



Melting and solidification: processes and models/Fusion et solidification : procédés et modèles

Foreword

With very few exceptions, the solid materials we use (metallic alloys, glasses, ceramics, plastics, etc.) have all undergone, at a crucial point in their history, the transition from the liquid state to the solid state. This change of state can be thought of as a major event since it determines, almost completely, the properties of the material: for instance, its microstructure (with or without grains), or its composition (with or without segregation). It depends on many parameters, such as the physical properties of the material, very different in metals, glasses, or plastics, and the exterior parameters of the solidification system (the type of oven or crucible, temperature gradient or cooling rate, speed of venting, an external action on the hydrodynamics of the fluid phase, etc.). There is also the manner in which these effects influence the phenomenon of solidification and the instantaneous shape of the interface, in general unstable, the absorption or rejection of a solute by the solid phase, and, finally, the practical properties of the material. This is indeed one of the major scientific challenges of our time, eager for advanced technologies and more and more discriminating about the quality of its materials.

Historically, since antiquity, successive civilisations have always tried to perfect their materials. This firstly involved the quality of their weaponry, essential for their survival. Then, progressively, they laid more and more importance on the machinery needed for their agriculture, habitat and industry. Essentially empiric and often secret until the middle of the 20th century, the available knowledge on the physics of solidification has gradually become more and more rational, has become the subject of more and more publications, and has then become a discipline systematically taught at universities. However, there remain a number of mysteries still hidden behind unexplained experimental results, for which the technological consequences can be considerable, such as the number and size of the segregation channels in a metallic alloy made in a solidification oven, to give but one example. The underlying physics, multidisciplinary and highly complex, seems now sufficiently well understood to allow a precise formulation, even if several approximations often have to be judiciously used. However, this formulation seems to conceal all imaginable types of traps in systems of coupled, strongly non-linear equations.

The last twenty years have, by giving birth to powerful numerical simulation methods, even although sometimes very heavy, opened completely new perspectives in the search for the understanding of solidification. That this problem covers many coupled disciplines no longer poses a problem. Thus, the coupling between the hydrodynamics of the liquid phase and the mechanism of solidification itself seems to be better taken into account. And, as a consequence, various contributions try to act on the parameters governing fluid motion, showing the effects of exterior forces (reduced gravity or an applied magnetic field, for example), with the aim of controlling such and such a property of the material *in fine*. However, numerical simulation, in turn, presents its own difficulties and challenges, such as following the spatial-temporal variation of segregation in the presence of a columnar structure, or even the optimisation of algorithms for a fixed calculating power. And one remarks that, at least at present, these new techniques require, for their own validation, new, and high precision, experimental results. It seems that, from now on, the research strategies are highly influenced by the existence of numerical simulations, the experiment becoming more and more an argument for validation, and computation replacing repeated experiments, whenever the numerical method has been well validated, notably for dimensioning equipment, and for optimising industrial processes.

This issue of the Comptes Rendus Mecanique follows an earlier special issue on the theme of 'Microgravity and Transfers', published in 2004, which illustrated how the new technique of reducing gravity, possible in experiments in planes in hyperbolic flight or in space vehicles, could advance the understanding of the movement of a liquid.

The theme of this new issue has been set, by choice, wider. Around different procedures, the use of experimentation and numerical simulation show amply the part played by them in academic progress and in actual techniques for the understanding and the control of the phase change by fusion/solidification.

Crystal growth is studied in the framework of different techniques, notably in the presence of a magnetic field. The influence of flow is again the topic of several articles, and the weight of numerical techniques in fluid mechanics is again demonstrated. The study of flow problems in growth cavities is the subject of two review articles at the start of the issue. There are two other articles, based on the lattice Boltzmann technique, a method intermediate between *ab initio* techniques and the usual method based on the assumption of a continuous medium, which illustrate the importance of the coupling between very small and much larger scales. One sees an opening to problems of solidification during surface treatments, notably when these are very rapid.

We should also underline that it is possible to extract from all contributions to this issue particular experimental or numerical examples, which might become true reference studies to be compared with new models.

Finally, this issue, which has world-wide contributions (Australia, Canada, US, Italy, Great Britain, Russia), could be thought of as a fair and balanced snapshot of the up-to-date efforts and progress on the superb challenge that is solidification.

