

(1974) - TCP 8 :

- l'enthalpie est calculée aux points d'intégration de l'élément fini
- elle permet de calculer la capacité calorifique moyenne :

$$\rho c = \frac{1}{3} \left( \frac{\partial H}{\partial x} / \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial y} / \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} / \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (4.49.a)$$

ou pour éviter certaines oscillations observées avec le schéma d'intégration à 2 pas de LEE, on utilise la formule (4.49.b) :

(1976) TCP 6 :

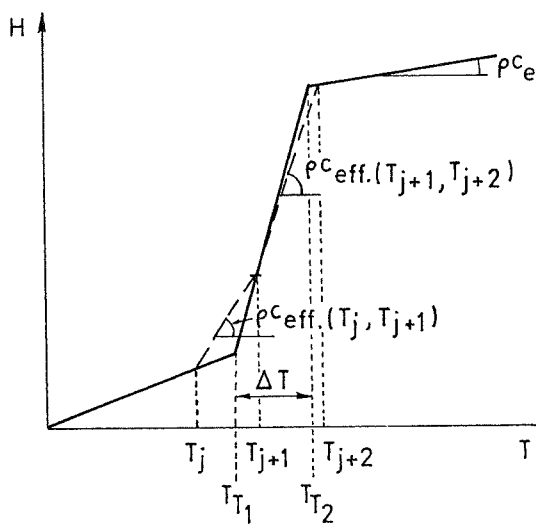
$$\rho c = \frac{\sqrt{\left(\frac{\partial H}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial z}\right)^2}}{\sqrt{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^2}} \quad (4.49.b)$$

Cette dernière formule (4.49.b) est également proposée par LEMMON (TCP 5). Suite à des problèmes numériques mis en évidence par HIBBITT et une étude visant à vérifier la nécessité d'employer les formules (4.49.a, b, c) et (4.50 a et b) une approche beaucoup plus simple a été retenue (TCP 6, TCP 13) :

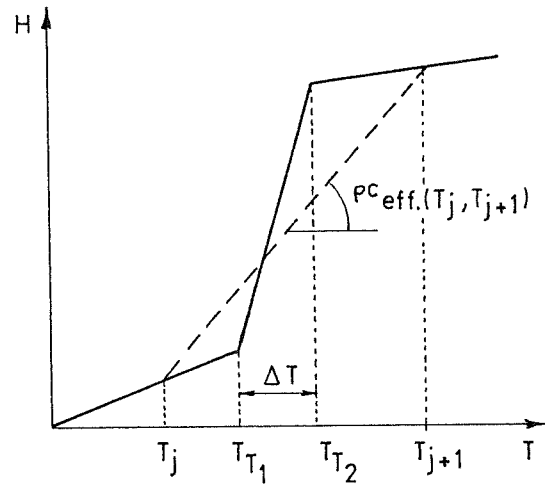
$$(\rho c)_t = \frac{H_t - H_{t-\Delta t}}{T_t - T_{t-\Delta t}} \quad (4.49.c)$$

où H est fonction de la température au point d'interpolation. Cette formule correspond à celle de HOGGE (TCP 10), elle est d'emploi très courant.

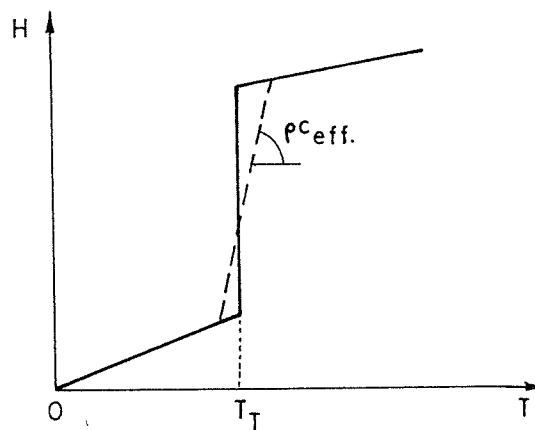
La méthode enthalpique assure la sensibilité au changement de phase quel que soit le pas de temps. Cependant si l'on désire prendre en compte la chaleur latente de façon précise, le pas de temps  $\Delta t$  sera tel que dans la zone de changement de phase, la variation de température correspondante soit inférieure à l'intervalle de température  $\Delta t$  occupé par le changement de phase (fig. 4.12). Pour le cas d'un matériau pur, une approximation est donc toujours réalisée.



a)  $\Delta t$  tel que  $|T_{j+1} - T_j| < \Delta T$   
cas d'un alliage



b)  $\Delta t$  tel que  $|T_{j+1} - T_j| > \Delta T$   
cas d'un alliage



c) cas de la substance pure

**Figure 4.12.** - Influence du pas de temps  $\Delta t$  lors de la représentation du changement de phase (méthode enthalpique).

Plusieurs options sont proposées pour se libérer de cette condition sur la taille des pas, et atteindre une bonne précision en cas de substance pure.

- Option 1 : améliorer le calcul du flux capacitif.
- Option 2 : améliorer le terme de la matrice tangente issu du flux capacitif.

Avant d'aborder ces deux voies de développement, écrivons l'équation d'équilibre thermique discrétisée dans le temps (schéma implicite  $\theta = 1$ ) et l'espace en adoptant la formulation enthalpique. La forme générale de cette équation sera établie au paragraphe 4.5.4.1. A l'aide des relations 3.16, 3.21, 4.11, 4.49.c on obtient pour chaque noeud  $i$  :

$$\begin{aligned} & \Sigma \int_{\Omega_e} (k_n T_{n,j} + k_{n+1} T_{n+1,j}) \phi_{i,j} d\Omega \\ & + \Sigma \int_{\Omega_e} \frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} \phi_i d\Omega - \Sigma \int_{\Omega_e} r_{n+1} \phi_i d\Omega \\ & - \Sigma \int_{\Gamma_2} \phi_i q d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (4.50.)$$

$j = 1, 2, 3$  les trois directions de l'espace

$\cdot_j =$  dérivée dans la direction  $j$

$r =$  source interne de chaleur

$q =$  flux de surface appliqué sur la surface  $\Gamma_2$  du solide

$\phi_i =$  fonction d'interpolation géométrique correspondant au noeud  $i$ .

*NB.* Les termes spécifiques de convection et radiation sont absents car ils n'apportent rien dans les développements présents. Rappelons que les indices  $n$  et  $n + 1$  indiquent que la variable est définie au temps  $t_n$  ou  $t_{n+1}$ .

### 1. Amélioration du calcul du flux capacitif.

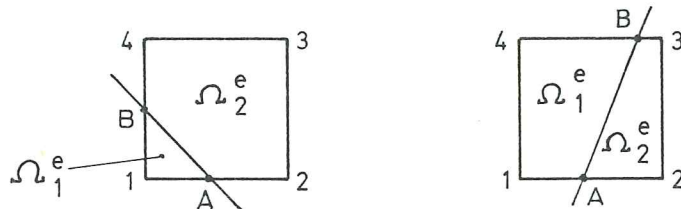
Une première façon d'améliorer la précision de la méthode consiste à apporter un soin particulier au **calcul des flux** et particulièrement au terme de flux capacitif qui est le plus affecté par le changement de phase :

$$(q_c)_i = \Sigma \int_{\Omega_e} \phi_i \frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} d\Omega \quad (4.51.)$$

où  $(q_c)_i$  représente le flux capacitif relatif au noeud  $i$ .

