différents temps. $u_0 = -0,32$; $R_s = 8$ u.r.; $\lambda = 30$; $\tau = \tau_2$; $\varepsilon_s = 0,018$; $\varepsilon_c = 0,13$; $A = 0,1$; $\kappa = 0,7$.

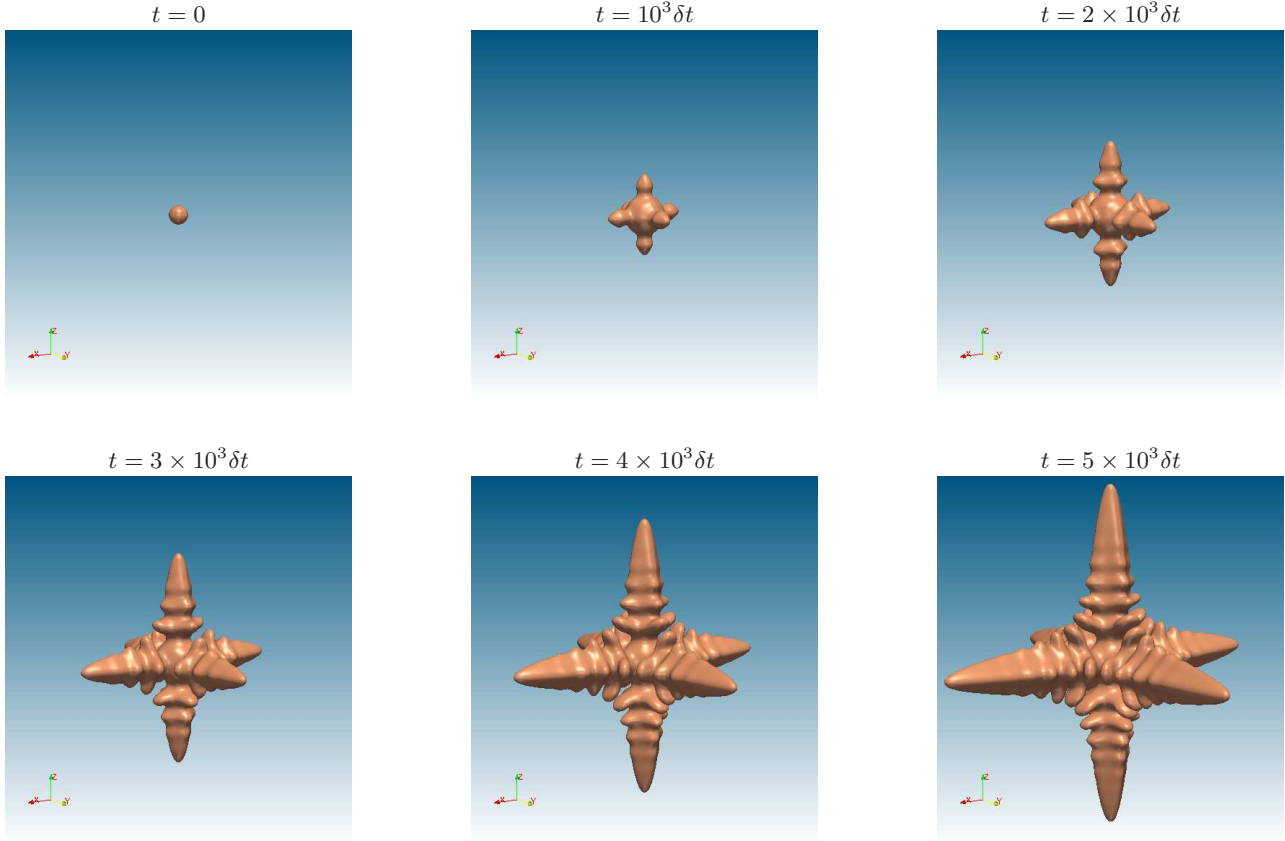


FIG. 13: Champ de phase ϕ (gauche) et champ de température adimensionnée u (droite) au temps $t = 5000\delta t$. Coupes selon le plan de normale $(1, 0, 0)$ passant par le point $(150, 150, 150)$. $u_0 = -0,32$; $R_s = 8$ u.r.; $\lambda = 30$; $\tau = \tau_2$; $\varepsilon_s = 0,018$; $\varepsilon_c = 0,13$; $A = 0,1$; $\kappa = 0,7$.