This issue would never have seen the light of day had it not been for effort of several people. Firstly, Rachid Ben-nacer, President of the 4th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer (17–20 May 2005 Paris-Cachan) recommended several articles, Evariste Sanchez-Palencia, Editor-in-chief of the C. R. Mecanique, encouraged the project, and Patrick Huerre, member of the Académie des sciences, has acted as presenter of the issue.

Mireille Flay and Christine Gray looked after the secretariat and publication of this issue with kindness and efficiency, the first working for the Académie des sciences, and the second for Elsevier Masson SAS; they are also thanked.

Our thanks also go to the referees (there is a complete list following this Foreword) who have examined the articles presented here, over a relatively short period, and have contributed to the success of the project.

One of the photos used on the cover (3D dendrites) comes from a greatly regretted colleague, Marie Danielle Dupouy, who died prematurely in 2004. Let this illustration be a modest homage to her memory.

Avant-propos

À de très rares exceptions près, les matériaux solides que nous utilisons (alliages métalliques, verres, céramiques, matières plastiques, etc.) sont tous passés, à un moment crucial de leur histoire, de l'état liquide à l'état solide. Ce changement d'état peut être considéré comme un événement majeur, car il détermine de façon presque définitive les propriétés du matériau, comme sa microstructure avec ou sans grains, ou bien sa composition avec ou sans ségrégations. Il dépend de multiples paramètres, comme les propriétés physiques du matériau, très différentes des métaux aux verres et aux plastiques, comme les paramètres extérieurs du système de solidification (nature du four ou du creuset, gradient de température ou vitesse de refroidissement, vitesse de tirage, action extérieure éventuelle sur l'hydrodynamique de la phase fluide, etc.). Et la façon dont ceux-ci agissent sur le phénomène de solidification, sur la forme instantanée de l'interface, en général instable, sur l'absorption ou le rejet d'un soluté par la phase solide, et, finalement, sur les propriétés d'usage du matériau, constitue l'un des grands défis scientifiques de notre époque avide de technologies avancées et de plus en plus exigeante sur la qualité de ses machines.

Historiquement, depuis l'antiquité, les civilisations successives ont toujours tenté de perfectionner leurs matériaux. Elles visaient d'abord la qualité de leurs armes, instruments nécessaires de leur survie. Puis, progressivement, elles ont accordé une importance de plus en plus grande aux équipements nécessaires à leur agriculture, à leur habitat et à leur industrie. Essentiellement empirique et souvent secret jusqu'au milieu du 20^{ème} siècle, le savoir disponible sur la physique de la solidification est progressivement devenu de plus en plus rationnel, a fait l'objet de publications de plus en plus nombreuses, puis est devenu l'une des disciplines systématiquement enseignées dans les universités. Et pourtant, nombreux sont encore les mystères dissimulés derrière des résultats expérimentaux non expliqués, dont les conséquences technologiques peuvent être considérables, comme le nombre et la taille des canaux ségrégés dans un alliage métallique élaboré dans un four de solidification dirigée, pour ne citer qu'un seul exemple. La physique

sous-jacente, multidisciplinaire et fort complexe, semble maintenant assez bien comprise pour pouvoir faire l'objet d'une formulation précise, même si, souvent, quelques approximations assez bien justifiées sont consenties. Mais cette formulation semble receler tous les pièges imaginables dans des systèmes d'équations couplées et fortement non linéaires.

Les deux dernières décennies, en donnant le jour à des méthodes de simulation numériques puissantes, bien que quelques fois très lourdes, viennent d'ouvrir des perspectives tout à fait nouvelles dans cette quête de connaissance sur la solidification. La multidisciplinarité ne semble plus faire l'objet d'un obstacle. Ainsi, le couplage entre l'hydrodynamique dans la phase liquide et le mécanisme de solidification lui-même semble de mieux en mieux pris en compte. Et, par voie de conséquence, diverses contributions cherchent à agir sur les paramètres du mouvement, en mettant en œuvre des forces extérieures (gravité réduite ou application d'un champ magnétique, par exemple), en vue de contrôler telle ou telle propriété du matériau élaboré in fine. Mais cette activité de simulation numérique, à son tour, présente ses propres difficultés et défis, comme le suivi spatio-temporel de la ségrégation en présence d'une structure colonnaire, ou bien l'optimisation des algorithmes pour une puissance de calcul fixée. Et l'on remarque que, au moins pour l'instant, ces techniques nouvelles requièrent, pour leur propre validation, des expériences nouvelles de grande précision. Il semble bien que les stratégies de recherche soient désormais marquées par l'existence de ces méthodes numériques, l'expérience devenant de plus en plus un argument de validation, et le calcul se substituant aux expériences répétitives, dès lors qu'il est bien validé, notamment pour dimensionner les équipements et optimiser les procédés industriels.