La fonction  $H$  est discontinue sur l'élément en présence d'un changement de phase et son intégration exacte pose donc problème :

- a. La méthode habituelle d'intégration par points de GAUSS est erronée lorsque l'intégrand présente des échelons de discontinuité ; augmenter le nombre de points de GAUSS ne résout donc rien. En pratique, c'est cependant cette méthode classique sans augmentation du nombre de points d'interpolation qui est couramment utilisée. L'erreur commise dépend de la forme de la fonction  $H(T)$  (substance pure - fig. 4.10 - ou alliage - fig. 4.11) et de la taille des éléments.
- b. STORTI, IDELSOHN et CRIVELLI présentent une méthode adaptée aux substances pures qui consiste à séparer l'intégrale en deux parties telles que l'intégrand soit continu dans chacune. La méthode de GAUSS est alors appliquée séparément à chaque partie. Un premier article TCP 2 traite le cas où l'isotherme  $T = T_T$  de transition peut être considérée comme rectiligne à travers l'élément. Deux cas sont possibles (fig. 4.13).



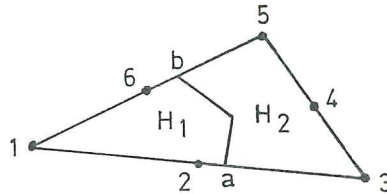
*Figure 4.13.- Les deux types de subdivisions possibles d'un élément quadrilatère à 4 noeuds par l'isotherme de transformation  $T_T$  (substance pure).*

Le flux capacitif peut toujours être obtenu par une somme d'intégrales aisées à calculer. Un second article TCP 3 fournit la solution lorsque l'isotherme  $T = T_T$  ne peut être assimilée à une droite sur l'élément. Ce cas se présente pour des maillages assez grossiers où le rayon de courbure de la frontière entre phases n'est pas nettement supérieur à la taille des éléments. Les auteurs définissent un changement de variable tel que les côtés de l'élément restent droits et la frontière entre phase devient un segment de droite, on se retrouve alors dans le cas traité ci-dessus.

Cette méthode présentée pour des éléments linéaires à 4 noeuds peut être étendue à d'autres éléments.

- c. STEVEN (TCP 16) traite le même problème que CRIVELLI, STORTI et IDELSOHN pour des éléments différents. Il considère l'élément triangulaire à 6 noeuds avec une

isotherme de transformation bilinéaire et l'élément isoparamétrique à 8 noeuds avec une isotherme de transformation linéaire. Son approche essentiellement géométrique est simplifiée puisqu'il suppose le paramètre à intégrer (l'enthalpie  $H$ ) constant de part et d'autre de l'interface.



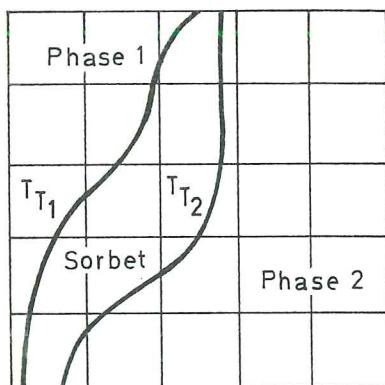
**Figure 4.14.-** Subdivision de l'élément triangulaire à 6 noeuds par une isotherme de transformation  $T_T$  supposée bilinéaire (substance pure).

**Commentaire sur le calcul précis du flux capacitif.**

Les méthodes b et c sont intéressantes et peu coûteuses en CPU pour traiter les problèmes de substances pures où la localisation du changement de phase est réduite à une ligne, l'isotherme de la température de transition. Elles entraînent cependant des développements supplémentaires pour chaque élément de la librairie du code de calcul dont on dispose. Leur extension aux cas des alliages implique la définition de 3 types de zones :

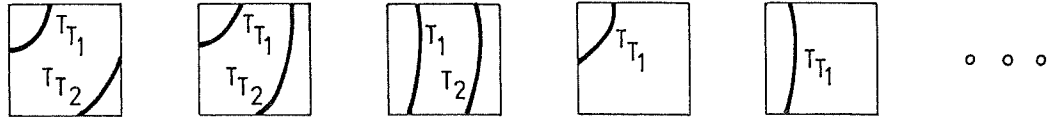
- la zone de phase 1
- la zone de transition appelée généralement sorbet
- la zone de phase 2

séparées par des isothermes  $T_{T_1}$  et  $T_{T_2}$  (figure 4.15).



**Figure 4.15.-** Définition des 3 types de zones lors de la transformation d'un alliage

Si dans le principe, ce développement n'est pas difficile, il occasionne cependant la prise en compte de plusieurs cas de base différents (figure 4.16).



**Figure 4.16.-** Types de subdivision possibles d'un élément quadrilatère à 4 noeuds par les isothermes de transformation  $T_{T1}$ ,  $T_{T2}$  (alliage).

## 2. Amélioration du calcul de la matrice tangente.

Un second type d'amélioration concerne la **matrice tangente**. En effet, l'utilisation d'une matrice tangente imprécise entraîne des temps de calculs très longs et parfois même le non aboutissement de la simulation pour cause de non convergence.

- La méthode classique consiste à dériver l'équation exprimant l'équilibre thermique (4.51) par rapport à la température en fin de pas  $T_{n+1}$ . Nous nous préoccupons uniquement du terme capacitif qui est le plus affecté par le changement de phase.

$$\text{Sachant que } (\rho c)_{n+1} = \frac{H_{n+1} - H_n}{T_{n+1} - T_n} \quad (4.52.)$$

le terme de flux capacitif dans (4.51)

$$(q_c)_i = \Sigma \int_{\Omega_e} \frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} \phi_i d\Omega \quad (4.51.)$$

peut aussi s'écrire

$$(q_c)_i = \Sigma \int_{\Omega_e} (\rho c)_{n+1} \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} \phi_i d\Omega \quad (4.53.)$$

On peut également adopter une formule plus précise pour calculer  $(\rho c)_{n+1}$

$$(\rho c)_{n+1} = \frac{H(T_{n+1} + \epsilon) - H(T_{n+1} - \epsilon)}{2\epsilon} \quad (4.54.)$$

où  $\epsilon$  est une petite perturbation de température.

Cette approche peut cependant conduire à des problèmes numériques lorsque la courbe  $H(T)$  est proche de celle d'une substance pure.

En dérivant (4.54), on obtient le terme capacitif de la matrice tangente : le terme capacitif de la matrice tangente sera :

$$(K_c)_{ij} = \frac{d(q_c)_i}{d(T_{n+1})_j} = \Sigma \int_{\Omega_e} \left[ (\rho c)_{n+1} \frac{1}{\Delta t} + \frac{d(\rho c)_{n+1}}{dT_{n+1}} \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} \right] \phi_i \phi_j d\Omega \quad (4.55.)$$

avec  $(T_{n+1})_j$  = température en fin de pas au noeud j

$$\frac{d(\rho c)_{n+1}}{dT_{n+1}} = \frac{(\rho c)_{n+1} - (\rho c)_n}{T_{n+1} - T_n}$$

L'intégration spatiale du terme de flux et de la matrice tangente est réalisée par la méthode de GAUSS.