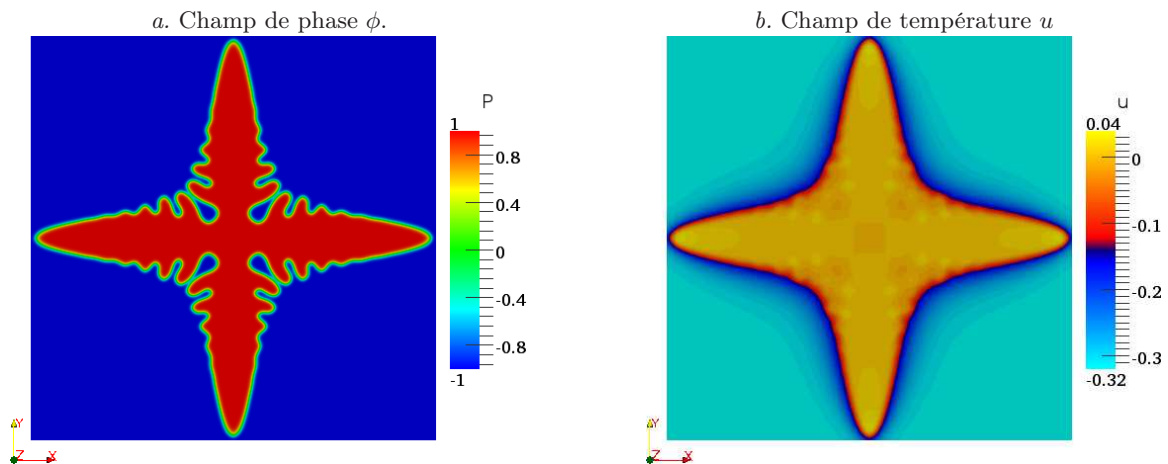
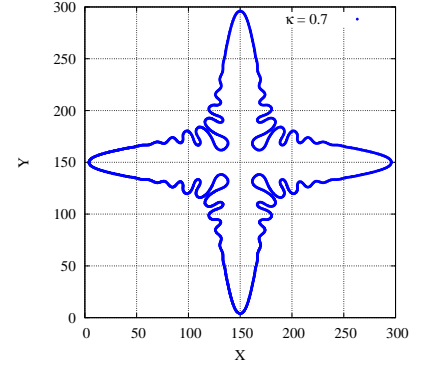
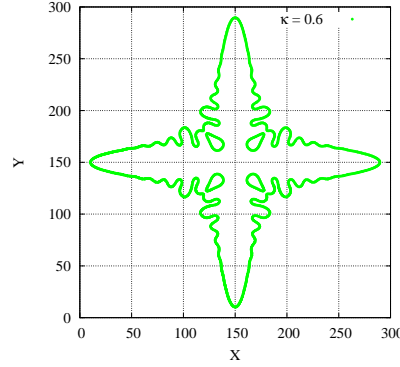
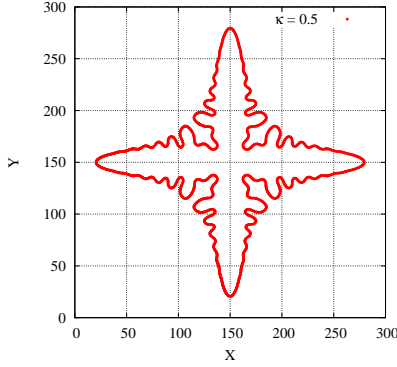


FIG. 14: Sensibilité à la diffusivité thermique κ . Contours du champ de phase $\phi = 0$ à $t = 5000\delta t$. Coupe selon le plan de normale $(1, 0, 0)$ passant par le point $(150, 150, 150)$. $u_0 = -0,32$; $R_s = 8$ u.r. $\lambda = 30$; $\tau = \tau_2$; $\varepsilon_s = 0,018$; $\varepsilon_c = 0,1$. $A = 0,1$.

a. $\kappa = 0,5$

b. $\kappa = 0,6$

c. $\kappa = 0,7$



TAB. V: Liste des paramètres expérimentaux nécessaires au modèle à champ de phase (repris de [22]).