Ce numéro des Comptes rendus Mecanique, succède à un premier numéro spécial au thème bien précis "Microgravité et transferts", publié en 2004, qui illustre comment ce moyen nouveau qu'est la réduction de la gravité, réalisable dans des expériences embarquées dans des avions en vol parabolique ou dans des véhicules spatiaux, pouvait faire progresser la compréhension du rôle du mouvement du liquide. La thématique de ce nouveau numéro a été volontairement souhaitée beaucoup plus large. Autour de différents procédés, l'usage de l'expérimentation et de la simulation numérique témoigne amplement du parti tiré des avancées académiques et techniques actuelles pour la compréhension et le contrôle des manifestations de la transition de phase par fusion/solidification.

La croissance cristalline est analysée dans le cadre de différentes techniques, notamment en présence de champs magnétiques. L'influence de l'écoulement fait encore l'objet de plusieurs articles, et le poids des techniques de mécanique des fluides numérique est encore mis en évidence. L'étude des problèmes d'écoulement dans la configuration des cavités de croissance fait l'objet de deux articles de revue situés au début de ce numéro. On notera aussi que deux autres articles, basés sur la méthode des gaz sur réseau, intermédiaire entre les techniques *ab initio* et la démarche habituelle fondée sur l'hypothèse du milieu continu, illustrent l'importance du couplage entre les très petites échelles et les plus grandes. Et l'on notera l'ouverture vers les problèmes de solidification lors des traitements de surface, notamment lorsque ceux-ci sont très rapides.

Soulignons également qu'il est possible d'extraire de l'ensemble des contributions à ce numéro des cas particuliers expérimentaux ou numériques, susceptibles de devenir de véritables références auxquelles pourront être comparés des modélisations nouvelles.

Enfin, ce numéro, qui s'est ouvert à des contributions tout à fait internationales (Australie, Canada, France, Etats-Unis, Italie, Royaume-Uni, Russie), semble pouvoir être considéré comme une photographie juste et équilibrée des efforts et des progrès de notre époque sur ce superbe défi de la solidification.

Cette édition n'aura pu voir le jour sans la conjugaison de plusieurs efforts. D'abord Rachid Bennacer, président de la 4th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer (May 17–20, 2005, Paris-Cachan), qui a recommandé certains articles, Evariste Sanchez-Palencia responsable des comptes rendus de Mecanique qui a accompagné ce projet par ses encouragements et Patrick Huerre qui a présenté ce numéro à l'Académie des sciences.

Que Mme Mireille Flay et Mme Christine Gray qui ont assuré le travail de secrétariat et d'édition avec gentillesse et efficacité; la première pour l'Académie des sciences et la seconde pour les éditions Elsevier Masson SAS soient également remerciées.

Les remerciements s'adressent également aux experts (dont une liste exhaustive est jointe) qui ont bien voulu dans un délai relativement court faire les rapports sur les articles du présent numéro et ont ainsi contribué à la réussite du projet.

Une des photos de couverture (dendrites 3D) revient à notre regrettée collègue Mme Marie Danielle Dupouy qui nous a quitté prématurément en 2004. Que cette illustration rende un modeste hommage à sa mémoire.

René Moreau

*Member of the Académie des Sciences
Laboratoire EPM-MADYLAM UPR 90 33 CNRS,
ENSHM de Grenoble, INPG,
BP 95, 38402 Saint-Martin d'Hères cedex, France*

Mohammed El Ganaoui

*Laboratoire SPCTS UMR 66 38 CNRS,
Université de Limoges,
47 avenue Albert-Thomas,
87065 Limoges cedex, France*

Roger Prud'homme

*Institut Jean Le Rond D'Alembert UMR 7190 CNRS,
Université Pierre et Marie Curie,
4 place Jussieu,
75252 Paris cedex 05, France*

Available online 22 June 2007