- b. STORTI, CRIVELLI et IDELSOHN (1988, TCP 1) présentent un calcul plus précis pour le cas d'une substance pure. Ils séparent le terme capacitif de la matrice tangente en deux : le terme classique et le terme dû au ressaut de l'enthalpie  $K_c^R$ . Ils démontrent que pour un problème bidimensionnel ce terme a la forme suivante :

$$(K_c^R)_{ij} = \Sigma \int_{\Omega_e} \phi_i L \delta (T - T_T) \phi_j d\Omega \quad (4.56.)$$

où •  $\delta (T - T_T)$  est une fonction de Dirac qui vérifie la relation

$$\int_{T_1}^{T_2} \delta (T - T_T) dT = \begin{cases} 1 & \text{si } T_T \in [T_1, T_2] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

•  $d\Omega$  peut être décomposé en  $dx, dy$  selon les deux directions  $x, y$  de l'espace.

Un changement de variable  $(x, y) \rightarrow (T^*, u)$  est réalisé, où  $T^*$  sont les lignes isothermes et  $u$  les lignes de flux. La prise en compte des relations existant entre ces variables conduit à la forme simple :

$$(\mathbf{K}_c)_{ij}^R = \Sigma \int_{\Gamma} \phi_i \frac{L}{|\nabla T|_{T_T}} \phi_j d\Gamma \quad (4.57.)$$

où  $\Gamma$  = ligne isotherme  $T_T$  température de transition

$L$  = chaleur latente de transformation (fig. 4.10)

$|\nabla T|$  = module du gradient de la température évalué aux points de l'isotherme  $T_T$

Comme le soulignent SORTI et al., cette méthode entraîne très peu d'augmentation du temps de calcul car les éléments où le calcul de  $(\mathbf{K}_c)^R$  est nécessaire sont peu nombreux.

Mais, si le cas des substances pures est résolu, le cas des alliages ne peut être traité par cette méthode.

### c. Méthodes cherchant à respecter l'enthalpie de transformation.

ROLPH et BATHE (1982 - TCP9) ont recours à un terme de source interne de chaleur pour traduire les effets de la chaleur latente dissipée ou absorbée.

La température d'un noeud subissant un changement de phase (cas d'une substance pure) est bloquée à la température de transition jusqu'à ce que la chaleur reçue par ce noeud soit égale à la chaleur latente nécessaire à la transformation du volume de matière associée à ce noeud.

Pour un alliage, la température d'un noeud en cours de transformation est obtenue à partir de la fraction de chaleur latente reçue par rapport à la chaleur latente nécessaire. Le détail des calculs est donné par la référence TCP9.

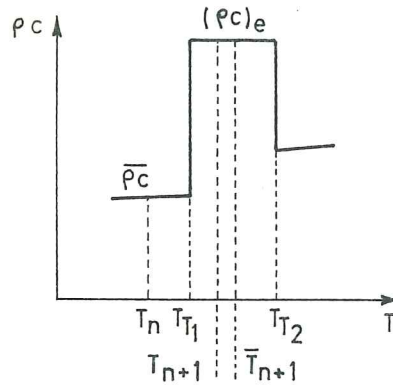
Le choix du pas de temps n'est plus imposé par le problème de changement de phase, la prise en compte de la totalité de la chaleur latente ainsi que l'équilibre des flux sont assurés. On observe parfois des oscillations de la solution due aux températures nodales bloquées pendant la transformation pour une substance pure.

La méthode de DUTTA (1985 - TCP17) s'applique plus particulièrement au cas des alliages, il s'agit d'une méthode directe avec une correction de la température lorsqu'on passe une des températures de transition.

Par exemple, envisageons le cas représenté figure 4.17. La première approximation  $T_{n+1}$  de la température au temps  $t_{n+1}$  est corrigée de la manière suivante :



$$T_{n+1} = T_{T_1} + \frac{\overline{\rho c}}{(\rho c)_e} (T_{n+1} - T_{T_1}) \quad (4.58.)$$



*Figure 4.17.- Illustration de la méthode de DUTTA (d'après TCP17).*

Cette approche améliore la précision de la méthode directe sans résoudre le problème de la restriction du pas de temps.

#### **d. Méthodes où l'inconnue n'est pas la température.**

L'idée de base consiste à effectuer un changement de variable sur le champ de températures de telle sorte que tous les calculs puissent être effectués sur un champ inconnu continûment dérivable.

Ces méthodes ont été développées principalement lors de la simulation des problèmes de dégel ou de congélation de l'eau. DUVANT le premier (1973 - TCP11) a défini une transformation de la température en indice de gel continûment dérivable. Les développements se sont succédés (TCP11, TCP12) et à présent, BLANCHARD et FREMOND (TCP15) adoptent cette méthode pour la congélation de sols non homogènes. De plus, ils considèrent l'existence de zones de température nulle où eau et glace coexistent.

Nous n'entrerons pas dans les détails de ces méthodes car elles sont peu adaptées à notre problème. En effet, la présence d'autres effets thermiques tels que la convection, la radiation ainsi que le but d'un couplage thermomécanique imposent de prendre la température comme variable principale. Un autre choix entraînerait de nombreuses complications.

## 4.5. DESCRIPTION DU CODE LAGAMINE - (Partie thermique-métallurgique)

### 4.5.1. Introduction.

Afin de vous donner une idée précise des opérations nécessaires lors de la simulation d'une trempe, nous allons décrire le travail de l'utilisateur et du code de calcul de façon chronologique. Nous précisons ensuite les détails de l'élément PL8TM qui constituent un apport original de cette thèse. Pour terminer, quelques informations sur la stratégie de calcul seront fournies.

### 4.5.2. Introduction et vérification des données.

L'ensemble des données à définir pour aborder une simulation de trempe est assez important :

- définition du maillage : coordonnées des noeuds et description des éléments de solide (PL8TM) et de surface (CONRA pour l'échange par convection et ECHRA pour l'échange par radiation) ;
- définitions des conditions aux limites :
  - noeuds de température imposée  $T(t)$  ;
  - noeuds auxquels le flux est imposé  $q(t)$  (fig. 3.11).