Paramètre	Symbole	Dimension	Données 1	Données 2
Température de fusion	T_m	[K]	1728	1726
Chaleur latente	$\Delta H = L$	[J/m ³]	$8,113 \times 10^9$	$2,311 \times 10^9$
Chaleur spécifique	C_v	[J/(m ³ K)]	$1,939 \times 10^7$	$5,313 \times 10^6$
Diffusivité thermique	κ	[m ² /s]	$1,2 \times 10^{-5}$	10^{-5}
Énergie libre interfaciale	σ_0	[J/m ²]	0,326	0,326
Intensité de l'énergie interfaciale	ε_s	[—]	0,018	0,018
Croiss. cinétique dans la dir. cristallo. $\langle 100 \rangle$	μ_{100}	[m/(sK)]	0,52	0,52
Croiss. cinétique dans la dir. cristallo. $\langle 110 \rangle$	μ_{110}	[m/(sK)]	0,4	0,4

1. Développements de Taylor et développements asymptotiques

a. Développements de Taylor

Pour plus de concision, les dépendances en \mathbf{x} et t sont omises pour les fonctions g_k , ζ_ϕ et Q . De même, la dépendance de τ avec \mathbf{n} est implicite. On rappelle que l'équation cinétique du champ de phase s'écrit :

$$\tau g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t + \delta t) = g_k - (1 - \tau)g_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k \delta x, t) - \frac{1}{\zeta_\phi} \left[g_k - g_k^{(0)} \right] + w_k Q \delta t \quad (\text{B1})$$

Le développement de Taylor à l'ordre 2 en espace et 1 en temps (il est possible de faire le développement à l'ordre 2 en temps) donne :

$$\tau \left[g_k + \delta x \mathbf{e}_k \cdot \nabla g_k + \frac{\delta x^2}{2} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k : \nabla \nabla g_k + \delta t \partial_t g_k \right] = g_k + (\tau - 1) \left[g_k + \delta x \mathbf{e}_k \cdot \nabla g_k + \frac{\delta x^2}{2} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k : \nabla \nabla g_k \right] + w_k Q \delta t - \frac{1}{\zeta_\phi} \left[g_k - g_k^{(0)} \right] \quad (\text{B2})$$

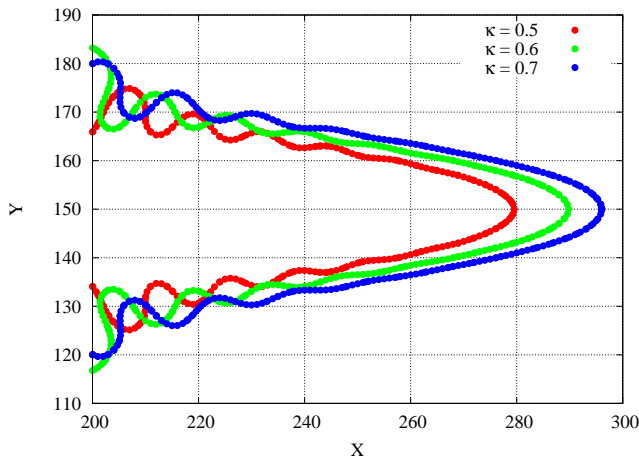
Ce qui donne en simplifiant :

$$\tau \delta t \partial_t g_k + \delta x \mathbf{e}_k \cdot \nabla g_k + \frac{\delta x^2}{2} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k : \nabla \nabla g_k = -\frac{1}{\zeta_\phi} \left[g_k - g_k^{(0)} \right] + w_k Q \delta t. \quad (\text{B3})$$

TAB. VI: Liste des paramètres déduits du tableau V (repris de [22]).