NB. Les fonctions du temps  $q(t)$  et  $T(t)$  sont quelconques, elles sont données par points ;

- description des paramètres des lois constitutives non métallurgiques
  - $k(T)$  coefficient d'échange par convection (courbe définie par points)
  - $\sigma \epsilon$  coefficient de radiation :
    - $\sigma$  : constante de BOLTZMAN
    - $\epsilon$  : facteur d'émissivité généralement pris constant mais qui pourrait être fonction de la température ;
- description des paramètres des lois de comportement du PL8TM (élément thermique métallurgique) :
  - les températures caractéristiques de l'acier :  $A_3$  ou  $A_{cm}$ ,  $A_1$ ,  $T_H$ ,  $B_S$ ,  $B_f$ ,  $M_S$  (fig. 3.9) ;

- $\alpha$  : coefficient de la loi de KOISTINEN-MARBURGER pour la transformation martensitique (3.14) ;
- F : facteur correcteur de germination (3.2.2.2.B) ;
- pour chacune des 5 phases (austénite, proeutectoïde, perlite, bainite, martensite), les coefficients suivants sont définis par un polynôme de la température :
  - k (T) conductivité thermique
  - $\rho$  (T) masse volumique
  - c (T) capacité calorifique
  - Hv (T) dureté ;
- pour chacune des 4 transformations possibles de l'austénite, l'enthalpie de transformation H (T) est définie par un polynôme de la température ;
- le diagramme TTT (fig. 2.4) est décrit par points, les courbes suivantes sont définies :
  - début de la transformation
  - P<sub>1</sub> % de la transformation
  - P<sub>2</sub> % de la transformation
 avec P<sub>1</sub> = 10 et P<sub>2</sub> = 90 en général
- le pourcentage maximum de phase formée (proeutectoïde, perlite, bainite) y<sub>max</sub> (3.2.2.2.C) dépend de la température ; cette courbe est également décrite par points.

Un programme de génération de maillage interactif EMAIL (EF22) permet à l'utilisateur de définir rapidement son maillage. De plus pour les pièces de forge, un programme automatique est disponible PREFORGE (EF23).

Quant aux paramètres de lois concernant le PL8TM, ils sont définis sur un fichier particulier afin de permettre l'utilisation aisée de ces données pour différentes simulations concernant un même acier. Pour faciliter la tâche de l'utilisateur et éviter les erreurs, la routine de lecture de ces informations permet une certaine souplesse dans l'ordre des données. Chaque phase et chaque paramètre sont définis par 2 lettres (BA = bainite, Hv = dureté, ...) et leur ordre d'entrée n'est pas imposé ; les paramètres non définis sont initialisés à zéro.

Toutes ces données sont lues par un préprocesseur LAGAPRE (EF24) qui effectue un certain nombre de vérifications et calcule certains paramètres. Citons par exemple :

- le calcul du jacobien des éléments qui doit être positif ;
- le calcul des facteurs de vue des éléments de rayonnement (facteurs définis une fois pour toutes en fonction de la géométrie initiale), le calcul des coefficients n (T) et b (T) de la

loi de JOHNSON-MEHL-AVRAMI (3.1) à partir du diagramme TTT.

Grâce aux fichiers créés par ce préprocesseur, l'utilisateur peut dessiner et vérifier son maillage à l'aide du programme de dessin DESFIN (EF25). Le fichier résultat concernant les paramètres des lois constitutives du PL8TM est clair et détaillé pour permettre une vérification aisée.

#### 4.5.3. Le programme LAGAMINE (thermique-métallurgique).

L'utilisateur doit définir un fichier de "*données d'exécution*" qui contient les informations suivantes :

- identification des fichiers (fichiers de données créés par le préprocesseur, fichiers de résultats, ...),
- choix de la méthode de résolution (voir paragraphe 4.5.5),
- choix des paramètres de la stratégie (voir paragraphe 4.5.5), taille minimum et maximum du pas de temps, facteur multiplicateur ou diviseur du pas de temps, ...
- choix des conditions de convergence :

$$\text{-- norme sur les flux : } e_f = \frac{\sqrt{\Delta q_i \cdot \Delta q_i}}{\sqrt{q_j \cdot q_j}} \leq \varepsilon \quad (4.59.)$$

- où
- $i$  concerne les noeuds où ni le flux ni la température ne sont imposés
  - $j$  concerne les noeuds où soit la température, soit le flux est imposé
  - $\Delta q_j$  indique un flux hors d'équilibre au noeud  $i$  (non respect de l'équation d'équilibre thermique (3.21), détaillée ci-après pour les éléments PL8TM).

La possibilité est laissée à l'utilisateur de définir le dénominateur de (4.59) s'il le désire. La tolérance  $\varepsilon$  est généralement fixée à  $1.10^{-3}$  ou  $1.10^{-4}$ ,

$$\text{-- norme sur les températures : } e_T = \frac{\sqrt{(\Delta T_i)_{\text{iter}} (\Delta T_i)_{\text{iter}}}}{\sqrt{(\Delta T_i)_{\text{pas}} (\Delta T_i)_{\text{pas}}}} \leq \varepsilon \quad (4.60.)$$

$(\Delta T_i)_{\text{iter}}$  = variation de température au noeud  $i$  suite à une itération

$(\Delta T_i)_{\text{pas}}$  = variation totale de température au noeud  $i$  au cours du pas,

- choix des impressions et des instants de sauvetages des résultats ;
- condition d'arrêt du programme :  $IMAX$  nombre de pas maximum,  
 $t_{fin}$  temps final ;
- choix de la première approximation de la dérivée de la température  $\dot{T}$  en début de pas :
  1. soit  $\dot{T} = 0$
  2. soit  $\dot{T}$  est la dérivée de la température au cours du pas précédent.

Si la courbe de température est monotone, croissante ou décroissante, l'hypothèse 2 suffit ; elle permet de réduire le nombre d'itérations. Par contre, le passage d'un extremum ( $T$  maximum ou  $\dot{T}$  minimum) entraîne généralement l'utilisation de la première hypothèse. En pratique, la stratégie automatique gère le choix de  $\dot{T}$  ; si la convergence est bonne, l'hypothèse 2 est adoptée ; si le calcul diverge, le programme adopte l'hypothèse 1.

L'organigramme présenté ci-après (figure 4.18) résume les différentes étapes du calcul :

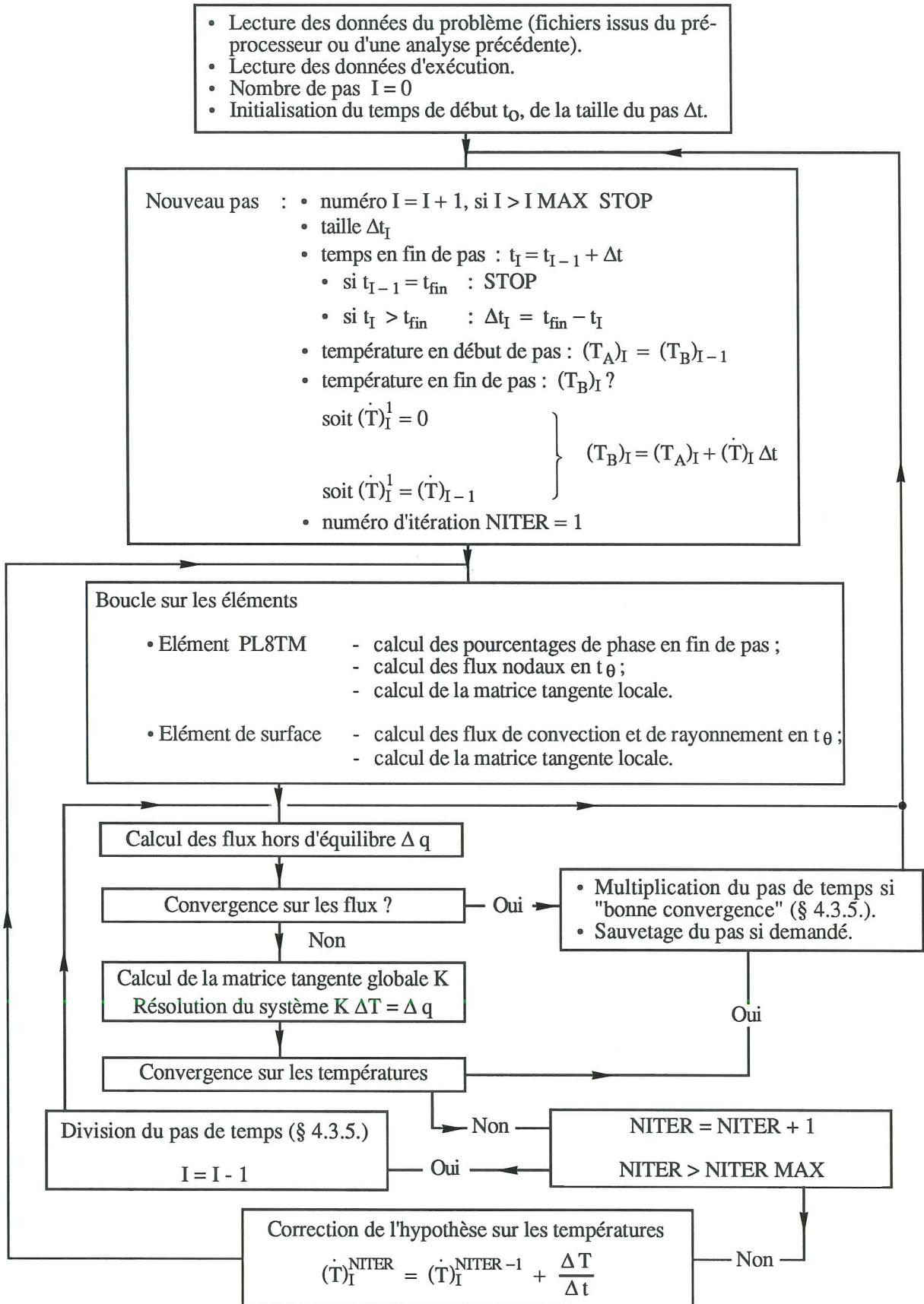


Figure. 4.18. Organigramme du LAGAMINE (Thermique-métallique), définition de  $t_0$  voir (§ 4.2.).

#### 4.5.4. Précisions sur l'élément PL8TM.

##### 4.5.4.1. Calcul des flux nodaux équivalents.

En toute généralité, repartons de l'équation d'équilibre thermique à l'intérieur du solide (3.15). Pour un solide bidimensionnel  $\Omega$ , on a à l'instant  $t$  :

$$\partial_s (q_k)_s + r - \rho c \dot{T} = 0 \quad s = 1,2 \quad (4.61.a)$$

$$(q_k)_s = -k T_{,s} \quad \text{où} \quad T_{,1} = \frac{\partial T}{\partial x} ; T_{,2} = \frac{\partial T}{\partial y} \quad (4.61.b)$$

L'application de la méthode des résidus pondérés, permet d'exprimer l'équilibre thermique par un système de  $N$  équations, lorsque le solide est discrétisé par  $N$  noeuds :

$$\int_{\Omega} \phi_j \{-\partial_s (q_k)_s + r - \rho c \dot{T}\} d\Omega = 0 \quad j = 1, N \quad (4.62.)$$

où  $\phi_j$  est la fonction d'interpolation géométrique relative au noeud  $i$ .

Par application du théorème de GAUSS sur le premier terme, on obtient :

$$\int_{\Omega} \{\phi_{j,s} (q_k)_s + \phi_j r - \phi_j \rho c \dot{T}\} d\Omega - \int_{\Gamma} n_s (q_k)_s \phi_j d\Gamma = 0 \quad (4.63.)$$

où  $n_s$  est la normale unitaire extérieure au domaine.

La seconde intégrale concerne l'équilibre à la surface, que nous ne considérerons pas ici (EF17). Par la méthode des éléments finis, le domaine  $\Omega$  est subdivisé en un nombre fini de sous-domaine  $\Omega_e$  appelé éléments. La première intégrale sera évaluée séparément pour chaque élément et une opération d'assemblage permettra ensuite de retrouver le système de  $N$  équations. Pour chaque élément PL8TM, on a 8 équations :

$$F_j = \int_{\Omega_e} (\phi_{j,s} (q_k)_s + \phi_j r - \phi_j \rho c \dot{T}) d\Omega \quad j = 1, 8 \quad (4.64.)$$

où  $\phi_j$  concerne les 8 noeuds de l'élément car les  $\phi_j$  relatifs à d'autres noeuds sont nuls sur le domaine  $\Omega_e$ .  $F_j$  est le flux de chaleur au noeud  $j$  résultant des échanges thermiques à l'intérieur de l'élément  $\Omega_e$ .

Les équations rappelées ci-dessus concernent un équilibre instantané. Pour une simulation des phénomènes réels, il faut ajouter la dimension temporelle. Nous avons choisi

la méthode de ZIENKIEWICZ rappelée en 4.2.1.b. Sur un pas de temps,  $F_j$  est évalué en tenant compte d'une fonction de pondération  $W(\theta)$  :

$$F_j = \int_0^1 W(\theta) \int_{\Omega_e} \{ \phi_{j,s} (q_k)_s + \phi_j r - \phi_j \rho c \dot{T} \} d\Omega d\theta \quad j = 1, 8 \quad (4.65.)$$

Rappelons brièvement :

- en début de pas  $\theta = 0$ , les variables sont notées  $T_n, \dot{T}_n, r_n, \dots$ ,
- en fin de pas  $\theta = 1$ , les variables sont notées  $T_{n+1}, \dot{T}_{n+1}, r_{n+1}$ ,
- au cours du pas :  $T(\theta) = N_n T_n + N_{n+1} T_{n+1}$

$$\dot{T}(\theta) = \dot{N}_n T_n + \dot{N}_{n+1} T_{n+1} = \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t}$$

$$\text{avec } N_n = 1 - \theta ; N_{n+1} = \theta ; \dot{N}_n = \frac{-1}{\Delta t} ; \dot{N}_{n+1} = \frac{1}{\Delta t}$$