Paramètre	Symbole	Dimension	Relation	Données 1	Données 2
Température adiabatique	T_Q	[K]	$\delta H/C_v$	418	435
Longueur capillaire	d_0	[m]	$\frac{\sigma_0 T_m}{T_Q \delta H}$	1.659×10^{-10}	$5,56 \times 10^{-10}$
Coefficient cinétique moyen	β_0	[s/m]	$\frac{\mu_{100}^{-1} + \mu_{110}^{-1}}{2T_Q}$	$5,3 \times 10^{-3}$	$5,084 \times 10^{-3}$
Intensité de l'anisotropie cinétique	ε_c	[—]	$\frac{\mu_{100} - \mu_{110}}{\mu_{100} + \mu_{110}}$	0,13	0,13

FIG. 15: Superposition des isovaleurs $\phi = 0$ pour les trois valeurs de diffusivité thermique $\kappa = 0,5$; $\kappa = 0,6$ et $\kappa = 0,7$ au temps $t = 5000\delta t$.



On introduit un petit paramètre ϵ ainsi que l'échelle spatiale $\mathbf{x}_1 = \epsilon \mathbf{x}$ et les deux échelles de temps $t_1 = \epsilon t$ et $t_2 = \epsilon^2 t$. Dans les développements classiques de Chapman-Enskog, ce petit paramètre est interprété comme le nombre de Knudsen. Ici ce paramètre est relié au pas de discrétisation δx : $\epsilon = \delta x/L$ où L est une dimension caractéristique du système. L'échelle de temps t_1 est caractéristique de la convection et le temps t_2 est caractéristique de la diffusion.

Avec ces nouvelles notations, les dérivées s'expriment par :

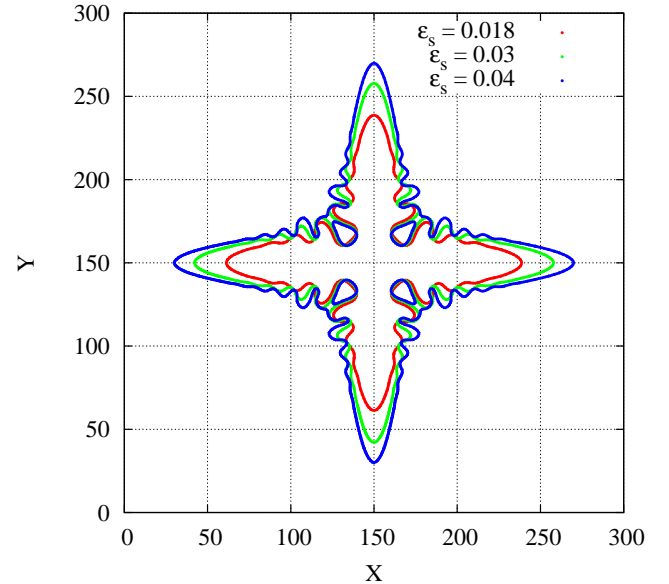
$$\nabla \equiv \partial_x = \frac{\partial x_1}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x_1} = \epsilon \partial_{x_1} \equiv \epsilon \nabla_1, \quad (\text{B4})$$

$$\partial_t = \frac{\partial t_1}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial t_2}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_2} = \epsilon \partial_{t_1} + \epsilon^2 \partial_{t_2}. \quad (\text{B5})$$

On développe g_k en puissance de ϵ autour de la fonction à l'équilibre $g_k^{(0)}$:

$$g_k \simeq g_k^{(0)} + \epsilon g_k^{(1)}. \quad (\text{B6})$$

FIG. 16: Superposition des isovaleurs $\phi = 0$ pour les trois valeurs de l'anisotropie de surface : $\varepsilon_s = 0,018$ (rouge), $\varepsilon_s = 0,03$ (vert) et $\varepsilon_s = 0,04$ (bleu) au temps $t = 3000\delta t$. Coupe dans le plan de normale $(1, 0, 0)$ passant par le point $(150, 150, 150)$.