Avec 4.61.b, 4.65. et les rappels ci-dessus, on obtient :

$$F_j = \int_0^1 W(\theta) \int_{\Omega_e} [ -\phi_{j,s} (k_n N_n + k_{n+1} N_{n+1}) (T_{n,s} N_n + T_{n+1,s} N_{n+1}) + \phi_j (r_n N_n + r_{n+1} N_{n+1}) - \phi_j (\rho_n c_n \dot{N}_n + \rho_{n+1} c_{n+1} \dot{N}_{n+1}) (N_n T_n + N_{n+1} T_{n+1}) ] d\Omega d\theta \quad (4.66.)$$

$$\text{Si on pose } : D = \int_0^1 W(\theta) d\theta$$

$$a = \frac{1}{D} \int_0^1 W(\theta) N_n^2 d\theta$$

$$b = \frac{1}{D} \int_0^1 W(\theta) N_n N_{n+1} d\theta$$

$$c = \frac{1}{D} \int_0^1 W(\theta) N_{n+1}^2 d\theta \quad (4.67.)$$

$$d = \frac{1}{D} \int_0^1 W(\theta) N_n d\theta$$

$$e = \frac{1}{D} \int_0^1 W(\theta) N_{n+1} d\theta$$



il vient :

$$F_j = \int_{\Omega_e} - [k_n (a T_{n,s} + b T_{n+1,s}) + k_{n+1} (b T_{n,s} + c T_{n+1,s})] \phi_{j,s} - \left[ (d \rho_n c_n + e \rho_{n+1} c_{n+1}) \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t} - (d r_n + e r_{n+1}) \right] \phi_j d\Omega \quad (4.68.)$$

avec  $(q_k)_s =$  flux conductif moyen sur le pas selon la direction  $s$  :

$$= k_n (a T_{n,s} + b T_{n+1,s}) + k_{n+1} (b T_{n,s} + c T_{n+1,s})$$

$q_c =$  flux capacitif moyen sur le pas :

$$= (d \rho_n c_n + e \rho_{n+1} c_{n+1}) \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t}$$

$q_{tr} =$  valeur moyenne sur le pas du flux dû à la transformation :

$$= d r_n + e r_{n+1}$$

Le calcul de l'intégrale  $F_j$  est réalisé par la méthode de GAUSS :

$$F_j = \sum_{PI} [- (q_k)_i \phi_{j,i} - (q_c - q_{tr}) \phi_j] |J| W \quad j = 1, 8 \quad (4.69.)$$

où le symbole  $\sum_{PI}$  signifie "somme sur tous les points d'intégration de GAUSS"

$W$  est le poids du point de GAUSS considéré et

$|J|$  est le déterminant de la matrice jacobienne  $J$ .

Cette matrice a pour expression :

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (4.70.a)$$

avec les relations habituelles des éléments isoparamétriques : où  $x_j, y_j$  sont les coordonnées du noeud  $j$ .

$$x(\xi, \eta) = \phi_j(\xi, \eta) x_j$$

$$j = 1, 8 \quad (4.70.b)$$

$$y(\xi, \eta) = \phi_j(\xi, \eta) y_j$$

Remarquons d'ailleurs que les gradients des températures  $T_{n,i}$  et  $T_{n+1,i}$  sont évalués grâce à l'inverse de cette matrice jacobienne :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{cases} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \xi} \\ \frac{\partial T}{\partial \eta} \end{cases} \quad \text{avec } T(\xi, \eta) = \phi_j(\xi, \eta) T_j \quad j = 1, 8 \quad (4.71.)$$

où  $T_j$  est la température du noeud  $j$ .

#### 4.5.4.2. Calcul de la matrice tangente.

La matrice tangente locale est obtenue en dérivant le flux nodal équivalent  $F_j$  par rapport aux températures en fin de pas des différents noeuds  $i$  de l'élément :

$$K_{ij} = \sum_{PI} \left[ -\phi_{i,s} \frac{\partial (q_k)_s}{\partial (T_{n+1})_j} - \phi_i \left( \frac{\partial q_c}{\partial (T_{n+1})_j} - \frac{\partial q_{tr}}{\partial (T_{n+1})_j} \right) \right] |J| W \quad (4.73.)$$

Pour un calcul découplé, la géométrie est constante et il n'y a donc aucune dérivée sur les termes  $\phi_{j,s} |J|$ ,  $\phi_j$ . Lorsqu'on passe à un calcul thermique métallurgique couplé au calcul mécanique, ce n'est plus le cas et une matrice tangente complète sera définie (chapitre 6).

On peut décomposer la matrice tangente locale en 3 termes :

- $(K_k)_{ij}$  = matrice tangente obtenue à partir du flux conductif

$$\begin{aligned} (K_k)_{ij} = & - \sum_{PI} \phi_{j,s} \underbrace{(b k_n + c k_{n+1})}_{\text{Coefficient } C_1} \phi_{i,s} |J| W \quad s = 1, 2 \quad (4.74.) \\ & - \sum_{PI} \phi_{i,s} \underbrace{\frac{\partial k_{n+1}}{\partial T} (b T_{n,s} + c T_{n+1,s})}_{\text{Coefficient } C_{2s}} \phi_j |J| W \quad j = 1, 8 \end{aligned}$$

La première partie de cette matrice est symétrique mais pas la seconde.

- $(K_c)_{ij}$  = matrice tangente obtenue à partir du flux capacitif (matrice symétrique)

$$= \sum_{PI} \phi_j \left[ \underbrace{(d \rho_n c_n + e \rho_{n+1} c_{n+1}) \frac{1}{\Delta t} + e \frac{\partial \rho_{n+1} c_{n+1}}{\partial T} \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t}}_{\text{Coefficient } C_3} \right] \phi_i |J| W \quad (4.75.)$$

Au point d'intégration le terme capacitif  $\rho c$  est calculé par une loi de mélange (3.19). Ce terme est non linéaire mais il ne présente pas de ressaut important au changement de phase puisque la chaleur latente dissipée en cours de transformation est prise en compte dans le terme  $r$ .

- $(K_r)_{ij}$  = matrice tangente obtenue à partir du flux de transformation (matrice symétrique)

$$= \sum_{PI} \phi_j \underbrace{e \frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}}_{\text{Coefficient } C_4} \phi_i |J| W \quad (4.76.)$$

Cette dernière partie de la matrice tangente locale constitue un terme nouveau par rapport aux cas thermiques non linéaires sans prise en compte de la métallurgie ou lorsque les changements de phase sont traduits par une méthode enthalpique.

On a vu au chapitre 3 que :

$$r = \dot{y}_k H_k(T) \quad k = 2, 6 \quad (3.20.)$$

En un point d'intégration de GAUSS une seule transformation ( $z$  par exemple) arrive à la fois et par conséquent, la somme est réduite à un terme :

$$r = \dot{y}_z H_z(T) \quad (\text{pas de somme sur } z) \quad (4.77.)$$

Le terme  $\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}$  de la matrice tangente de transformation vaudra :

$$\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T} = \frac{\partial \dot{y}_z}{\partial T} H_z(T) + \dot{y}_z \frac{\partial H_z(T)}{\partial T} \quad (\text{pas de somme sur } z) \quad (4.78.)$$

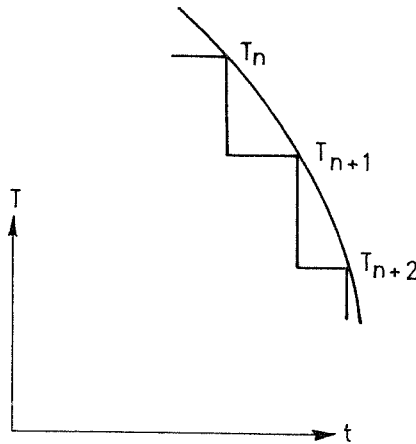
#### 4.5.4.3. Evaluation de $\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}$

Pour une transformation martensitique, l'enthalpie de transformation est constante et le terme  $\frac{\partial \dot{y}_6}{\partial T}$  est facile à obtenir à partir de la formule 3.14.

$$\begin{aligned} \text{On trouve : } \frac{\partial r_{n+1}}{\partial T} &= H_6 \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial}{\partial t} (y_\gamma (1 - \exp(\alpha (M_s - T))) \\ &= \dot{T} H_6 \alpha y_\gamma \exp(\alpha (M_s - T)) \end{aligned} \quad (4.79.)$$

Le terme  $\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}$  est négatif, ( $\dot{T} < 0$ ) ce qui correspond à la physique du phénomène : pour une diminution de température, la transformation s'accompagne d'un dégagement de chaleur.