La grandeur macroscopique représentative de la fonction g_k est le champ de phase ϕ : $\sum_k g_k = \phi$ qui doit être invariant au cours de la collision, ce qui signifie que $\sum_k g_k^{(0)} = \phi$, et implique que $\sum_k g_k^{(1)} = 0$.

On remplace (B4), (B5) et (B6) dans (B3) et on regroupe les termes en ϵ puis ceux en ϵ^2 . À signaler que dans (B3), le terme $w_k Q \delta t$ est le seul terme d'ordre ϵ^0 et son moment d'ordre 0 vaut $\sum_k w_k Q \delta t$. Ce terme interviendra lors du regroupement de tous les termes d'ordre ϵ^0 , ϵ^1 et ϵ^2 .



b. Moments de l'équation d'ordre ϵ

Le regroupement de tous les termes d'ordre ϵ donne l'équation suivante :

$$\delta x \nabla_1 \cdot (g_k^{(0)} \mathbf{e}_k) + \tau \delta t \partial_{t_1} g_k^{(0)} = -\frac{1}{\zeta_\phi} g_k^{(1)} \quad (\text{B7})$$

Le moment d'ordre 0 (somme sur k) de cette équation donne :

$$\frac{\delta x}{\delta t} \nabla_1 \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \right) + \tau \partial_{t_1} \sum_k g_k^{(0)} = 0, \quad (\text{B8})$$

Le moment d'ordre 1 de l'équation (B7) (on multiplie par \mathbf{e}_k et on somme sur k) donne :

$$\delta x \nabla_1 \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right) + \tau \delta t \partial_{t_1} \sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k = -\frac{1}{\zeta_\phi} \sum_k g_k^{(1)} \mathbf{e}_k. \quad (\text{B9})$$

À ce stade, on suppose, comme dans la majorité des approximations BGK pour la résolution du transport, que le second terme du membre de gauche $\delta t \partial_{t_1} \sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k$ est négligeable. Le moment d'ordre 1 de l'équation en ϵ donne la relation :

$$\sum_k g_k^{(1)} \mathbf{e}_k \simeq -\zeta_\phi \delta x \nabla_1 \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right). \quad (\text{B10})$$

L'hypothèse que le terme $\delta t \partial_{t_1} \sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k$ est négligeable peut être levée de deux façons différentes. La première consiste à conserver la collision BGK et de modifier l'étape de collision en ajoutant un terme supplémentaire qui dépend d'un paramètre. Un choix approprié de ce paramètre permet ensuite d'annuler formellement ce terme (voir [37]). La seconde méthode consiste à abandonner la collision BGK et à passer à une collision de type double temps de relaxation (Two-Relaxation Time - TRT) et de pousser l'analyse au troisième ordre en ϵ (voir [30]). Dans le même ordre d'idée, il est possible de considérer une collision à multiple temps de relaxation (Multiple Relaxation Time - MRT) [16, 36].

c. Moment de l'équation d'ordre ϵ^2 et regroupement des termes d'ordre ϵ^0 , ϵ^1 et ϵ^2

Le regroupement des termes en ϵ^2 donne l'équation suivante :

$$\delta x \nabla_1 \cdot (g_k^{(1)} \mathbf{e}_k) + \tau \delta t \partial_{t_1} g_k^{(1)} + \tau \delta t \partial_{t_2} g_k^{(0)} + \frac{\delta x^2}{2} \nabla_1 \nabla_1 : g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k = 0. \quad (\text{B11})$$

Le calcul du moment d'ordre 0 de cette équation donne (en utilisant la relation (B10)) :

$$\tau \delta t \partial_{t_2} \left(\sum_k g_k^{(0)} \right) = \nabla_1 \cdot \left[\zeta_\phi \delta x^2 \nabla_1 \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right) \right] - \frac{\delta x^2}{2} \nabla_1 \nabla_1 : \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right) \quad (\text{B12})$$

ou encore, en regroupant les deux termes du membre de droite :

$$\tau \partial_{t_2} \left(\sum_k g_k^{(0)} \right) = \nabla_1 \cdot \left[\left(\zeta_\phi - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta x^2}{\delta t} \nabla_1 \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right) \right] \quad (\text{B13})$$