Pour une transformation par diffusion, nous préférons ne pas utiliser la valeur analytique  $\dot{y}_z$  pour les raisons expliquées précédemment (3.3.2.2.c). Nous calculons donc de façon approchée une valeur moyenne sur le pas :



**Figure 4.19.-** Discretisation de la courbe de refroidissement.

$$r = \frac{\Delta y}{\Delta t} H ( T_{n+1} ) \quad (4.80.)$$

qui correspond à la discrétisation de la courbe de refroidissement pour le calcul des transformations (fig. 4.19) où la température est supposée constante au cours du pas.

Si on prend cette valeur moyenne comme valeur en fin de pas, une approximation possible du terme  $\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}$  a la forme suivante :

$$\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T} \cong \frac{r_{n+1} - r_n}{T_{n+1} - T_n} = \frac{\Delta r}{\Delta T} \quad (4.81.)$$

Des essais numériques ont montré que cette formulation entraîne la divergence du processus itératif de recherche de l'équilibre.

Dans l'hypothèse d'une enthalpie quasi-constante, on peut écrire :

$$\frac{\Delta r}{\Delta T} = \frac{H}{\Delta T} \left( \left( \frac{\Delta y}{\Delta t} \right)_{n+1} - \left( \frac{\Delta y}{\Delta t} \right)_n \right) \quad (4.82.)$$

Si le premier facteur  $H/\Delta T$  est toujours négatif (diminution de température  $\Delta T < 0$ ), le second sera positif si la vitesse de transformation augmente et négatif si elle diminue.

Par conséquent, cette formule approchée ne fournit pas toujours un  $\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T}$  négatif correspondant à la physique du phénomène.

En réalité, il ne faut pas relier l'approximation du taux de production de chaleur  $r$  (4.80) de deux pas différents. La formule suivante a donné entière satisfaction pour une transformation par diffusion :

$$\frac{\partial r_{n+1}}{\partial T} = \left( \frac{\Delta y}{\Delta t} \right)_{n+1} \frac{H(T_{n+1})}{(T_{n+1} - T_n)} \quad (4.83.)$$

Cette formule a également été appliquée avec succès dans le cas d'une transformation martensitique. La comparaison numérique des formules (4.83) et (4.79) est très satisfaisante.

#### 4.5.5. Stratégie de calcul et méthode de résolution.

Suite à la non symétrie de la matrice de conduction, la matrice tangente assemblée est non symétrique. Deux choix sont possibles :

1. soit symétriser la matrice et utiliser une méthode de résolution de système symétrique
2. soit conserver la matrice non symétrique et utiliser une méthode de résolution adaptée.

Il n'est pas immédiat de déterminer la méthode la plus rapide ; chaque méthode a son inconvénient :

*hypothèse 1 :*

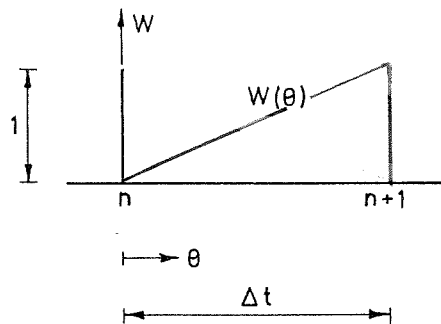
résolution rapide du système mais matrice moins tangente, risque d'augmenter le nombre d'itérations par pas ;

*hypothèse 2 :*

meilleure matrice tangente, mais méthode de résolution plus lente.

Le choix d'un schéma de résolution est déterminé par les paramètres  $a, b, c, d, e$  (4.67). En pratique, seul deux de ces coefficients sont linéairement indépendants ; nous testerons les cas :

GALERKIN :  $W(\theta)$

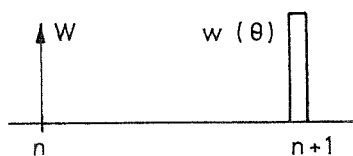


$$D = 1/2 \quad a = 1/6 \quad b = 1/6 \quad c = 1/2$$

$$d = 1/3 \quad e = 2/3 = \theta^* \quad (4.12.a)$$

**Figure 4.20**

IMPLICITE :  $W(\theta)$



$$D = 1 \quad a = 0 \quad b = 0 \quad c = 1$$

$$d = 0 \quad e = 1 = \theta^* \quad (4.12.a)$$

**Figure 4.21**

Le cas test est celui du refroidissement d'un cylindre en 42CD4 à flux constant (fig. 3.18 et 3.19), discrétisation (fig. 3.15). On utilise une stratégie automatique qui multiplie ou divise le pas selon s'il y a "bonne" convergence ou non. Le calcul couvre l'intervalle de temps 0 à 750 secondes.

Le tableau suivant permet de comparer les différents passages effectués.

		GALERKIN $\theta^* = 2/3$			IMPLICITE $\theta^* = 1$		
		CPU	NPAS	NITER	CPU	NPAS	NITER
Discrétisation grossière du temps (a)	K non symétrique	5' 46"	179 (6)	494	7' 32"	201 (6)	662
	K symétrique	5' 35"	179 (6)	494	7' 21"	201 (6)	662
Discrétisation fine du temps (b)	K non symétrique	45' 55"	2 378 (5)	4 238	43' 14"	2388 (8)	4 013
	K symétrique	44' 45"	2 378 (5)	4 238	43' 12"	2394 (10)	4 056

cas (a) : le pas de temps maximum est de 5 sec ;  $\Delta t_{\text{initial}} = 0,5$  sec.

cas (b) : entre  $t = 180$  et  $t = 640$  sec., zones où les transformations de phase ont lieu,  $\Delta t_{\text{max}}$  vaut 0,2 sec. et ailleurs  $\Delta t_{\text{max}} = 0,5$  sec ;  $\Delta t_{\text{initial}} = 0,2$  sec.

CPU : temps de calcul sur un MICROVAX II

NPAS : nombre de pas total réalisés, entre parenthèses, nombre de pas non convergés

NITER : nombre total d'itérations (pas réussis ou non).

Les paramètres de la stratégie automatique sont identiques pour tous ces passages, soit :

- un pas est dit "bien convergé" si il converge en moins de 9 itérations et si la norme des forces hors d'équilibre ou des variations de température au cours du pas n'augmente pas plus de 5 fois au cours des itérations,
- si 2 pas consécutifs ont bien convergé, le  $\Delta t$  est multiplié par 3,
- si le pas n'a pas "bien convergé", le  $\Delta t$  est divisé par 3.

Les figures suivantes résument les résultats obtenus.