En effectuant $\epsilon^0 \times \sum_k w_k Q + \epsilon^1 \times \text{Eq (B8)} + \epsilon^2 \times \text{Eq (B13)}$, on obtient finalement :

$$\tau \partial_t \left(\sum_k g_k^{(0)} \right) = \nabla \cdot \left[\left(\zeta_\phi - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta x^2}{\delta t} \nabla \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right) \right] - \frac{\delta x}{\delta t} \nabla \cdot \left(\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \right) + \sum_k w_k Q. \quad (\text{B14})$$

L'équation (B14) est l'équation aux dérivées partielles continue à laquelle obéissent les moments d'ordre 0, 1 et 2 de la fonction à l'équilibre $g_k^{(0)}$.

2. Choix du réseau et définition de la fonction de distribution à l'équilibre $g_k^{(0)}$

La comparaison de l'équation (B14) avec celle du champ de phase (1) montre que la fonction de distribution à l'équilibre doit être définie telle que ses moments d'ordre 0, 1 et 2 soient égaux à :

$$\sum_k g_k^{(0)} = \phi, \quad (B15)$$

$$\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k = -\vec{\mathcal{N}} \frac{\delta t}{\delta x}, \quad (B16)$$

$$\sum_k g_k^{(0)} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k = e^2 \vec{\mathbf{I}} \phi, \quad (B17)$$

où $\vec{\mathbf{I}}$ est le tenseur identité. On définit les vitesses \mathbf{e}_k selon le réseau D3Q7 comme défini dans la section III. Dans cette annexe, les calculs des poids et du coefficient e^2 sont menés avec ce réseau, mais la généralisation aux réseaux D3Q15 et D3Q19 suit la même logique.

En accord avec les relations (B15)-(B17), on choisit la fonction de distribution à l'équilibre est de la forme :

$$g_k^{(0)} = w_k \phi + B_k \mathbf{e}_k \cdot \vec{\mathcal{N}} \frac{\delta t}{\delta x}, \quad (B18)$$

où on cherche les coefficients w_k et B_k associés au réseau D3Q7. Le moment d'ordre 0 de l'Éq. (B18) donne la première égalité suivante (le second terme du membre de droite s'annule) :

$$\sum_k w_k = 1. \quad (B19)$$

Son moment d'ordre 1 donne :

$$\sum_k w_k \phi \mathbf{e}_k + \sum_k B_k (\mathbf{e}_k \cdot \vec{\mathcal{N}} \frac{\delta t}{\delta x}) \mathbf{e}_k = -\vec{\mathcal{N}} \frac{\delta t}{\delta x} \quad (B20)$$

La première somme du membre de gauche doit s'annuler, ce qui donne $w_1 = w_3$, $w_2 = w_4$ et $w_5 = w_6$. Une solution possible qui satisfait (B19) et (B20) est de poser $w_0 = 1/4$ et $w_{k=1,...,6} = 1/8$. Pour B_k , en égalisant les composantes de chaque côté de l'égalité (B20), on obtient : $(B_1 + B_3)\mathcal{N}_x = -\mathcal{N}_x$, $(B_2 + B_4)\mathcal{N}_y = -\mathcal{N}_y$, $(B_5 + B_6)\mathcal{N}_z = -\mathcal{N}_z$. On en déduit que $B_{k=1,...,6} = -1/2$.

Enfin, en utilisant les valeurs des poids w_k , le calcul du moment d'ordre 2 de l'Éq. (B18) donne :

$$\sum_k w_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k = \frac{1}{4} \phi \vec{\mathbf{I}}. \quad (B21)$$

On pose $e^2 = 1/4$. Finalement en choisissant $g_k^{(0)}$ de la forme :

$$g_k^{(0)} = w_k \left(\phi - \frac{1}{e^2} \mathbf{e}_k \cdot \vec{\mathcal{N}} \frac{\delta t}{\delta x} \right) \quad (B22)$$

où on a posé $\frac{B_k}{w_k} = \frac{1}{e^2}$ (pour $k = 1, \dots, 6$), on obtient :

$$\tau \partial_t \phi = \nabla \cdot \left[e^2 \left(\zeta_\phi - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta x^2}{\delta t} \nabla \phi \right] + \nabla \cdot \vec{\mathcal{N}} + Q. \quad (B23)$$

Enfin, on identifie le terme $e^2 (\zeta_\phi - \frac{1}{2}) \frac{\delta x^2}{\delta t}$ à $W_0^2 a_s^2$:

$$W_0^2 a_s^2 = e^2 \left(\zeta_\phi - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta x^2}{\delta t}. \quad (B24)$$

- [1] BRAGARD J., A. KARMA, Y.H. LEE, M. PLAPP, Linking phase-field and atomistic simulations to model dendritic solidification in highly undercooled melts. *Interface Science*, **10**, pp. 121-136, 2002.
- [2] BRENT A.D., V.R. VOLLER, AND K.J. REID, Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change : application to the melting of a pure metal. *Numerical Heat Transfer*, **13**, pp. 297-318, 1988.
- [3] CAGINALP G., Stefan and Hele-Shaw type models as asymptotic limits of the phase-field equations. *Physical Review A*, **39** (11), pp. 5887-5896, 1989.
- [4] CARTALADE A., ET É. RÉGNIER, Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline I : Substance pure. *Rapport CEA*, DEN-DANS-DM2S-STMF-

LATF, RT 12-005/A, 2012.

- [5] CARTALADE A., Simulations de modèles à champ de phase pour la croissance cristalline. Présentation d'avancement du projet SIVIT, septembre 2012.
- [6] CHATTERJEE D., S. CHAKRABORTY, A hybrid lattice Boltzmann model for solid-liquid phase transition in presence of fluid flow, *Physics Letters A*, **351**, pp. 359-367, 2006.
- [7] CHEN C.C., Y.L. TSAI, C.W. LAN, Adaptive phase field simulation of dendritic crystal growth in a forced flow : 2D vs 3D morphologies. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **52**, pp. 1158-1166, 2009.
- [8] DELATTRE O., Etude cinétique de la cristallisation de fontes verrières en présence de gradient thermique et d'agitation : application à la modélisation de l'auto-