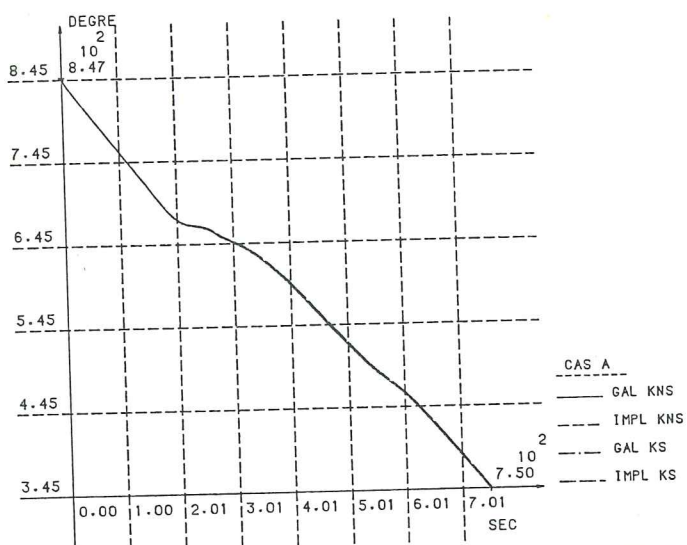


Figure 4.22.-  
Histoire des températures

Figure 4.23.- Comparaison  
des taux formés pour le cas (a)

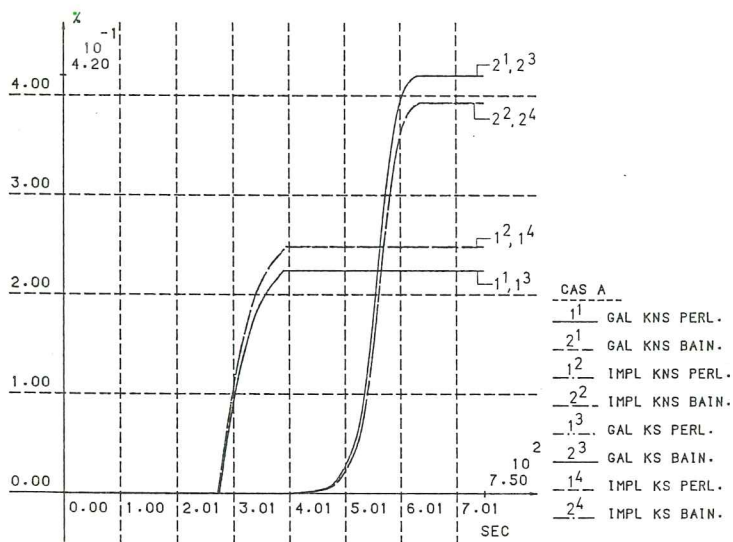
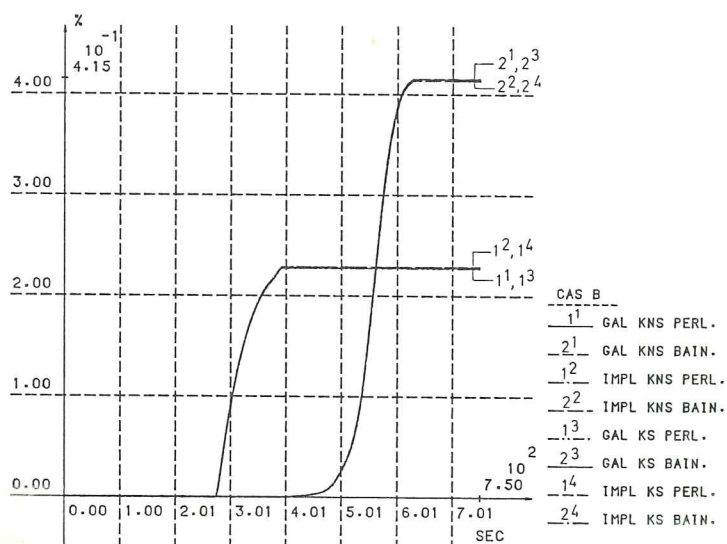
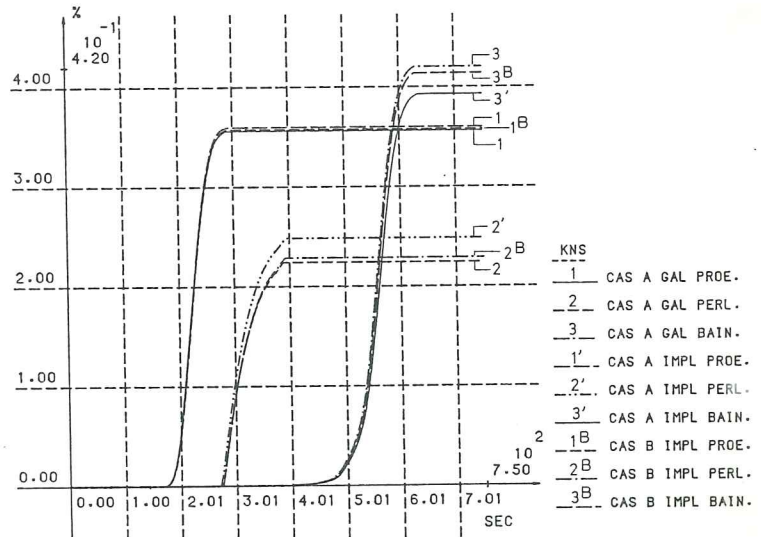


Figure 4.24.-  
Comparaison des taux  
formés pour le cas (a)



Figure 25.- Comparaison des deux cas.



On peut donc tirer les conclusions suivantes :

- le schéma de GALERKIN est le plus précis ;
- l'importance du schéma adopté se traduit surtout sur la précision du taux de phase formé et non sur la température ;
- on observe un nombre d'itérations très légèrement supérieur lorsqu'on utilise la matrice symétrique mais un temps CPU légèrement réduit. La précision du résultat n'est pas affectée.

Une analyse plus précise du temps CPU montre que pour l'exemple traité, le temps passé dans la méthode de résolution représente en moyenne 10,5% pour les cas avec matrice K non symétrique et 6,0% pour les cas avec matrice symétrique. Pour un exemple de taille plus importante, la proportion du temps passé en résolution du système augmente et l'utilisation d'une matrice K symétrique conduit à des économies de temps CPU plus importantes. Un autre point en faveur d'une matrice K symétrique est le gain important (environ 50%) réalisé sur la taille mémoire nécessaire pour stocker la matrice K et effectuer la résolution du système. En conclusion, nous préconisons l'emploi d'une matrice K symétrisée pour les analyses thermiques métallurgiques.

Pour l'analyse complète thermique métallurgique mécanique, la non-symétrie de la matrice K résulte principalement de l'analyse mécanique. Les conclusions qui précèdent ne sont par conséquent plus valables, elles dépendent du type d'analyse effectuée. Pour le refroidissement d'une poutrelle métallique (étude en état plan généralisé avec loi élastoplastique, voir chapitre 6), l'utilisation d'une matrice symétrisée a entraîné la divergence du processus itératif alors que l'utilisation de la matrice K non-symétrique a permis d'obtenir la convergence.