- creuset produit lors de la mise en œuvre du procédé creuset froid". *Thèse CEA-Université Orléans* à paraître, 2013.
- [9] EMMERICH, H., *The Diffuse Interface Approach in Materials Science. Thermodynamic Concepts and Applications of Phase-Field Models*. Springer, 2003.
- [10] JACOUTOT, L., Modélisation numérique de phénomènes couplés dans des bains de verre brassés mécaniquement et élaborés en creuset froid inductif. *Thèse INPG*, 2006.
- [11] JEONG J.-H., N. GOLDENFELD, AND J.A. DANTZIG, Phase field model for three-dimensional dendritic growth with fluid flow. *Physical Review E*, **64**, 041602, 2001.
- [12] KARMA A., AND W.-J. RAPPEL, Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics. *Physical review E*, **53** (4), pp. R3017-3020, 1996.
- [13] KARMA A., AND W.-J. RAPPEL, Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions. *Physical Review E*, **57** (4), pp. 4323-4349, 1998.
- [14] KARMA A., AND W.-J. RAPPEL, Phase-field model of dendritic sidebranching with thermal noise. *Physical Review E*, **60** (4), pp. 3614-3625, 1999.
- [15] KOBAYASHI R., Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth. *Physica D*, **63**, pp. 410-423, 1993.
- [16] LALLEMAND P., AND L.-S. LUO, Theory of the lattice Boltzmann method : Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, **61** (6), pp. 6546-6562, 2000.
- [17] LETERRIER N., Cas-tests d'interaction entre le calcinat et la fritte de verre pour la modélisation et la simulation de la couche d'élaboration du creuset froid (ELSIE). Rapport CEA, DEN-DANS-DM2S-STMF-LMSF, RT 12-007/A, 2012.
- [18] LI Y., H.G. LEE, J. KIM, A fast, robust, and accurate operator splitting method for phase-field simulations of crystal growth. *Journal of Crystal Growth*, **321**, pp. 176-182, 2011.
- [19] LU Y., C. BECKERMANN, J.C. RAMIREZ, Three-dimensional phase-field simulations of the effect of convection on free dendritic growth. *Journal of Crystal Growth*, **280**, pp. 320-334, 2005.
- [20] MCFADDEN G.B., A.A. WHEELER, D.M. ANDERSON, Thin interface asymptotics for an energy/entropy approach to phase-field models with unequal conductivities. *Physica D*, **144**, pp. 154-168, 2000.
- [21] MEDVEDEV D., AND K. KASSNER, Lattice Boltzmann scheme for crystal growth in external flows. *Physical Review E*, **72**, 056703, 2005.
- [22] NESTLER B., D. DANILOV, P. GALENKO, Crystal growth of pure substances : Phase-field simulations in comparison with analytical and experimental results. *Journal of Computational Physics*, **207**, pp. 221-239, 2005.
- [23] OHNO M., Quantitative phase-field modeling of nonisothermal solidification in dilute multicomponent alloys with arbitrary diffusivities. *Physical Review E*, **86**, 051603, 2012.
- [24] PONCE DAWSON S., S. CHEN, AND G. D. DOOLEN, Lattice Boltzmann computations for reaction-diffusion equations. *J. Chem. Phys.*, **98** (2), pp. 1514-1523, 1993.
- [25] PROVATAS N., AND K. ELDER, *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*. Wiley-VCH, 2010.
- [26] RASIN I., W. MILLER, S. SUCCI, Phase-field lattice kinetics scheme for the numerical simulation of dendritic growth. *Physical Review E*, **72**, 066705, 2005.
- [27] RÉGNIER É., Rapport à paraître, 2012.
- [28] RIBET I. *et al.*, Projet SIVIT. Note d'orientation de la simulation de la vitrification sur 2010–2020. Rapport CEA, DEN/MAR/DTCD/NT/2010/03. 2010.
- [29] SCHULLER S., A. MONTEIRO, N. LETERRIER, Modèles et méthodes numériques proposés pour la couche d'élaboration du creuset froid (ELSIE). *Rapport CEA*, DEN/DANS/DM2S/SFME/LSET/RT/11-007/A, 2011.
- [30] SERVAN-CAMAS B., F.T.-C. TSAI, Lattice Boltzmann method with two relaxation Times for advection-diffusion equation : third order analysis and stability analysis. *Advances in Water Resources*, **31**, pp. 1113-1126, 2008.
- [31] VOLLER V.R., M. CROSS AND N.C. MARKATOS, An enthalpy method for convection/diffusion phase change. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**, pp. 271-284, 1987.
- [32] WALSH S.D.C., AND M.O. SAAR, Macroscale lattice-Boltzmann methods for low Peclet number solute and heat transport in heterogeneous porous media, *Water Resources Research*, **46**, W07517, pp. 1-15, 2010.
- [33] WARREN J.A. AND W.J. BOETTINGER, Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method. *Acta metall. mater.*, **43** (2), pp. 689-703, 1995.
- [34] WANG S.-L., R.F. SEKERDA, A.A. WHEELER, B.T. MURRAY, S.R. CORIELL, R.J. BRAUN AND G.B. MCFADDEN, Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification, *Physica D*, **69**, pp. 189-200, 1993.
- [35] WHEELER A.A., B.T. MURRAY AND R.J. SCHAEFER, Computation of dendrites using a phase field model, *Physica D*, **66**, pp. 243-262, 1993.
- [36] YOSHIDA H., M. NAGAOKA, Multiple-relaxation-time Lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation. *Journal of Computational Physics*, **229**, pp. 7774-7795, 2010.
- [37] ZHENG H.W., C. SHU, Y.T. CHEW, A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio. *Journal of Computational Physics*, **218**, pp. 353-371, 2006.